Grundlagen Theoretischer Informatik 3

SoSe 2012 in Trier

Henning Fernau
Universität Trier
fernau@uni-trier.de

Zum Umgang mit *NP*-harten Problemen

- In manchen Anwendungen ist das garantierte Auffinden exakter Lösungen unabdingbar.

- Das bedeutet, dass man (theoretisch) mit nicht-polynomiellen Algorithmen auskommen muss.

- In manchen Anwendungsfällen ist aber das schnelle Auffinden von (irgendwelchen zulässigen, aber möglichst guten) Lösungen wichtig.
  Heute: *(Meta-)Heuristiken* zum schnellen Lösungs-Finden.

Greedy-Algorithmen

- Ziel: exakte/approximative Lösung von Optimierungsproblemen.
- wie bei Verzweigungsalgorithmen und beim dynamischen Programmieren: Lösung durch Erweiterung von Lösungsansätzen
- dynamisches Programm: jeweils beste Erweiterung ($\leadsto$ Tabelle...)
- Greedy: gute, leicht findbare Erweiterung (ohne Tabelle...)
- Grundidee: Nimm immer das beste Stück!

Beispiel: $0/1$-Rucksackproblem,

$$n = 3, \quad (v_1, v_2, v_3) = (3, 5, 6), \quad (g_1, g_2, g_3) = (1, 2, 3), \quad G = 5$$

Greedy-Heuristik hier:

Nimm das Stück mit dem höchsten Wert pro Gewichtsanteil!

Reihenfolge für Beispiel:

$$\frac{3}{1} \geq \frac{5}{2} \geq \frac{6}{3}$$

also: erst Objekt 1 nehmen, dann Objekt 2, dann ... bis G überschritten.

Resultat: Lösung $\{1, 2\}$ mit Wert $3 + 5$ (nicht optimal...)

Bruchteil-Rucksackproblem

- Gegeben: $n \in \mathbb{N}$, $G \in \mathbb{N}$, Vektoren $(v_1, ..., v_n), (g_1, ..., g_n) \in \mathbb{N}^n$
- Gesucht: Wie groß kann der 'Wert' von Objekten werden, deren Gewicht $\sum_{i \in I} g_i$ nicht größer als die Schranke G?
- Aber: Jetzt dürfen Objekte zerteilt werden! $\rightsquigarrow$ Relaxation
- als Lösung daher jetzt ein Vektor $(a_1, ..., a_n)$ mit $a_i \in \mathbb{Q}$ und $0 \leq a_i \leq 1$ (statt einer Menge I)
- formal: bestimme

$$\max\{\sum_{i=1}^{n} a_i v_i \mid a_i \in [0,1] \text{ mit } \sum_{i=1}^{n} a_i g_i \leq G\}$$

Greedy-Ansatz für das Bruchteil-Rucksackproblem:

Sortiere alle Objekte nach Wert v_i/g_i, d.h. $\frac{v_1}{g_1} \geq \frac{v_2}{g_2} \geq ... \geq \frac{v_n}{g_n}$

dann nimm soviel von den hochwertigen Objekten, wie möglich...

Algorithmische Lösung:

$k := 0$

WHILE $\sum_{i=1}^{k+1} g_i \leq G$ DO $k := k + 1$ ENDWHILE

$b := (G - \sum_{i=1}^{k} g_i)/g_{k+1}$

Optimale Lösung ist

$(a\_1, a\_2, ..., a\_n) = (\underbrace{1, 1, ...1}_{k}, b, \underbrace{0, 0, ..., 0}_{n-k-1})$

Grundidee zu Nachweis der Optimalität der Lösung:

- Sei $(a'_1, a'_2, ..., a'_n)$ eine andere Lösung.
- Betrachte $j := \min\{i \mid a'_i \neq a_i\}$
- Dann $\sum_{i=1}^{j} g_i < G$, also gibt es $m > j$ mit $a'_m > 0$.
- Transferiere dann Gewicht von Objekt m zu Objekt j,
  (d.h. verkleinere a'_m und vergrößere a'_j soweit wie möglich)
- die entstehende Lösung wäre nicht schlechter...,
  aber 'näher' an $(a_1, a_2, ..., a_n)$

Allgemeine Form der Probleme, bei denen Greedy anwendbar ist:

E sei endliche Menge, $\mathcal{U}$ sei eine Menge von Teilmengen von E.
Die Struktur $(E, \mathcal{U})$ heißt *Teilmengensystem*, wenn

- $\emptyset \in \mathcal{U}$
- $A \subseteq B \wedge B \in \mathcal{U} \Rightarrow A \in \mathcal{U}$

$w : E \to \mathbb{Q}$ sei eine Kostenfunktion,
gesucht wird eine in $\mathcal{U}$ maximale Menge T (bzgl. $\subseteq$) mit maximalen Gesamtkosten

$$w(T) = \sum_{e \in T} w(e)$$

- Die Rolle der Gewichtsschranke G übernimmt das Teilmengensystem $\mathcal{U}$.
- Dabei ist $T \in \mathcal{U}$ maximal in $\mathcal{U}$, wenn kein $T' \in \mathcal{U}$ mit $T \subset T'$ existiert.

Kanonischer Greedy-Algorithmus für Teilmengensysteme:

Ordne die Elemente in $E = \{e_1, ..., e_n\}$,
so dass $w(e_1) \geq w(e_2) \geq ... \geq w(e_n)$
Setze $T := \emptyset$.
FOR $k := 1$ TO n DO
    IF $(T \cup \{e_k\}) \in \mathcal{U}$ THEN $T := T \cup \{e_k\}$
ENDFOR
Ausgabe von T als Lösung

Beispiel: Eine Menge $I \subseteq V$ heißt *unabhängig* im Graphen $G = (V, E)$ gdw. zwei verschiedene $x, y \in I$ sind nicht durch eine Kante verbunden.
Die unabhängigen Knotenmengen bilden ein Teilmengensystem.

Charakterisierung der Probleme, die Greedy-Algorithmus optimal löst:

Ein Teilmengensystem $(E, \mathcal{U})$ heißt *Matroid*,
wenn zusätzlich die *Austauscheigenschaft* gilt:

$$A, B \in \mathcal{U} \wedge |A| < |B| \quad \Rightarrow \quad (\exists x \in B \setminus A)\ A \cup \{x\} \in \mathcal{U}$$

- 'Matroid' verallgemeinert Begriff '(lineare) Unabhängigkeit'
- In Matroiden haben maximale Mengen gleiche Mächtigkeit!
- Unabhängige Knotenmengen in Graphen bilden i.Allg. kein Matroid.

Beispiel für Matroide:

- Seien $n, k \in \mathbb{N}$ gegeben, $k \leq n$
- Betrachte $E = \{1, 2, ..., n\}$
- Setze $\mathcal{U} = \{A \subseteq E \quad : \quad |A| \leq k\}$

Maximale Menge sind hier die k-elementigen Mengen,
die Austauscheigenschaft ist offensichtlich erfüllt.

Weitere Beispiele für Matroide $(E, \mathcal{U})$

- E: endliche Menge von Vektoren,
  $\mathcal{U}$: linear unabhängige Teilmengen von E
  (z.B.: E besteht aus Spalten einer Matrix, daher auch 'Matroid')

- E: Kantenmenge eines endlichen Graphen G,
  $\mathcal{U}$: kreisfreie Teilmengen von E
  (auch *graphisches Matroid* genannt)
  Maximale Elemente von $\mathcal{U}$ sind aufspannende Wälder von G.

Bedeutung der Austauscheigenschaft:

- A und B seien maximale Elemente im Matroid $(E, \mathcal{U})$
- Damit $|A| = |B|$
- Falls $A \neq B$:
  - Wähle $a \in A \setminus B$.
  - Zu $A \setminus \{a\}$ gibt es $b \in B \setminus A$ mit $A' := A \setminus \{a\} \cup \{b\} \in \mathcal{U}$
  - $A' \setminus B$ ist kleiner als $A \setminus B$, $A' \cap B$ ist größer als $A \cap B$
- Also: Man kann A durch Austausch einzelner Elemente schrittweise in B umwandeln, ohne dabei $\mathcal{U}$ zu verlassen!

Satz: Sei $(E, \mathcal{U})$ ein Teilmengensystem.

Der kanonische Greedy-Algorithmus liefert beim Optimierungsproblem genau dann **für jede beliebige** Kostenfunktionen $w : E \to \mathbb{Q}$ die optimale Lösung, wenn $(E, \mathcal{U})$ ein Matroid ist.

Beweis von "$\Leftarrow$":

- gegeben: $(E, \mathcal{U})$ Matroid, $w : E \to \mathbb{Q}$ Gewichtsfunktion
- O.B.d.A.: bereits Ordnung $w(e_1) \geq w(e_2) ... \geq w(e_n)$ vorhanden
- $T = \{e_{i_1}, ..., e_{i_k}\}$ sei Lösung durch Greedy-Algorithmus.
- Annahme: Greedy-Algorithmus liefert nicht die optimale Lösung.
- $T' = \{e_{j_1}, ..., e_{j_k}\}$ sei bessere Lösung, d.h. $w(T') > w(T)$.
- O.B.d.A.: $i_1 < i_2 < ... < i_k$ und $j_1 < j_2 < ... < j_k$
- Also existiert minimales μ mit $w(e_{j_\mu}) > w(e_{i_\mu})$,
  insbesondere dabei $j_\mu < i_\mu$
- Wende Austauscheigenschaft auf $A = \{e_{i_1}, ..., e_{i_{\mu-1}}\}$ und $B = \{e_{j_1}, ..., e_{j_\mu}\}$ an:

  Es gibt $e_{j_\sigma} \in B \setminus A$ mit $A \cup \{e_{j_\sigma}\} \in \mathcal{U}$
- Mit $\sigma \leq \mu$ jedoch $w(e_{j_\sigma}) \geq w(e_{j_\mu}) > w(e_{i_\mu})$, d.h. Greedy-Algorithmus hätte e_{j_σ}vor e_{i_μ} in T aufnehmen müssen. Widerspruch!

Indirekter Beweis von "$\Rightarrow$":

- Annahme: Austauscheigenschaft gilt nicht,
  aber Greedy liefert für jedes w optimale Lösung.
- Also gibt es $A, B \in \mathcal{U}$ mit $(\forall b \in B \backslash A) A \cup \{b\} \notin \mathcal{U}$.
- Setze $r := |B|$ und betrachte folgende Kostenfunktion w:

$$w(e) := \begin{cases} r+1, & e \in A \\ r, & e \in B \backslash A \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$

- Greedy-Algorithmus: Lösung T mit $A \subseteq T$ und $T \cap (B \setminus A) = \emptyset$.
- Wegen $B \in \mathcal{U}$ gibt es auch eine Lösung T' mit $B \subseteq T'$
- Dann jedoch

$$\begin{aligned} w(T) &= (r+1) \cdot |A| \leq (r+1) \cdot (r-1) = r^2 - 1 \\ w(T') &\geq r \cdot |B| = r^2 \end{aligned}$$

  Also $w(T) < w(T')$, d.h. Greedy versagt bei diesem w. Widerspruch!

Folgerungen

- Teilmengensysteme erlauben die Anwendung von Greedy-Algorithmen
- Matroide führen zu optimaler Lösung
- Oft jedoch: Austauscheigenschaft nicht vollständig erfüllt
  (z.B.: $\exists$ mehrere maximale Mengen mit untschiedlicher Mächtigkeit)
  also Greedy-Lösung nicht optimal, sondern nur approximativ
- mögliches anderes Problem:
  nicht-additive Kostenfunktion, $w(T) \neq \sum_{e \in T} w(e)$
- aber: Greedy liefert oft gute Heuristik!

Im Folgenden: Beispiele für 'gute' Greedy-Heuristiken bei Färbbarkeit und TSP.

Färbbarkeit

- Gegeben Graph $G = (V, E)$
- Ziel: Färbe Knoten mit möglichst wenigen Farben,
  d.h. suche 'kleines' $k \in \mathbb{N}$ und Funktion $f : V \to \{0, ..., k-1\}$,
  so dass für Kanten $(u, v) \in E$ stets $f(u) \neq f(v)$.
- Greedy-Heuristik:
  - Sortiere V nach Grad $\delta(v)$ der Knoten $v \in V$,
    also o.B.d.A.: $V = \{v_1, ..., v_n\}$ mit $\delta(v_i) \geq \delta(v_{i+1})$.
  - Wiederhole für $\mu = 1, 2, ..., n$: Setze

$$f(\mu) := \min(\mathbb{N} \setminus \{f(i) \mid i < \mu, (v_i, v_\mu) \in E\})$$

  - Jeder Knoten erhält also, in der Reihenfolge absteigender Grade, die jeweils kleinstmögliche Farbe.
- Jeder Graph mit maximalem Grad Δ wird dabei mit höchstens $\Delta + 1$ Farben gefärbt!

"Klar": 2-färbbare (d.h. bipartite) Graphen sind in Polynomzeit färbbar! Damit:
Lemma: Jeder 3-färbbare Graph mit n Knoten und Grad Δ kann in Polynomzeit mit $\mathcal{O}(\min(\Delta, \sqrt{n}))$ Farben gefärbt werden.

Beweis dazu:

- Ist G 3-färbbar, dann ist bei jedem Knoten v die Menge $N(v)$ seiner Nachbarn 2-färbbar!
- Für jeden Knoten $v \in V$ mit $\delta(v) \geq \sqrt{n}$ ist $\overline{N}(v) := N(v) \cup \{v\}$ also schnell mit 3 (neuen) Farben färbbar.
  Danach entferne $\overline{N}(v)$ aus dem Graphen.
- Da $|N(v)| \geq \sqrt{n}$: Nach maximal $\sqrt{n}$ Iterationen kein Knoten mehr in G mit $\delta(v) \geq \sqrt{n}$.
- Rest des Graphen dann mit $\leq \sqrt{n}$ weiteren Farben färbbar!

Bestes bekanntes Resultat (Baumann, 2004): Färbung 3-färbbarer Graphen in Polynomzeit mit $\mathcal{O}(n^{3/14})$ Farben. `http://archiv.tu-chemnitz.de/pub/2004/0142/data/Diplomarbeit-Tobi Baumann.pdf`

Greedy-Algorithmen für TSP

- Grundidee: Konstruiere sukzessive immer längere Strecken,
  bis schließlich eine Rundreise entsteht...
- Heuristik ‘Nearest Neighbor’:
  Gehe vom aktuellen Tour-Ende immer zur nächstliegenden neuen Stadt
- Heuristik ‘Tourerweiterungen’:
  - Starte mit kurzer Tour aus zwei Städten.
  - Erweitere Tour iterativ um je einen Knoten; Heuristiken dabei:
    — ‘Random Insertion’: zufällige Knotenwahl
    — ‘Farthest Insertion’: Maximiere Minimalabstand zur aktuellen Route
  - Gewählter Knoten wird an optimaler Position in die Tour eingefügt.
- ‘Nearest Neighbor’ ist nur mäßig erfolgreich: Anfangs viele kurze Strecken, aber am Ende kostspieliges Einsammeln übersehener, weit auseinanderliegender Städte
  (aber mit Nachverbesserungen evtl. brauchbar, s. lokale Suche)
- ‘Farthest Insertion’ scheint die bessere Heuristik zu sein:
  Grobstruktur der Route wird relativ schnell festgelegt!

Lokale Suche zur Verbesserung von gefundenen Lösungen:

- Greedy-Algorithmus liefert Startwert für Maximumsuche...
- Ziel wie bei der Austauscheigenschaft: teste lokale Änderungen
  d.h.: tausche beliebig $a \in A$ gegen $b \in B \setminus A$
- z.B.: nach Konstruktion einer Lösung: entferne Teile der Lösung und suche eine 'Zeitlang' nach Verbesserungen

Grundstruktur:

```
Erzeuge eine Anfangslösung L.
REPEAT
   Modifiziere L zufällig zu L'
   IF L' ist besser als L THEN L = L' ENDIF
UNTIL längere Zeit keine Verbesserung gefunden
AUSGABE von L
```

Prinzipieller Nachteil:

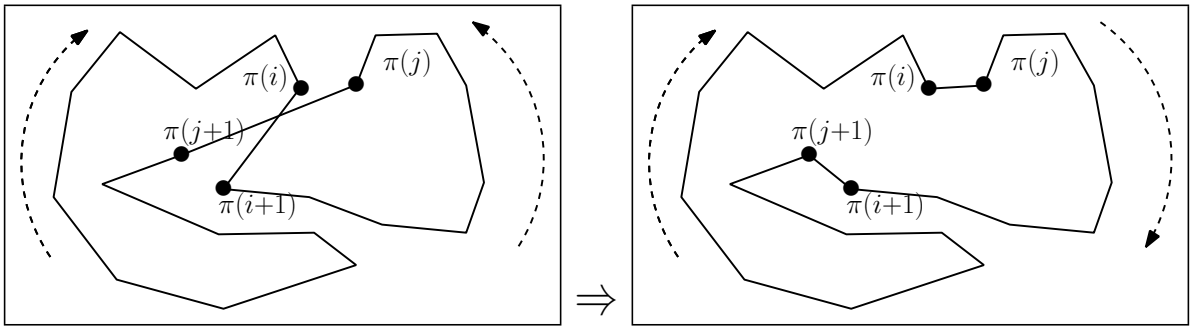
- die gefundene Lösung ist ein 'lokales Optimum';
- das globale Optimum kann beliebig weit entfernt sein!

2-Opt-Heuristik bei TSP

- Betrachte TSP mit symmetrischen Entfernungen $m_{i,j} = m_{j,i}$ (ungerichteter Graph)
- Lösungen mit unendlichen Kosten seien erlaubt!
- Beginne mit beliebiger Permutation π der Knoten (zulässig!)
- Wähle zufällig zwei Knoten $\pi(i)$, $\pi(j)$ (mit $i < j$). Falls

$$m_{\pi(i),\pi(i+1)} + m_{\pi(j),\pi(j+1)} > m_{\pi(i),\pi(j)} + m_{\pi(i+1),\pi(j+1)}$$

gilt, dann gibt es eine kürzere Route / bessere Permutation:



$$\rightsquigarrow \pi(1)\pi(2)...\pi(i)\pi(j)\pi(j-1)...\pi(i+2)\pi(i+1)\pi(j+1)...\pi(n)$$

- Animation: www-e.uni-magdeburg.de/mertens/TSP/TSP.html
- Laufzeit und Güte der Heuristik sind unbekannt!

Weitere Meta-Heuristiken:

- Grundidee des *Simulated Annealing* (simulierte Abkühlung):
  - Erlaube bei lokaler Suche auch Zwischenlösungen, die um $c(t)$ schlechter sind als die aktuelle Lösung;
  - aber: $c(t)$ geht mit wachsender Rechenzeit gegen 0, etwa

$$c(t) = \mathcal{O}(1/\log t)$$

- Grundidee der *genetischen Algorithmen*:
  - Speichere mehrere verschiedenartige Lösungen.
  - Kombiniere jeweils mehrere Lösungen und verwende die besseren Resultate.