

面向图分割问题的确定性退火控制算法

吴征天^{1,2}, 高 庆^{3,4†}

(1. 苏州科技大学 电子与信息工程学院, 江苏 苏州 215000; 2. 米兰理工大学 机械工程学院, 意大利 米兰20156;
3. 北京航空航天大学 自动化科学与电气工程学院, 北京 100191;
4. 北京航空航天大学 大数据科学与脑机智能高精尖创新中心, 北京 100191)

摘要: 图分割问题是一种典型的NP-hard问题, 如何对其进行高效求解一直都是学界和工业界的一个难题。本文构建了一种新型的确定性退火控制算法, 提供了图分割问题的一种高质量近似解法。算法主要由两部分构成: 全局收敛的迭代过程以及屏障函数最小点组成的收敛路径。本文证明了, 当屏障因子从足够大的实数降为0, 沿着一系列由屏障问题最小点组成的收敛路径可以得到图分割问题的一种高质量的近似解。仿真计算结果表明本文所构建算法相比已有方法的优越性。

关键词: 图分割问题; 屏障因子; 近似算法; 确定性退火控制算法

引用格式: 吴征天, 高庆. 一种图分割问题的确定性退火控制算法. 控制理论与应用, 2019, 36(11): 1936 – 1941

DOI: 10.7641/CTA.2019.90508

A deterministic annealing control algorithm for a general graph partitioning problem

WU Zheng-tian^{1,2}, GAO Qing^{3,4†}

(1. School of Electronic and Information Engineering, Suzhou University of Science and Technology, Suzhou Jiangsu 215000, China;
2. Department of Mechanical Engineering, Politecnico di Milano, Milan 20156, Italy;
3. School of Automation Science and Electrical Engineering, Beihang University, Beijing 100191, China;
4. Beijing Advanced Innovation Center for Big Data and Brain Computing, Beihang University, Beijing 100191, China)

Abstract: The graph partitioning problem is well known to be NP-hard and it is still a challenge to solve this problem effectively. In this paper, a new deterministic annealing control algorithm is developed, with which an approximation solution to a general graph partitioning problem is obtained. This algorithm can be decomposed into a globally convergent iterative procedure and a path of minimum points of a barrier problem. In the algorithm, a high-quality solution is obtained along a path of a series of barrier problems' minimum points when the barrier parameter decreases to 0. Simulation results show the advantages of the proposed algorithm over the existing approach.

Key words: graph partitioning problem; barrier parameter; approximated algorithm; deterministic annealing control algorithm

Citation: WU Zhengtian, GAO Qing. A deterministic annealing control algorithm for a general graph partitioning problem. *Control Theory & Applications*, 2019, 36(11): 1936 – 1941

1 引言

图分割问题作为典型的组合优化问题, 在学术界和工业界获得了广泛的关注。典型的应用场景包括利用图分割算法有效解决超大规模集成电路布图设计的电路划分问题^[1-2]、图像划分问题^[3]和边值问题^[4]。然而, 图分割问题的计算求解一般比较困难, 其复杂度已经被证明为NP-hard^[5]。如何对图分割问题进行

有效求解一直是学界和工业界的研究热点。Kernighan-Lin算法^[6-7]是计算图分割问题应用最广的方法之一。虽然Kernighan-Lin算法实现简单, 但Kernighan-Lin算法仅是一种可以得到局部解的启发式算法, 其最优解可能并不唯一。通过考虑图分割问题的概率模型, 文章[8]提出一种优化图分割问题的正方格点概率模型并给出了部分实验结果。Recade等^[9]则提出一种

收稿日期: 2019-07-01; 录用日期: 2019-09-26。

†通信作者. E-mail: gaoqing@buaa.edu.cn.

本文责任编辑: 丛爽。

国家自然科学基金项目(61803279, 61903016), 德国亚历山大冯洪堡基金项目, 中国国家留学基金委项目资助。

Supported by the National Natural Science Foundation of China (61803279, 61903016), the Alexander von Humboldt Foundation of Germany and the China Scholarship Council.

均衡的k-way分割方法并应用于运动队调整的问题上, 该方法在小维度问题求解时可以得到最优解. 然而文献[9]中的算法仅可以求解小规模的运动员队调整问题. Chalupa^[10]提出了模因算法, 并开发了一种易于实现的局部搜索方法, 但是该局部搜索往往得不到较好的解. 在贪婪算法的基础上, 文献[11]提出了一个多层次的图二分割算法, 然而该算法也是一种局部搜索算法. 近年来, 国内学者相继提出了一些新颖的图分割算法, 例如基于主动轮廓模型的蚁群图像分割算法^[12]和基于多层次感知遗传算法的图象分割新方法^[13]. 但这些算法流程大都较为复杂而难以广泛应用.

近年, 基于神经网络和退火算法的思想, Dang 等^[14-15]开发了一些列算法, 并用该算法成功解决了旅行商问题和线性约束的非凸二次规划问题. 在此基础上, Wu 等^[16]提出一种确定性退火的神经网络算法, 该算法对一种特殊形式的图分割问题有良好的适应性. Gupa 等^[17]对各种图分割问题的近似算法做了详细介绍. 虽然学界和工业界对图分割问题的计算投入大量的研究精力, 然而依然没有可靠的算法能够高效的解决该问题.

2 问题描述与屏障因子

在图论中, 一般用 $V = 1, 2, \dots, n$ 代表节点集合, E 代表边线的集合, W 代表权重矩阵. 本文考虑的是没有方向的图 $G = (V, E)$. 所谓图分割问题是把 V 分成 m 份不相连的集合 S_1, S_2, \dots, S_m , 其中 $|S_k| = n_k$, $k = 1, 2, \dots, m$, 使

$$\sum_{p < q} \sum_{i \in S_p, j \in S_q} w_{ij}$$

最小. 定义

$$x_{ik} = \begin{cases} 1, & i \in S_k, \\ 0, & \text{其他}, \end{cases}$$

$i = 1, 2, \dots, n$, $k = 1, 2, \dots, m$, 并定义

$$x = (x_{11} \ x_{12} \ \dots \ x_{1m} \ \dots \ x_{n1} \ x_{n2} \ \dots \ x_{n*m}).$$

本文所考虑的一般形式的图分割问题可以表述如下:

$$\left\{ \begin{array}{l} \min f(x), \\ \text{s.t. } \sum_{j=1}^m x_{ij} = 1, \quad i = 1, 2, \dots, n, \\ \quad \sum_{i=1}^n x_{ij} = n_j, \quad j = 1, 2, \dots, m, \\ \quad x_{ij} \in \{0, 1\}, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad j = 1, 2, \dots, m, \end{array} \right. \quad (1)$$

其中 $f(x)$ 是关于 x 的连续可微非凸函数.

下面介绍一种图分割问题的等价形式. 定义 $\rho \geq 0$, 并定义

$$g(x) = f(x) - \frac{1}{2} \rho \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m x_{ij}^2,$$

问题(1)等价于如下的问题(2):

$$\left\{ \begin{array}{l} \min g(x) = f(x) - \frac{1}{2} \rho \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m x_{ij}^2, \\ \text{s.t. } \sum_{j=1}^m x_{ij} = 1, \quad i = 1, 2, \dots, n, \\ \quad \sum_{i=1}^n x_{ij} = n_j, \quad j = 1, 2, \dots, m, \\ \quad x_{ij} \in \{0, 1\}, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad j = 1, 2, \dots, m. \end{array} \right. \quad (2)$$

对问题(2)连续松弛化, 可以将其转化为如下问题:

$$\left\{ \begin{array}{l} \min g(x) = f(x) - \frac{1}{2} \rho \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m x_{ij}^2, \\ \text{s.t. } \sum_{j=1}^m x_{ij} = 1, \quad i = 1, 2, \dots, n, \\ \quad \sum_{i=1}^n x_{ij} = n_j, \quad j = 1, 2, \dots, m, \\ \quad 0 \leq x_{ij}, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad j = 1, 2, \dots, m. \end{array} \right. \quad (3)$$

文献[20]中已证明, 当 ρ 足够大时, 问题(3)的解是整数. 因此, 当 ρ 足够大时, 问题(3)与问题(2)等价. 受到 Hopfield^[18]提出的屏障因子的概念的启发, 本文在问题(3)中通过构建屏障因子 $x_{ij} \ln x_{ij} - x_{ij}$ 把约束条件 $0 \leq x_{ij}$ 合并到目标函数, 从而得到问题(4):

$$\left\{ \begin{array}{l} \min e(x; \beta) = g(x) + \beta \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m (x_{ij} \ln x_{ij} - x_{ij}), \\ \text{s.t. } \sum_{j=1}^m x_{ij} = 1, \quad i = 1, 2, \dots, n, \\ \quad \sum_{i=1}^n x_{ij} = n_j, \quad j = 1, 2, \dots, m. \end{array} \right. \quad (4)$$

这里 β 代表正的屏障系数, 并在退火算法中对应着温度变量. 当 $\beta \rightarrow 0$ 时, 问题(3)的解可以从问题(4)中得到. 此外, 由参考文献[19]可得如下定理:

定理 1 当 $k = 0, 1, \dots$, 且 $x(\beta_k)$ 是问题(4)的最优极值时, $g(x(\beta_k)) \geq g(x(\beta_{k+1}))$ 将产生问题(3)的全局最优解.

鉴于此, 如果可以得到问题(4)的全局最优解, 问题(3)的全局最优解也可以被找到. 定义

$$L(x, \lambda, \gamma) = e(x; \beta) + \sum_{i=1}^n \lambda_i (\sum_{j=1}^m x_{ij} - 1) + \sum_{j=1}^m \gamma_j (\sum_{i=1}^n x_{ij} - n_j),$$

其中: $\lambda = (\lambda_1 \ \lambda_2 \ \dots \ \lambda_n)^T$, $\gamma = (\gamma_1 \ \gamma_2 \ \dots \ \gamma_m)^T$.

当 x^* 是问题(4)的一个最小解时, 必定存在 λ^* 和 γ^*

满足如下一阶优化必要条件:

$$\begin{aligned}\nabla_x L(x^*, \lambda^*, \gamma^*) &= 0, \\ \sum_{j=1}^m x_{ij}^* &= 1, \quad i = 1, 2, \dots, n, \\ \sum_{i=1}^n x_{ij}^* &= n_j, \quad j = 1, 2, \dots, m,\end{aligned}$$

其中:

$$\begin{aligned}\nabla_x L(x, \lambda, \gamma) &= \\ \left(\frac{\partial L(x, \lambda, \gamma)}{\partial x_{11}} \frac{\partial L(x, \lambda, \gamma)}{\partial x_{12}} \dots \frac{\partial L(x, \lambda, \gamma)}{\partial x_{1m}} \dots \right. \\ \left. \frac{\partial L(x, \lambda, \gamma)}{\partial x_{n1}} \frac{\partial L(x, \lambda, \gamma)}{\partial x_{n2}} \dots \frac{\partial L(x, \lambda, \gamma)}{\partial x_{n*m}} \right)^T, \\ \frac{\partial L(x, \lambda, \gamma)}{\partial x_{ij}} &= \frac{\partial g(x)}{\partial x_{ij}} + \lambda_i + \gamma_j + \beta \ln x_{ij}.\end{aligned}$$

有如下结果:

定理2 当 $k = 0, 1, \dots, x^k$, 且 $\beta = \beta_k$ 时, 令 x^k 表示问题(4)的一个局部最小解, 对任意的 x^k 的极值 x^* 来说, 若不存在 $\lambda^* \in \mathbb{R}^n$ 和 $\gamma^* \in \mathbb{R}^m$ 满足如下条件:

$$\frac{\partial g(x^*)}{\partial x_{ij}} + \lambda_i^* + \gamma_j^* = 0,$$

$i = 1, 2, \dots, n, j = 1, 2, \dots, m$, 那么 x^k 的任意极值至少是问题(3)的一个局部最优解.

证 定义 $x^k (k = 0, 1, \dots)$ 是问题(3)的可行解, $x^{k_q} (q = 0, 1, \dots)$ 是 x^k 的收敛子序列, 并令 $\lim_{q \rightarrow \infty} x^{k_q} = x^*$.

因为 x^{k_q} 是问题(4)的局部最优解, 并且 $\beta = \beta_{k_q}$, 可以得到 $\lambda^{k_q} = (\lambda_1^{k_q} \ \lambda_2^{k_q} \ \dots \ \lambda_n^{k_q})^T$ 和 $\gamma^{k_q} = (\gamma_1^{k_q} \ \gamma_2^{k_q} \ \dots \ \gamma_m^{k_q})^T$ 满足

$$\frac{\partial g(x^{k_q})}{\partial x_{ij}} + \lambda_i^{k_q} + \gamma_j^{k_q} + \beta_{k_q} \ln x_{ij}^{k_q} = 0,$$

$i = 1, 2, \dots, n, j = 1, 2, \dots, m$. 所以

$$\begin{aligned}\frac{\partial g(x^*)}{\partial x_{ij}} &= \lim_{q \rightarrow \infty} \frac{\partial g(x^{k_q})}{\partial x_{ij}} = \\ &- \lim_{q \rightarrow \infty} (\lambda_i^{k_q} + \gamma_j^{k_q} + \beta_{k_q} \ln x_{ij}^{k_q}),\end{aligned}\quad (5)$$

$i = 1, 2, \dots, n, j = 1, 2, \dots, m$. 令 x 是问题(3)的可行解, 可以得到

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m (x_{ij} - x_{ij}^{k_q}) \frac{\partial g(x^{k_q})}{\partial x_{ij}} &= \\ - \left(\sum_{i=1}^n \lambda_i^{k_q} \sum_{j=1}^m (x_{ij} - x_{ij}^{k_q}) + \sum_{j=1}^m \gamma_j^{k_q} \sum_{i=1}^n (x_{ij} - x_{ij}^{k_q}) + \right. \\ \left. \beta_{k_q} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m (x_{ij} - x_{ij}^{k_q}) \ln x_{ij}^{k_q} \right) &= \\ - \beta_{k_q} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m (x_{ij} - x_{ij}^{k_q}) \ln x_{ij}^{k_q}.\end{aligned}$$

令 $K = \{(i, j) \mid x_{ij}^* = 0\}$, 那么对于任意的 (i, j)

$\notin K$,

$$\lim_{q \rightarrow \infty} \beta_{k_q} (x_{ij} - x_{ij}^{k_q}) \ln x_{ij}^{k_q} = 0.$$

令 $(i, j) \in K$, 可以得到 $x_{ij} - x_{ij}^* > 0$, 并且 $\lim_{q \rightarrow \infty} x_{ij}^{k_q} = 0$. 如果 q 足够大, 可以得到

$$\beta_{k_q} (x_{ij} - x_{ij}^{k_q}) \ln x_{ij}^{k_q} < 0.$$

基于之前的分析与假设,

$$\lim_{q \rightarrow \infty} \beta_{k_q} \ln x_{ij}^{k_q}, \quad (i, j) \in K$$

至少不等于0. 所以

$$(x_{ij} - x_{ij}^*) \lim_{q \rightarrow \infty} \beta_{k_q} \ln x_{ij}^{k_q}, \quad (i, j) \in K$$

至少有一个是负的, 因此

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m (x_{ij} - x_{ij}^*) \frac{\partial g(x^*)}{\partial x_{ij}} &= \\ \lim_{q \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m (x_{ij} - x_{ij}^{k_q}) \frac{\partial g(x^{k_q})}{\partial x_{ij}} &= \\ - \lim_{q \rightarrow \infty} \beta_{k_q} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m (x_{ij} - x_{ij}^{k_q}) \ln x_{ij}^{k_q} &= \\ - \lim_{q \rightarrow \infty} \beta_{k_q} \sum_{(i,j) \in K} (x_{ij} - x_{ij}^{k_q}) \ln x_{ij}^{k_q} &= \\ - \sum_{(i,j) \in K} (x_{ij} - x_{ij}^*) \lim_{q \rightarrow \infty} \beta_{k_q} \ln x_{ij}^{k_q} &> 0. \quad (6)\end{aligned}$$

$g(x)$ 是二次规划, 可以表达成标准型 $g(x) = \frac{1}{2} x^T Q x$.

可以得到 $\nabla g(x) = Qx$, 并且

$$\begin{aligned}g(x) - g(x^*) &= \\ \frac{1}{2} x^T Q x - \frac{1}{2} (x^*)^T Q x^* &= \\ (x - x^*)^T Q x^* + \frac{1}{2} (x - x^*)^T Q (x - x^*).\end{aligned}$$

如果 x 足够接近 x^* , 由式(6)可以得到

$$g(x) - g(x^*) > 0.$$

因为如果 x 趋向于 x^* , 那么

$$(x - x^*)^T Q x^* = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m (x_{ij} - x_{ij}^*) \frac{\partial f(x^*)}{\partial x_{ij}} > 0,$$

且

$$\frac{1}{2} (x - x^*)^T Q (x - x^*)$$

趋近于0的速度是 $(x - x^*)^T Q x^*$ 的两倍, 所以 x^* 至少是问题(3)的一个局部解. 证毕.

3 确定性退火控制算法

让 β 代表给定的任意正数, 由问题(4)的一阶优化必要条件可以得到

$$\frac{\partial L(x, \lambda, \gamma)}{\partial x_{ij}} = \frac{\partial f(x)}{\partial x_{ij}} + \lambda_i + \gamma_j + \beta \ln x_{ij} = 0,$$

并推导得到

$$x_{ij} = \frac{1}{e^{(\frac{\partial g(x)}{\partial x_{ij}} + \lambda_i + \gamma_j)/\beta}} = \frac{1}{e^{\lambda_i/\beta} e^{\gamma_j/\beta} e^{\frac{\partial g(x)}{\partial x_{ij}}/\beta}}.$$

令 $s_i = e^{\lambda_i/\beta}$ 和 $t_j = e^{\gamma_j/\beta}$, 可以得到

$$x_{ij} = \frac{1}{s_i t_j e^{\frac{\partial g(x)}{\partial x_{ij}}/\beta}}. \quad (7)$$

令 $t = (t_1 \ t_2 \ \cdots \ t_m)^T$ 和 $s = (s_1 \ s_2 \ \cdots \ s_n)^T$, 可以得到

$$\begin{aligned}\lambda &= \beta \ln s = \beta (\ln s_1 \ \ln s_2 \ \cdots \ \ln s_n)^T, \\ \gamma &= \beta \ln t = \beta (\ln t_1 \ \ln t_2 \ \cdots \ \ln t_m)^T.\end{aligned}$$

定义

$$d_{ij}(x, s, t) = \frac{1}{s_i t_j e^{\frac{\partial g(x)}{\partial x_{ij}}/\beta}},$$

这里: $i = 1, 2, \dots, n$, $j = 1, 2, \dots, m$, 并定义

$$\begin{aligned}d(x, s, t) &= \\ (d_{11}(x, s, t) &\ d_{12}(x, s, t) \ \cdots \ d_{1m}(x, s, t) \ \cdots \\ d_{n1}(x, s, t) &\ d_{n2}(x, s, t) \ \cdots \ d_{n*m}(x, s, t))^T.\end{aligned}$$

当 $x > 0$ 时, 很容易得到:

- 如果 $d_{ij}(x, s, t) - x_{ij} < 0$, 则 $\frac{\partial L(x, \lambda, \gamma)}{\partial x_{ij}} > 0$;
- 如果 $d_{ij}(x, s, t) - x_{ij} > 0$, 则 $\frac{\partial L(x, \lambda, \gamma)}{\partial x_{ij}} < 0$;
- 如果 $d_{ij}(x, s, t) - x_{ij} = 0$, 则 $\frac{\partial L(x, \lambda, \gamma)}{\partial x_{ij}} = 0$;
- 如果 $d(x, s, t) - x \neq 0$, 则 $(d(x, s, t) - x)^T \cdot \nabla_x L(x, \lambda, \gamma) < 0$;

因此, $d(x, s, t) - x$ 是 $L(x, \lambda, \gamma)$ 的一个下降方向. 把式(7)分别代入

$$\sum_{j=1}^m x_{ij} = 1, \quad i = 1, 2, \dots, n$$

和

$$\sum_{i=1}^n x_{ij} = n_j, \quad j = 1, 2, \dots, m,$$

可以得到

$$\begin{aligned}\sum_{j=1}^m \frac{1}{s_i t_j e^{\frac{\partial g(x)}{\partial x_{ij}}/\beta}} &= 1, \quad i = 1, 2, \dots, n, \\ \sum_{i=1}^n \frac{1}{s_i t_j e^{\frac{\partial g(x)}{\partial x_{ij}}/\beta}} &= n_j, \quad j = 1, 2, \dots, m.\end{aligned} \quad (8)$$

假设 $(s(x), t(x))$ 是式(8)的一个正内点, 那么 $d(x, s(x), t(x)) - x$ 是式(4)的可行下降方向. 定义

$$w(s, t) = \frac{1}{2} \left(\sum_{i=1}^n \left(\sum_{j=1}^m \frac{1}{s_i t_j e^{\frac{\partial g(x)}{\partial x_{ij}}/\beta}} - 1 \right)^2 + \right.$$

$$\left. \sum_{j=1}^m \left(\sum_{i=1}^n \frac{1}{s_i t_j e^{\frac{\partial g(x)}{\partial x_{ij}}/\beta}} - n_j \right)^2 \right).$$

显然 (s, t) 是式(8)解的充分必要条件是 $w(s, t) = 0$. 定义

$$\begin{aligned}u_i(s, t) &= s_i \left(\sum_{j=1}^m \frac{1}{s_i t_j e^{\frac{\partial g(x)}{\partial x_{ij}}/\beta}} - 1 \right), \quad i = 1, 2, \dots, n, \\ u(s, t) &= (u_1(s, t) \ u_2(s, t) \ \cdots \ u_n(s, t))^T, \\ v_j(s, t) &= t_j \left(\sum_{i=1}^n \frac{1}{s_i t_j e^{\frac{\partial g(x)}{\partial x_{ij}}/\beta}} - n_j \right), \quad j = 1, 2, \dots, m, \\ v(s, t) &= (v_1(s, t) \ v_2(s, t) \ \cdots \ v_m(s, t))^T.\end{aligned}$$

可以得到 $w(s, t)$ 的一个下降方向是 $(u(s, t), v(s, t))$. $(s(x), t(x))$, 可以从如下迭代过程得到:

选择任意 (s^0, t^0) , 当 $k = 0, 1, \dots$ 时, 定义

$$\begin{aligned}s^{k+1} &= s^k + \mu_k u(s^k, t^k), \\ t^{k+1} &= t^k + \mu_k v(s^k, t^k),\end{aligned} \quad (9)$$

这里 μ_k 是 $[0, \frac{1}{\max_{1 \leqslant j \leqslant m} n_j}]$ 中的一个数, 并满足

$$w(s^{k+1}, t^{k+1}) = \min_{\mu \in [0, \frac{1}{\max_{1 \leqslant j \leqslant m} n_j}]} w(s^k + \mu u(s^k, t^k), t^k + \mu v(s^k, t^k)).$$

通过以上的分析, 得到了下降方向是 $d(x, s(x), t(x)) - x$, 并且构建了迭代过程(9). 由此笔者提出如下确定性退火控制算法:

步骤 0 定义 ϵ 为给定的公差; β_0 为一个足够大的正数, 该正数大到可以保证 $e(x; \beta_0)$ 是凸函数; \bar{x} 为满足 $0 < \bar{x}_{ij} < 1$ 的任意数; (s^0, t^0) 为任意正向量; $\eta \in (0, 1)$ 为接近 1 的任意正数. 给定 $x = \bar{x}$, 基于式(9)可以得到式(8)的一个正解 $(s(\bar{x}), t(\bar{x}))$. 定义 $(s^0, t^0) = (s(\bar{x}), t(\bar{x}))$ 和

$$x^0 = (x_{11}^0 \ x_{12}^0 \ \cdots \ x_{1m}^0 \ \cdots \ x_{n1}^0 \ x_{n2}^0 \ \cdots \ x_{n*m}^0)^T.$$

这里 $x_{ij}^0 = \frac{1}{s_i(\bar{x}) t_j(\bar{x}) e^{\frac{\partial g(\bar{x})}{\partial x_{ij}}/\beta_0}}$, $i = 1, 2, \dots, n$, $j = 1, 2, \dots, m$. 最后定义 $k = 0$ 和 $q = 0$, 进入步骤 1.

步骤 1 定义 $x = x^k$, 用式(9)来计算式(8)的一个正解 $(s(x^k), t(x^k))$. 并定义 $(s^0, t^0) = (s(x^k), t(x^k))$, 进入步骤 2.

步骤 2 让

$$\begin{aligned}d(x^k, s(x^k), t(x^k)) &= \\ (d_{11}(x^k, s(x^k), t(x^k)) &\ d_{12}(x^k, s(x^k), t(x^k)) \ \cdots \\ d_{1m}(x^k, s(x^k), t(x^k)) &\ \cdots \\ d_{n1}(x^k, s(x^k), t(x^k)) &\ d_{n2}(x^k, s(x^k), t(x^k)) \ \cdots \\ d_{n*m}(x^k, s(x^k), t(x^k)) &)^T,\end{aligned}$$

这里

$$d_{ij}(x^k, s(x^k), t(x^k)) = \frac{1}{s_i(x^k) t_j(x^k) e^{\frac{\partial g(x^k)}{\partial x_{ij}}/\beta_q}},$$

$$i = 1, 2, \dots, n, j = 1, 2, \dots, m.$$

如果 $\|d(x^k, s(x^k), t(x^k)) - x^k\|_2 < \epsilon$, 执行如下操作:

- 如果 β_q 足够小, 算法终止.
- 否则, 让 $x^{*,q} = x^k, x^0 = x^k, \beta_{q+1} = \eta\beta_q, q = q + 1, k = 0$, 跳转到步骤 1.

如果 $\|d(x^k, s(x^k), t(x^k)) - x^k\|_2 \geq \epsilon$, 执行如下操作:

求解方程

$$x^{k+1} = x^k + \theta_k(d(x^k, s(x^k), t(x^k)) - x^k), \quad (10)$$

这里 $\theta_k \in [0, 1]$ 并满足

$$\begin{aligned} e(x^{k+1}; \beta_q) = \min_{\theta \in [0, 1]} & e(x^k + \theta(d(x^k, s(x^k), t(x^k)) \\ & - x^k); \beta_q). \end{aligned}$$

然后, 定义 $k = k + 1$, 跳转到步骤 1.

由以上算法流程可以看到, 该算法是一种连续型算法, 并且屏障因子从足够大的一个正数逐渐降为 0 的过程中, 每一步中的屏障问题的最小点组成了一个路径, 沿着该路径可以得到原问题的一个近似解. 设置屏障因子为任意正整数, 屏障问题的最小点可以从一个可行的下降方向得到. 利用一个全局收敛的迭代过程, 该可行的下降方向可以从拉格朗日算子得到, 并且屏障问题最小点的求解有个显著的特点, 在步长为 0 到 1 的条件下, 变量的上限和下限将自动满足约束条件.

在算法中并不需要计算如下问题的精确解:

$$\min_{\theta \in [0, 1]} e(x^k + \theta(d(x^k, s(x^k), t(x^k)) - x^k); \beta_q),$$

一个估计解可以得到类似的效果. 在文献中, 有很多种方法可以得到 θ_k ^[19], 并且基于文献[19], 以下定理可以很容易得到证明.

定理 3 定义 $\beta = \beta_q$, 用式(10)得到的有限解 $x^k, k = 0, 1, \dots$ 都是问题(4)的一个固定解.

4 仿真实验

为了证明所提算法的优越性, 在仿真实验中将所提出的方法与 Kernighan-Lin 算法^[6-7]进行了对比. 所考虑问题的目标函数如下:

$$f(x) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n w_{ij} \sum_{p \neq q} x_{ip} x_{jq},$$

这里 W 是权重矩阵, 定义如下:

$$W = \begin{pmatrix} 0 & w_{12} & \cdots & w_{1n} \\ w_{12} & 0 & \cdots & w_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ w_{1n} & w_{2n} & \cdots & 0 \end{pmatrix},$$

且若 $(i, j) \notin E, w_{ij} = 0$; 若 $(i, j) \in E, w_{ij} > 0$.

确定性退火控制算法实现过程中, 初始化 $\beta = 980$, 当 $\|d(x^k, s(x^k), t(x^k)) - x^k\|_2 < \epsilon$, $\epsilon = 0.001$ 时, 下

降系数为 0.96. 本文做了 50 个实例, 实例的维数为 $m = 5, n = 100$. 为了表述方便, 定义如下缩写:

- 1) 确定性退火控制算法(deterministic annealing algorithm): DAA;
 - 2) Kernighan-Lin 算法: K-LM;
 - 3) 主迭代次数(number of main iterations): NMI;
 - 4) 目标函数值(objective function value): OFV.
- 可以得到两种算法的目标函数值如表 1 所示.

表 1 50 个实例的目标函数值

Table 1 50 numerical results of DAA and K-LM

实例	DAA		K-LM	实例	DAA		K-LM
	NMI	OFV	OFV		NMI	OFV	OFV
1	84	31	53	26	119	50	44
2	110	54	60	27	107	43	39
3	116	30	37	28	81	41	42
4	152	36	34	29	66	41	34
5	137	27	45	30	86	59	56
6	123	46	53	31	145	32	41
7	124	46	44	32	107	43	48
8	176	39	55	33	93	36	34
9	111	32	32	34	155	54	45
10	119	42	39	35	129	54	49
11	119	45	44	36	165	50	69
12	145	37	41	37	120	42	36
13	91	45	57	38	111	33	46
14	111	48	63	39	90	28	31
15	111	31	33	40	186	42	37
16	96	35	41	41	98	44	41
17	143	49	48	42	146	39	44
18	93	46	61	43	190	37	61
19	119	27	44	44	124	37	48
20	189	46	51	45	126	46	46
21	93	36	34	46	145	32	39
22	191	48	58	47	144	60	61
23	88	44	53	48	111	21	44
24	94	43	42	49	114	35	29
25	127	32	42	50	106	27	51

从表 1 可以看出, DAA 算法完全有能力求解这 50 个实例. 在表 1 中, 最小的主迭代次数是 66, 最大的主迭代次数是 191, 平均值是 122. 主迭代次数的分布图见图 1 所示.

由于表 1 表述的数字不够直观, 为了直观表述表 1 内容, 定义

$$\text{VALUE}_{\text{ordinate}} = \frac{\text{OFV}_{\text{K-LM}} - \text{OFV}_{\text{DAA}}}{\text{OFV}_{\text{K-LM}}} \times 100. \quad (11)$$

由以上定义可以看出, $\text{VALUE}_{\text{ordinate}}$ 的值代表两种算法的比较结果: 若 $\text{VALUE}_{\text{ordinate}}$ 为正值, 说明 DAA 算法比 K-LM 算法好, 值越大, 说明 DAA 算法表现越好; 反之亦然. 简言之, $\text{VALUE}_{\text{ordinate}}$ 的值大小直接

代表所提算法比K-LM算法表现好的程度。本文计算 50 个实例的 VALUE_{ordinate}, 得到图2。

