

Descomposición en *landscapes* elementales del problema de la suma de subconjunto

Francisco Chicano y Enrique Alba

Universidad de Málaga

{chicano,eat}@lcc.uma.es

Resumen

La suma de subconjunto es un conocido problema NP-completo de especial relevancia en la teoría de la complejidad y la optimización combinatoria. En este trabajo analizamos dicho problema desde el punto de vista de la teoría de *landscapes* y damos una descomposición del problema en *landscapes* elementales. Además de esto, analizamos algunas aplicaciones teóricas y prácticas de dicha descomposición.

1. Introducción

Un *landscape* para un problema de optimización combinatoria es una terna (X, N, f) , donde $f : X \rightarrow \mathbb{R}$ define la función objetivo y el *vecindario* $N : X \rightarrow \mathcal{P}(X)$ es una función que asigna un conjunto de soluciones a cada $x \in X$ ($\mathcal{P}(X)$ denota el conjunto potencia de X). Si $y \in N(x)$ entonces decimos que y es un vecino de x .

Hay un tipo de *landscape* de especial interés debido a sus propiedades. Son los llamados *landscapes elementales* y se encuentran caracterizados por una *ecuación de onda* debida a Grover [6]:

$$\text{avg}\{f(y)\}_{y \in N(x)} = f(x) + \frac{k}{d} (\bar{f} - f(x)) \quad (1)$$

donde d es el tamaño del vecindario, $|N(x)|$, que asumimos que es el mismo para todas las soluciones en el espacio de búsqueda, \bar{f} es la media de la función objetivo en el espacio completo de búsqueda y k es una constante característica. El valor de k se puede obtener anali-

zando el problema teóricamente y el valor de \bar{f} se calcula normalmente en tiempo polinomial a partir de los datos del problema. Ambos son, por tanto, fáciles de obtener teóricamente (como veremos en las siguientes secciones). Sin embargo, también es posible obtener ambos valores empíricamente aplicando la ecuación de onda a soluciones aleatoriamente generadas y despejando k y \bar{f} de ella. En el mejor caso, este segundo enfoque requerirá la evaluación de $2(d+1)$ soluciones del espacio de búsqueda (dos soluciones aleatorias y sus respectivos vecindarios si son disjuntos).

La ecuación de onda permite calcular el valor medio de la función objetivo f en el vecindario de una solución x usando sólo el valor de $f(x)$; denotaremos esta media con $\text{avg}\{f(y)\}_{y \in N(x)}$:

$$\text{avg}\{f(y)\}_{y \in N(x)} = \frac{1}{|N(x)|} \sum_{y \in N(x)} f(y)$$

Otra propiedad de los *landscapes elementales* es la siguiente. Suponiendo que $f(x) \neq \bar{f}$ entonces o bien

$$f(x) < \min \left\{ \text{avg}\{f(y)\}_{y \in N(x)}, \bar{f} \right\}$$

o bien

$$f(x) > \max \left\{ \text{avg}\{f(y)\}_{y \in N(x)}, \bar{f} \right\}.$$

Esto implica que todos los máximos locales son mayores que \bar{f} y todos los mínimos son menores que \bar{f} [11].

Un *landscape* (X, N, f) no es siempre elemental, ya que no siempre se cumple la ecuación

ción de ondas. No obstante, incluso en este caso es posible caracterizar la función f como suma de *landscapes* elementales [9], llamados *componentes elementales* del *landscape*.

Tal descomposición es útil desde un punto de vista teórico y práctico. En la teoría, la descomposición de un problema se puede usar para calcular la expresión exacta de las funciones de autocorrelación, el coeficiente de autocorrelación y la longitud de autocorrelación [1]. Las anteriores medidas de autocorrelación permiten caracterizar la función objetivo de tal forma que se pueden realizar predicciones del rendimiento de determinadas técnicas de búsqueda local. Desde un punto de vista práctico, la descomposición en *landscapes* elementales junto con la ecuación de onda de Grover se puede usar para calcular el valor medio de la función objetivo en el vecindario de una solución, lo cual puede ser la base para el desarrollo de nuevos operadores o algoritmos [12].

En este artículo presentamos la descomposición en *landscapes* elementales del problema de la suma de subconjunto y algunas implicaciones teóricas y prácticas de dicha descomposición. El artículo está organizado como sigue. La Sección 2 describe el problema de la suma de subconjunto mientras que la Sección 3 descompone el problema en *landscapes* elementales. Revisaremos algunas aplicaciones de tal descomposición en la Sección 4 y terminaremos el artículo en la Sección 5 presentando las conclusiones y líneas de trabajo futuro.

2. Suma de subconjunto

Dado un conjunto de enteros $S = \{s_1, s_2, \dots, s_n\}$ el problema consiste en encontrar un subconjunto no vacío de S cuya suma sea una constante determinada C (si hay alguna suma con estas características). Este problema se puede transformar en un problema de minimización con función objetivo

$$f(x) = \left(\sum_{i=1}^n s_i x_i - C \right)^2 \quad (2)$$

donde $x_i \in \{0, 1\}$ son las variables de decisión del problema. El tamaño del espacio de

búsqueda $|X|$ es 2^n . Para definir un *landscape* necesitamos un elemento adicional además del espacio de soluciones y la función objetivo: el vecindario. En nuestro caso usaremos el vecindario más comúnmente empleado con la representación binaria: el de inversión de bits. En este vecindario dos soluciones son vecinas si una de ellas puede obtenerse a partir de la otra mediante la inversión de una variable de decisión x_i .

3. Descomposición en *landscapes* elementales

Para hallar la descomposición de la suma de subconjunto haremos uso de las funciones de Walsh [9]. Dado el conjunto de cadenas binarias de longitud n , $\{0, 1\}^n$, la función de Walsh con parámetro $w \in \{0, 1\}^n$ se define como:

$$\psi_w(x) = \prod_{i=1}^n (-1)^{w_i x_i} = (-1)^{\sum_{i=1}^n w_i x_i} \quad (3)$$

Es fácil demostrar que $\psi_w \cdot \psi_v = \psi_{w+v}$ donde $w + v$ es la suma dígito a dígito y en \mathbb{Z}_2 de w y v . Otra propiedad útil de las funciones de Walsh es $\psi_w \cdot \psi_w = \psi_{2w} = \psi_0 = 1$. Se denomina *orden* de una función de Walsh ψ_w al valor $\sum_{i=1}^n w_i$, el número de unos de w .

La principal ventaja de las funciones de Walsh en nuestros desarrollos es que todas ellas son funciones elementales en el vecindario de inversión de bits. En particular, una función de Walsh de orden p es elemental con constante característica $k = 2p$. Además el valor medio de cualquier función de Walsh con orden no nulo es cero, es decir, $\overline{\psi_w} = 0$ si w tiene al menos un 1. La única función de Walsh de orden cero es $\psi_0 = 1$ y es una constante.

En este artículo sólo necesitaremos las funciones de Walsh de orden 1 y 2, por lo que vamos a introducir una notación especial para ellas. Llamaremos ψ_i a la función de Walsh de orden 1 cuyo parámetro tiene su único 1 en el i -ésimo dígito. Por otro lado, denotaremos con ψ_{ij} a la función de Walsh de orden 2 cuyo parámetro tiene dos 1 en el i -ésimo y el j -ésimo dígito. Haciendo uso de la nueva notación podemos escribir $\psi_i \cdot \psi_j = \psi_{ij}$ si $i \neq j$

y $\psi_i^2 = 1$, dos equivalencias que usaremos en varias ocasiones en esta sección.

El primer paso para descomponer la suma de subconjunto es reescribir la ecuación (2) desarrollando el cuadrado. El resultado es el siguiente:

$$\begin{aligned} f(x) &= \left(\sum_{i=1}^n s_i x_i \right)^2 + C^2 - 2C \sum_{i=1}^n s_i x_i = \\ &= \sum_{i,j=1}^n s_i s_j x_i x_j + C^2 - 2C \sum_{i=1}^n s_i x_i = \\ &= \sum_{i,j=1}^n q_{ij} x_i x_j + C^2 \end{aligned} \quad (4)$$

donde las constantes q_{ij} se definen en función de las s_i y de C de la siguiente forma:

$$q_{ij} = \begin{cases} s_i s_j & \text{si } i \neq j \\ s_i (s_i - 2C) & \text{si } i = j \end{cases} \quad (5)$$

Obsérvese que, de acuerdo con la definición anterior, $q_{ij} = q_{ji}$. A continuación podemos usar las funciones de Walsh para expresar (4) en función de ellas. Para esto tendremos en cuenta que $\psi_i(x) = 1 - 2x_i$ o, equivalentemente, $x_i = (1 - \psi_i(x))/2$. Sustituyendo en (4) tenemos:

$$f = \sum_{i,j=1}^n q_{ij} \frac{(1 - \psi_i)(1 - \psi_j)}{4} + C^2 \quad (6)$$

y desarrollando la expresión llegamos a

$$\begin{aligned} f &= C^2 + \frac{1}{4} \left[\sum_{i,j=1}^n q_{ij} - \sum_{i,j=1}^n q_{ij} (\psi_i + \psi_j) + \right. \\ &\quad \left. + \sum_{i,j=1}^n q_{ij} \psi_i \psi_j \right] = \\ &= C^2 + \frac{1}{4} \left[\sum_{i,j=1}^n q_{ij} - 2 \sum_{i=1}^n v_i \psi_i + \right. \\ &\quad \left. + \sum_{i=1}^n q_{ii} + \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^n q_{ij} \psi_{ij} \right] \end{aligned} \quad (7)$$

donde hemos hecho uso de $\psi_i \psi_j = \psi_{ij}$ si $i \neq j$, de $\psi_i^2 = 1$, de la simetría de q y hemos introducido un nuevo vector v cuyas componentes se definen mediante:

$$v_i = \sum_{j=1}^n q_{ij} \quad (8)$$

La ecuación (7) desvela la descomposición en *landscapes* elementales de la función objetivo f . Podemos distinguir tres términos explícitamente diferenciados en (7) que podemos redefinir como funciones:

$$f_0 = C^2 + \frac{1}{4} \left(\sum_{i,j=1}^n q_{ij} + \sum_{i=1}^n q_{ii} \right) \quad (9)$$

$$f_2 = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n v_i \psi_i \quad (10)$$

$$f_4 = \frac{1}{4} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^n q_{ij} \psi_{ij} \quad (11)$$

La primera función, f_0 , es una constante y, como tal, es un componente elemental con $k = 0$. La segunda función, f_2 , es una suma ponderada de funciones de Walsh de orden 1. Las funciones de Walsh de orden 1 son elementales con constante $k = 2$. Por otro lado, la combinación lineal de funciones elementales con la misma constante característica k es también una función elemental con la misma constante característica. Por lo tanto f_2 es un componente elemental con $k = 2$. Por último, la tercera función, f_4 , es una combinación lineal de funciones de Walsh de segundo orden, que son elementales con $k = 4$. Por lo tanto f_4 es elemental con $k = 4$.

Obsérvese que la función objetivo del problema f es la suma de las tres anteriores, esto es, $f = f_0 + f_2 + f_4$. Si una función es elemental en un vecindario, al sumarle una constante obtenemos otra función también elemental con la misma constante característica. Esta propiedad de los *landscapes* elementales la podemos usar en nuestro caso para sumar f_0 a f_2 o f_4 y reducir así el número de componentes elementales en la descomposición de f . Es más, al

contar el número de componentes elementales es habitual no tener en cuenta la componente constante [4]. Podemos por tanto decir que la función objetivo f de la suma de subconjunto es una suma de dos *landscapes* elementales y que sus componentes elementales vienen dadas por la expresiones $f_0 + f_2$ y f_4 .

En lo que sigue nos centraremos en f_2 y f_4 , que son las componentes elementales que ofrecen mayor información del problema (ya que f_0 es una constante). Para terminar esta sección vamos a reescribir f_2 y f_4 a partir de las variables de entrada usando las propiedades de las funciones de Walsh:

$$f_2(x) = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n v_i(1 - 2x_i) \quad (12)$$

$$f_4(x) = \frac{1}{4} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^n q_{ij}(1 - 2|x_i - x_j|) \quad (13)$$

4. Aplicaciones

La descomposición en *landscapes* elementales de la suma de subconjunto permite calcular el valor medio de la función objetivo en el vecindario de cualquier solución sin necesidad de evaluar a los vecinos de dicha solución. Teniendo en cuenta la ecuación de onda de Grover (1), este valor medio se puede calcular como

$$\begin{aligned} \text{avg}\{f(y)\}_{y \in N(x)} &= \text{avg}\{f_0(y)\}_{y \in N(x)} + \text{avg}\{f_2(y)\}_{y \in N(x)} + \\ &+ \text{avg}\{f_4(y)\}_{y \in N(x)} = f_0(x) + f_2(x) - \\ &- \frac{2}{n}f_2(x) + f_4(x) - \frac{4}{n}f_4(x) = \\ &= f(x) - \frac{2}{n}f_2(x) - \frac{4}{n}f_4(x) \quad (14) \end{aligned}$$

donde hemos tenido en cuenta que el valor medio de f_2 y f_4 es cero debido a que también lo es el de las funciones de Walsh.

La expresión anterior tan sólo requiere una evaluación de f , f_2 y f_4 en x para calcular la media de los n vecinos del vecindario. No obstante, aún podemos hacer más eficientes los

cálculos para este caso particular. La evaluación de f_4 es más costosa que la de f_2 debido al doble sumatorio. Teniendo en cuenta que $f = f_0 + f_2 + f_4$ podemos sustituir f_4 por $f - f_0 - f_2$ en (14) para obtener:

$$\text{avg}\{f(y)\}_{y \in N(x)} = \left(1 - \frac{4}{n}\right) f(x) + \frac{2}{n}f_2(x) + \frac{4}{n}f_0 \quad (15)$$

que es menos costosa ya que sólo requiere realizar sumas simples de orden $O(n)$. La expresión (15) se puede usar como base para nuevos operadores que exploten la información de la media en el vecindario. Por ejemplo, es posible diseñar nuevos operadores de selección que elijan a los individuos de acuerdo con el valor medio de la función objetivo en el vecindario de una solución (véase la Figura 1). En los *landscapes* elementales la selección de un individuo en base a su valor objetivo (*fitness*) es equivalente a la selección de un individuo en base a la media en el vecindario, ya que existe una relación lineal exacta entre ambos $\text{avg}\{f(y)\}_{y \in N(x)} = af(x) + b$. Sí hay diferencia, en cambio, cuando la función no es elemental. En la Figura 1 (arriba) se muestra una situación en la que la selección tradicional basada en *fitness* escogería la solución de la derecha (suponemos minimización), que no parece ser la selección más apropiada en este caso. Una estrategia de selección basada en la media del vecindario preferiría la solución de la izquierda, ya que los vecinos de la solución son prometedores (tienen un *fitness* bajo).

La selección basada en la media del vecindario podría ser especialmente interesante en el caso de *plateaus*, como se muestra en la Figura 1 (abajo). En este caso, la estrategia de selección basada en la media podría distinguir entre dos soluciones con el mismo valor de *fitness*, teniendo en cuenta el vecindario de las soluciones.

A continuación presentamos una aplicación teórica de la descomposición en *landscapes* elementales de la suma de subconjunto.

4.1. Autocorrelación

El coeficiente de autocorrelación ξ de un problema es un parámetro propuesto por Angel y Zissimopoulos [3] que pretende ser una medida de la rugosidad (*ruggedness*) de un *landscape*. Este coeficiente tiene relación con el número de óptimos locales del *landscape* y el rendimiento que los métodos de búsqueda local tienen cuando son aplicados al problema. Cuanto mayor es el valor de ξ menor tiende a ser el número de óptimos locales y mejor suele ser el rendimiento de las técnicas de búsqueda local. La definición de ξ se basa en la función de autocorrelación ρ propuesta por Weinberger [10], que se define como

$$\rho(s) = 1 - \frac{\langle (f(x) - f(y))^2 \rangle_{d(x,y)=s}}{\langle (f(x) - f(y))^2 \rangle} \quad (16)$$

donde $\langle (f(x) - f(y))^2 \rangle$ es el valor medio de $(f(x) - f(y))^2$ sobre todos los pares de soluciones x e y y $\langle (f(x) - f(y))^2 \rangle_{d(x,y)=s}$ es el valor medio de $(f(x) - f(y))^2$ sobre todos los pares de soluciones x, y que se encuentran a distancia s uno del otro. Decimos que dos soluciones están a distancia s si existe una secuencia de soluciones $x = x_0, x_1, \dots, x_s = y$ tal que $x_{i+1} \in N(x_i)$. El coeficiente de autocorrelación se define entonces como $\xi = \frac{1}{1-\rho(1)}$.

Existe otra función de autocorrelación distinta de ρ . Consideremos un camino aleatorio $\{x_0, x_1, \dots\}$ en el espacio de soluciones tal que

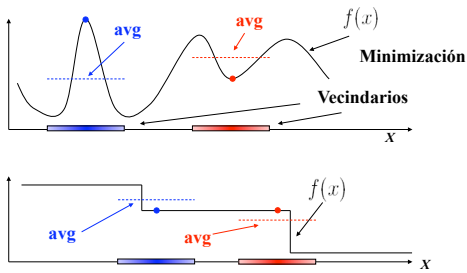


Figura 1: En los dos escenarios mostrados aquí una estrategia de selección basada en el *fitness* medio del vecindario sería más apropiada que una estrategia basada en el *fitness* de la solución.

$x_{i+1} \in N(x_i)$. La función de autocorrelación r se define como:

$$r(s) = \frac{\langle f(x_t)f(x_{t+s}) \rangle_{x_0,t} - \langle f(x_t) \rangle_{x_0,t}^2}{\langle f(x_t)^2 \rangle_{x_0,t} - \langle f(x_t) \rangle_{x_0,t}^2} \quad (17)$$

donde las medias se calculan sobre todas las soluciones iniciales x_0 y todas las soluciones en el camino. Las funciones de autocorrelación ρ y r son diferentes en general, pero tienen el mismo valor para $s = 1$, $\rho(1) = r(1)$ [1].

Stadler [7] demostró que si $f = \sum_i a_i \phi_i$ es un desarrollo de Fourier de f tomando como base las funciones ϕ_i elementales y ortogonales, entonces la función de autocorrelación f viene dada por

$$r(s) = \sum_{i \neq 0} \frac{a_i^2}{\sum_{j \neq 0} a_j^2} \left(1 - \frac{k_i}{d}\right)^s \quad (18)$$

donde k_i es la constante característica asociada con la función elemental ϕ_i . En particular, para un *landscape* elemental $r(s) = (1 - k/d)^s$, y el coeficiente de autocorrelación es $\xi = d/k$. Para un *landscape* general (elemental o no) tenemos el siguiente resultado

$$r(1) = \frac{\sum_{i \neq 0} a_i^2 \left(1 - \frac{k_i}{d}\right)}{\sum_{j \neq 0} a_j^2} = 1 - \frac{\sum_{i \neq 0} a_i^2 \frac{k_i}{d}}{\sum_{j \neq 0} a_j^2}$$

y el coeficiente de autocorrelación se puede calcular como

$$\xi = \frac{d \sum_{j \neq 0} a_j^2}{\sum_{i \neq 0} a_i^2 k_i} \quad (19)$$

La suma de los coeficientes de Fourier al cuadrado a_j^2 asociados con funciones elementales con la misma constante característica k_i es $|X|(\bar{f}_i^2 - f_i^2)$, donde f_i es la suma de todas las componentes ponderadas de la base de Fourier $a_i \phi_i$ con la misma k_i y la barra sobre el nombre de la función representa la media en el espacio completo de búsqueda X . En particular, para la suma de subconjunto tenemos la siguiente expresión para el coeficiente de autocorrelación

$$\xi = \left(W_2 \frac{2}{n} + W_4 \frac{4}{n} \right)^{-1} \quad (20)$$

donde los valores W_i se definen como

$$W_i = \frac{\overline{f_i^2} - \overline{f_i}^2}{\overline{f^2} - \overline{f}^2} \quad (21)$$

Aún podemos simplificar (20) para hacer el cálculo más sencillo. Para ello tendremos en cuenta que por la definición de las constantes W_i se tiene que cumplir $W_2 + W_4 = 1$. Entonces sustituyendo W_4 por $1 - W_2$ en (20) y desarrollando obtenemos:

$$\xi = \frac{n}{2(2 - W_2)} \quad (22)$$

que sólo depende de W_2 .

Otro parámetro que mide la rugosidad de un *landscape* es la longitud de autocorrelación [5] que se define a partir de la función r de autocorrelación como:

$$\ell = \sum_{s=0}^{\infty} r(s) = d \sum_{i \neq 0} \frac{W_i}{k_i} \quad (23)$$

En el caso de la suma de subconjunto la longitud de autocorrelación es:

$$\ell = n \left(\frac{W_2}{2} + \frac{W_4}{4} \right) = \frac{n(1 + W_2)}{4} \quad (24)$$

Puede observarse que tanto (20) como (24) crecen con W_2 y además sus valores se encuentran entre $n/4$ cuando $W_2 = 0$ y $n/2$ cuando $W_2 = 1$. Sin embargo, ℓ crece de forma lineal con W_2 mientras que el crecimiento de ξ es no lineal. La longitud de autocorrelación tiene especial relevancia en optimización debido a la *conjetura de la longitud de autocorrelación* que afirma que en muchos *landscapes* el número de óptimos locales M se puede estimar mediante la fórmula [8]:

$$M \approx \frac{|X|}{|X(x_0, \ell)|} \quad (25)$$

donde $X(x_0, \ell)$ representa el conjunto de soluciones que se pueden alcanzar a partir de una solución arbitraria x_0 en ℓ o menos movimientos. La expresión anterior no es exacta, sino tan sólo una aproximación, pero puede ser útil para comparar el número estimado de óptimos

locales en dos instancias del mismo problema. En efecto, para un problema determinado en el que la aproximación (25) es válida, cuanto mayor sea ℓ (o ξ) menor será el número de óptimos locales y más fácil será para una técnica de búsqueda encontrar el óptimo global. Este fenómeno ha sido empíricamente observado para el problema de la asignación cuadrática (*Quadratic Assignment Problem*, QAP) por Angel y Zissimopoulos en [2].

Centrándonos de nuevo en el problema de la suma de subconjunto, lo único que necesitamos para poder calcular tanto ℓ como ξ es conocer el valor de W_2 . De acuerdo con (21) este parámetro se puede calcular mediante:

$$W_2 = \frac{\overline{f_2^2}}{\overline{f^2} - \overline{f}^2} \quad (26)$$

donde hemos tenido en cuenta que $\overline{f_2} = 0$. Puesto que $\overline{f_4} = 0$, tenemos que $\overline{f} = f_0$, luego los únicos términos que necesitamos calcular de (26) son $\overline{f_2^2}$ y $\overline{f^2}$. Usando (10) escribimos:

$$\begin{aligned} \sum_{x \in X} f_2^2 &= \sum_{x \in X} \left(-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n v_i \psi_i \right)^2 = \\ &= \frac{1}{4} \sum_{x \in X} \sum_{i,j=1}^n v_i v_j \psi_i \psi_j = \\ &= \frac{1}{4} \sum_{i,j=1}^n v_i v_j \left(\sum_{x \in X} \psi_i \psi_j \right) \end{aligned} \quad (27)$$

El segundo sumatorio puede simplificarse si tenemos en cuenta las propiedades de las funciones de Walsh. En particular, sabemos que $\psi_i^2 = 1$, luego si $i = j$ la suma $\sum_{x \in X} \psi_i \psi_j = |X|$. Por otro lado, $\psi_i \psi_j = \psi_{ij}$ cuando $i \neq j$ y además $\overline{\psi_{ij}} = 0$, lo que implica que $\sum_{x \in X} \psi_i \psi_j = 0$ cuando $i \neq j$. Todo esto nos lleva a reescribir (27) como

$$\sum_{x \in X} f_2^2 = \frac{|X|}{4} \sum_{i=1}^n v_i^2 \quad (28)$$

y el valor de $\overline{f_2^2}$ es:

$$\overline{f_2^2} = \frac{1}{|X|} \sum_{x \in X} f_2^2 = \frac{1}{4} \sum_{i=1}^n v_i^2 \quad (29)$$

expresión que puede calcularse en tiempo lineal $O(n)$.

Para calcular $\overline{f^2}$ partiremos de la ecuación (4) obteniendo:

$$\begin{aligned}
\sum_{x \in X} f^2 &= \sum_{x \in X} \left(\sum_{i,j=1}^n q_{ij} x_i x_j + C^2 \right)^2 = \\
&= \sum_{x \in X} \left[C^4 + 2C^2 \sum_{i,j=1}^n q_{ij} x_i x_j + \right. \\
&\quad \left. + \left(\sum_{i,j=1}^n q_{ij} x_i x_j \right)^2 \right] = \\
&= |X|C^4 + 2C^2 \sum_{i,j=1}^n q_{ij} \left(\sum_{x \in X} x_i x_j \right) + \\
&\quad + \sum_{i,j,i',j'=1}^n q_{ij} q_{i'j'} \left(\sum_{x \in X} x_i x_j x_{i'} x_{j'} \right) = \\
&= |X|C^4 + 2C^2 \sum_{i,j=1}^n q_{ij} t(\{i,j\}) + \\
&\quad + \sum_{i,j=1}^n \sum_{i',j'=1}^n q_{ij} q_{i'j'} t(\{i,j,i',j'\})
\end{aligned} \tag{30}$$

donde hemos introducido una nueva función $t : \mathcal{P}([1, n]) \rightarrow \mathbb{N}$ que está definida por:

$$t(S) = \sum_{x \in X} \prod_{s \in S} x_s \tag{31}$$

La definición de t no permite una evaluación eficiente de la misma. Vamos a simplificar su cálculo teniendo en cuenta que t es una función contadora, es decir, cuenta el número de elementos de X que cumplen una determinada condición. Podemos reescribir la definición de t como:

$$t(S) = \sum_{x \in X} \text{True} \left(\bigwedge_{s \in S} x_s = 1 \right) \tag{32}$$

donde True es una función que asigna 0 al valor lógico *false* y 1 al valor lógico *true*. Mediante la expresión anterior se puede ver claramente que t cuenta el número de soluciones

(elementos de X) que cumplen la condición $\bigwedge_{s \in S} x_s = 1$, es decir, todos los índices de S son 1 en la solución. Usando esta caracterización de t podemos encontrar una expresión alternativa para calcular su valor. En efecto, el número de soluciones que cumplen la anterior condición es $2^{n-|S|}$, luego $t(S) = 2^{n-|S|}$. Con esto podemos reescribir (30) de la siguiente forma:

$$\begin{aligned}
\sum_{x \in X} f^2 &= 2^n C^4 + 2C^2 \sum_{i,j=1}^n q_{ij} 2^{n-|\{i,j\}|} + \\
&\quad + \sum_{i,j=1}^n \sum_{i',j'=1}^n q_{ij} q_{i'j'} 2^{n-|\{i,j,i',j'\}|}
\end{aligned} \tag{33}$$

y $\overline{f^2}$ es entonces:

$$\begin{aligned}
\overline{f^2} &= C^4 + 2C^2 \sum_{i,j=1}^n \frac{q_{ij}}{2^{|\{i,j\}|}} + \\
&\quad + \sum_{i,j=1}^n \sum_{i',j'=1}^n \frac{q_{ij} q_{i'j'}}{2^{|\{i,j,i',j'\}|}}
\end{aligned} \tag{34}$$

expresión que puede calcularse en tiempo polinomial ($O(n^4)$ a lo sumo). Usando (34), (29) y (9) puede calcularse W_2 mediante la ecuación (26). Con el valor W_2 es posible calcular ℓ y ξ usando las ecuaciones (22) y (23).

5. Conclusiones y trabajo futuro

En el presente trabajo hemos demostrado que la suma de subconjunto de puede descomponer como suma de dos *landscapes* elementales y hemos presentado las expresiones exactas para las dos componentes elementales. Posteriormente hemos presentado una aplicación práctica de dicha descomposición: el cálculo del valor medio de la función objetivo en el vecindario de una solución. Esta aplicación puede servir de base para el desarrollo de nuevos operadores o algoritmos de búsqueda. Por otro lado, hemos desarrollado expresiones exactas para calcular el coeficiente de autocorrelación y la longitud de autocorrelación en tiempo polinomial.

Como trabajo futuro pretendemos proponer nuevos operadores para algoritmos evolutivos o nuevos métodos de búsqueda que usen la descomposición en *landscapes* elementales del problema para guiar la búsqueda. Además, estudiaremos otras aplicaciones prácticas de la descomposición de un problema en sus componentes elementales.

Agradecimientos

Este trabajo ha sido parcialmente financiado por el Ministerio de Ciencia e Innovación y fondos FEDER con número de proyecto TIN2008-06491-C04-01 (proyecto M*) y por la Junta de Andalucía con número de proyecto P07-TIC-03044 (proyecto DIRICOM).

Referencias

- [1] E. Angel and V. Zissimopoulos. On the classification of NP-complete problems in terms of their correlation coefficient. *Discrete Applied Mathematics*, 99:261–277, 2000.
- [2] E. Angel and V. Zissimopoulos. On the landscape ruggedness of the quadratic assignment problem. *Theoretical Computer Sciences*, 263:159–172, 2000.
- [3] Eric Angel and Vassilis Zissimopoulos. Autocorrelation coefficient for the graph bipartitioning problem. *Theoretical Computer Science*, 191:229–243, 1998.
- [4] Francisco Chicano, Gabriel Luque, and Enrique Alba. Elementary landscape decomposition of the quadratic assignment problem. In *Proceedings of GECCO 2010*. ACM, July 2010. (por aparecer).
- [5] Ricardo García-Pelayo and Peter Stadler. Correlation length, isotropy and metastable states. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 107(2-4):240–254, Sep 1997.
- [6] L. K. Grover. Local search and the local structure of NP-complete problems. *Operations Research Letters*, 12:235–243, 1992.
- [7] P. F. Stadler. Toward a theory of landscapes. In R. López-Peña, R. Capovilla, R. García-Pelayo, H. Waelbroeck, and F. Zertruche, editors, *Complex Systems and Binary Networks*, pages 77–163. Springer-Verlag, 1995.
- [8] Peter F. Stadler. *Biological Evolution and Statistical Physics*, chapter Fitness Landscapes, pages 183–204. Springer, 2002.
- [9] Andrew M. Sutton, L. Darrell Whitley, and Adele E. Howe. A polynomial time computation of the exact correlation structure of k-satisfiability landscapes. In *Proceedings of GECCO '09*, pages 365–372. ACM, 2009.
- [10] E. Weinberger. Correlated and uncorrelated fitness landscapes and how to tell the difference. *Biological Cybernetics*, 63(5):325–336, 1990.
- [11] Darrell Whitley, Andrew M. Sutton, and Adele E. Howe. Understanding elementary landscapes. In *Proceedings of GECCO '08*, pages 585–592. ACM, 2008.
- [12] L. D. Whitley and A. M. Sutton. Partial neighborhoods of elementary landscapes. In *Proceedings of GECCO '09*, pages 381–388. ACM, July 2009.