Studio di algoritmi stocastici per la costruzione di quadrati magici

Metodi Computazionali della Fisica

Gabriele Bozzola
Matricola 882709

8 luglio 2016

Università degli studi di Milano

IL PROBLEMA

QUADRATI MAGICI

Definizione

Un quadrato magico normale $N \times N$ è una matrice di ordine N contenente tutti i numeri naturali da 1 a N^2 tali che la somma di tutti gli elementi sulle righe, sulle colonne e sulle diagonali sia sempre la stessa, detta numero magico.

$$
\begin{array}{ccccc}
 & \begin{array}{|c|c|c|}\hline 6 & 1 & 8 \\ \hline 7 & 5 & 3 \\ \hline 2 & 9 & 4 \\ \hline \end{array} & \begin{array}{l} \to 15 \\ \to 15 \\ \to 15 \end{array} \\
\swarrow 15 & \begin{array}{ccc} \downarrow & \downarrow & \downarrow \\ 15 & 15 & 15 \end{array} & \searrow 15
\end{array}
$$

QUADRATI MAGICI – PROPRIETÀ

Teorema di esistenza

$\forall N \in \mathbb{N} - \{2\}$ è sempre possibile costruire almeno un quadrato magico normale.

Formula per la costante magica

$\forall N \in \mathbb{N} - \{2\}$ la costante magica m di un quadrato di ordine N è:

$$m.v. = \frac{1}{2}N(N^2 + 1)$$

Numero di quadrati magici di ordine N

Il numero di quadrati magici è noto con precisione solo per $N < 6$.
La percentuale sul totale dei possibili quadrati tende a zero per N che tende a $+\infty$.

N	N_{ms}	N_{ns}	%
2	0	$\sim 10^{1}$	0
3	1	$\sim 10^{5}$	$\sim 10^{-5}$
4	880	$\sim 10^{12}$	$\sim 10^{-7}$
5	275 305 224	$\sim 10^{24}$	$\sim 10^{-18}$
6	$\sim 10^{19}$	$\sim 10^{41}$	$\sim 10^{-22}$
20	$\sim 10^{744}$	$\sim 10^{868}$	$\sim 10^{-124}$
35	$\sim 10^{2992}$	$\sim 10^{3252}$	$\sim 10^{-250}$
50	$\sim 10^{7000}$	$\sim 10^{7410}$	$\sim 10^{-410}$

Trovare quadrati magici è difficile.*

*Dati ottenuti con metodi statistici da Trump W. e con errore inferiore a 1 %.

- Per quadrati di ordine dispari: metodo de la Loumbre, metodo di Conway, metodo Pheru, ...
- Per quadrati pari: metodo Medjing, ...
- Per quadrati singolarmente pari (N è multiplo di quattro): metodo LUX, metodo Strachey, ...

QUADRATI MAGICI - PROBLEMI DI QUESTI METODI

- Costruiscono sempre il medesimo quadrato
- Non sono generalizzabili ad altri tipi di quadratici magici

I metodi stocastici risolvono questi problemi.

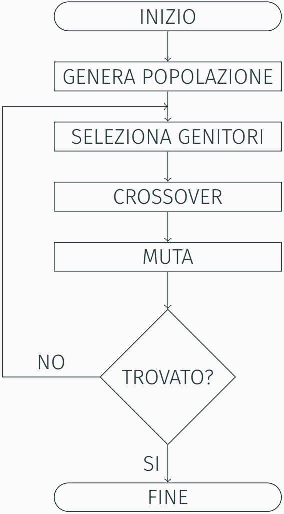
ALGORITMI GENETICI

ALGORITMO GENETICO – FUNZIONAMENTO

Gli algoritmi genetici implementano il principio darwiniano di sopravvivenza del più adatto.

Gli individui:

- sono possibili soluzioni del problema
- sono classificati in base alla loro fitness, che quantifica quanto si avvicinano alla soluzione reale
- si riproducono in maniera sessuata (crossover)
- possono subire mutazioni



ALGORITMO GENETICO – PERCHÉ È ADATTO?

Perché il problema della costruzione dei quadrati magici è un buon problema da affrontare con gli algoritmi genetici?

- Lo spazio delle soluzioni è estremamente vasto
- I quadrati possono essere codificati in modo diretto come individui
- Il problema può essere formulato come ottimizzazione di una funzione di fitness

Per implementare un algoritmo genetico bisogna a pensare a:

- Che funzione di fitness utilizzare?
- Come far selezionare i genitori?
- Come far riprodurre i quadrati?
- Come mutarli?

Funzioni di fitness implementate

- `totalSquared`: somma dei quadrati delle discrepanze delle somme di ogni linea dal valore magico
- `totalAbs`: somma dei moduli delle discrepanze delle somme di ogni linea dal valore magico
- `correctLines`: numero di linee magiche

Metodi di selezione implementati

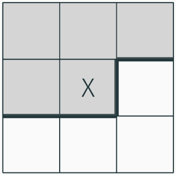
- `fitnessProportionate`: probabilità di selezione proporzionale alla fitness
- `similarSquare`: probabilità di selezione dipendente dalla fitness e dalla distanza dal quadrato migliore
- `fittests`: alcuni individui non si riproducono, gli altri hanno uguale probabilità di selezione
- `elitism`: alcuni individui passano direttamente alla generazione successiva, i restanti vengono selezionati secondo uno dei precedenti metodi

Metodi di crossover

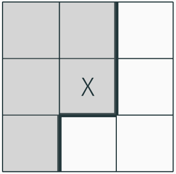
Crossover a uno o due punti verticale o orizzontale.
Se il crossover produce numeri doppi questi vengono sistemati casualmente.

Metodi di mutazione

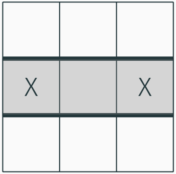
- Scambio di una coppia
- Scambio di due colonne
- Scambio di due righe
- Permutazione di una riga
- Permutazione di una colonna



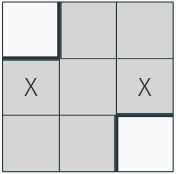
(a) Crossover orizzontale



(b) Crossover verticale



(c) Crossover a due punti orizzontale



(d) Crossover a due punti verticale

ALGORITMO GENETICO – RISULTATI

Nessuna combinazione di fitness e metodi di selezione e crossover è riuscita a costruire quadrati di dimensioni superiori a 3×3!

Motivo: lo spazio delle soluzioni non è connesso rispetto a nessuna funzione di fitness.

- I crossover sono dannosi per giungere ad una soluzione. Non si possono eliminare?
- Non si può *aiutare* l'algoritmo a convergere sbloccandolo nei momenti di stallo?

ALGORITMO EVOLUTIVO

Gli algoritmi evolutivi sono particolari algoritmi genetici in cui:

- Non ci sono crossover
- Le mutazioni sono molto più sofisticate
- Sostanzialmente si lavora con un solo individuo

L'algoritmo di Xie e Kang[*] è un algoritmo evolutivo per la costruzione di quadrati magici normali con:

- Mutazioni dinamiche e adattive
- Rettificazioni locali
- Congettura della costruzione a due fasi

Congettura della costruzione a due fasi

Un quadrato semimagico è sempre completabile ad un quadrato magico utilizzando un numero finito di permutazioni di righe e di colonne oppure di rettificazioni locali.

[*] Xie, T. e Kang, L. (2003), *An Evolutionary Algorithm for Magic Squares*, The 2003 Congress on Evolutionary Computation, 2003.

Individuo

Un individuo è una coppia di matrici (M, Σ), la prima è il quadrato da rendere magico, la seconda contiene informazioni necessarie per le mutazioni.

Fitness

$$f(M) = \begin{cases} \sum_{i=1}^{N} (\text{row}(i) + \text{col}(i)) & \text{solo diagonali non magiche} \\ -(\text{dg1} + \text{dg2}) & \text{altrimenti} \end{cases}$$

Dove $\text{col}(i)$ e $\text{row}(j)$ sono rispettivamente la somma degli elementi sulla $i-$esima colonna e $j-$esima riga di M, e dg1 e dg2 sono la somma degli elementi sulla diagonale e sull'antidiagonale di M.

Mutazioni

- Dinamiche: la probabilità di mutazione non è fissa, ma dipende dal numero di linee non magiche.
- Adattive: le mutazioni dipendono da quanto il quadrato non è magico.

Mutazioni

- Mutazioni puntuali per quadrati generici.
- Mutazioni lineari per quadrati che hanno solo le diagonali non magiche (quadrati semimagici).

Insiemi di mutazione

- S_1 numeri la cui riga e colonna non è magica.
- S_2 numeri in righe o colonne non magiche.

Mutazioni

Siano n_{col} e n_{row} il numero di colonne e di righe non magiche. Le mutazione sono scambi di numeri tra:

- S_1 e S_2 con probabilità $1/(n_{row}n_{col})$.
- S_2 e S_2 con probabilità P_M.
- S_2 e M con probabilità P_M.

dove

$$P_M(x) = \begin{cases} 1/n_{row} & \text{se} \quad x \text{ è in una riga non magica} \\ 1/n_{col} & \text{se} \quad x \text{ è in una colonna non magica} \\ 1/\left(n_{row}n_{col}\right) & \text{se} \quad x \text{ è in entrambe} \end{cases}$$

Esempio: S_1 **in** S_2

Siano $m_{ij} \in M$ e $\sigma_{ij} \in \Sigma$

1. Calcolo $new = m_{ij} + \text{randint}(-\sigma_{ij}, \sigma_{ij})$
2. Aggiusto se è invalido:

$$\begin{cases} new = \text{randint}(1, N) & \text{se} \quad new < 1 \\ new = N^2 - \text{randint}(0, N) & \text{se} \quad new > N^2 \end{cases}$$

3. Cerco l'elemento in S_2 che più si avvicina a *new* cioè $t \in S_2$ tale che soddisfi $\min_{t \in S_2} |new - t|$.
4. Scambio t e *new* in M.

Esempio: S_1 in S_2

5. Calcolo $z = \sigma_{ij} + \text{randint}(-1, 1)$
6. Aggiusto se è invalido:

$$z = \text{randint}(1, \sigma_t) \quad \text{se} \quad z < 1 \quad \text{o} \quad z > \sigma_t$$

con:

$$\sigma_t = \begin{cases} |f(M)| / (n_{row} + n_{col}) & \text{se} \quad n_{row} n_{col} \neq 0 \\ |f(M)| / n_{diag} & \text{se} \quad n_{row} n_{col} = 0 \end{cases}$$

σ_t piccola: quadrato quasi magico

7. Sostituisco a σ_{ij} in Σ il valore z.

Mutazioni lineari

Sono permutazioni casuali di una linea di un quadrato semimagico.

1. Seleziono un numero q intero da 1 a N.
2. Per q volte estraggo una linea.
3. La sostituisco con una permutazione casuale dei suoi elementi.

La linea rimane magica.

Rettificazioni locali

L'algoritmo potrebbe rimanere in una fase di stallo, per questo conviene operare con approcci sistematici:

- Rettificazioni lineari: cercano di aumentare il numero di linee magiche.
- Rettificazioni diagonali: cercano di rendere le diagonali di un quadrato semimagico magiche.

Le rettificazioni sono ottenute analizzando tutto il quadrato in cerca di tutte le coppie o i quartetti tali che una loro permutazione migliori il quadrato.

Esempio di rettificazione locale lineare

Due numeri m_{ks} e m_{ls} sono scambiati alla riga k e l e alla colonna s se sono soddisfatte:

- $\text{row}(k) - m.v. = m_{ks} - m_{ls}$
- $m.v. - \text{row}(l) = m_{ks} - m_{ls}$

con $m.v.$ costante magica.

Sono state implementate altre tre condizioni simili, che coinvolgono due o quattro numeri.

1	5	6	→ 12
4	3	8	→ 15
2	7	9	→ 18

(e) Prima

1	5	**9**	→ 15
4	3	8	→ 15
2	7	**6**	→ 15

(f) Dopo

algoritmo di Xie e Kang – rettificazioni locali diagonale

Rettificazioni locali diagonali:

- Puntuali: se scambiano numeri
- Lineari: se scambiano linee

Esempio di rettificazione locale diagonale puntuale

Se sono soddisfatte le condizioni:

- $a_{ii} + a_{ij} = a_{ji} + a_{jj}$
- $(a_{ii} + a_{jj}) - (a_{ij} + a_{ji}) = \mathrm{dg1} - m$

allora a_{ii} è scambiato con a_{ji} e a_{ji} con a_{jj}.

1	5	6	→ 12
4	3	8	→ 15
2	7	9	→ 18

(g) Prima

1	5	**9**	→ 15
4	3	8	→ 15
2	7	**6**	→ 15

(h) Dopo

algoritmo di Xie e Kang – risultati

Risultati con N ordine del quadrato, n_{tent} numero di tentativi di esecuzione, n_{ok} numero di successi e τ tempo medio di esecuzione.

N	n_{tent}	n_{ok}	τ
3	10	10	0.12 s
10	10	10	55 s
15	10	10	5.75 min
20	10	10	31.2 min
25	10	10	1.73 h
30	10	10	4.23 h
35	10	10	12.38 h
40	10	10	25.79 h

(a) Popolazione di 25 figli.

N	n_{tent}	n_{ok}	τ
3	10	10	0.22 s
10	10	10	69 s
15	10	10	4.37 min
20	10	10	26.3 min
25	10	10	1.51 h
30	10	10	3.97 h
35	10	10	8.63 h
40	10	10	15.73 h

(b) Popolazione di 10 figli.

algoritmo di Xie e Kang – risultati

Risultati con N ordine del quadrato, n_{tent} numero di tentativi di esecuzione, n_{ok} numero di successi e τ tempo medio di esecuzione.

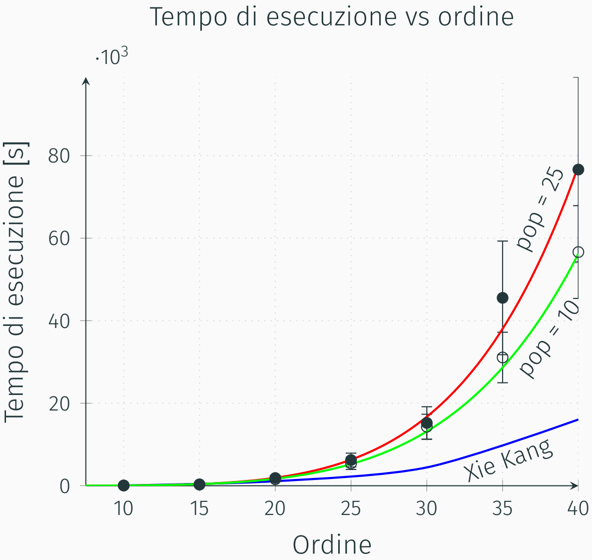
N	n_{tent}	n_{ok}	τ
3	10	10	0.12 s
10	10	10	55 s
15	10	10	5.75 min
20	10	10	31.2 min
25	10	10	1.73 h
30	10	10	4.23 h
35	10	10	12.38 h
40	10	10	25.79 h

(c) Popolazione di 25 figli.

N	n_{tent}	n_{ok}	τ
3	10	10	0.22 s
10	10	10	69 s
15	10	10	4.37 min
20	10	10	26.3 min
25	10	10	1.51 h
30	10	10	3.97 h
35	10	10	8.63 h
40	10	10	15.73 h

(d) Popolazione di 10 figli.

L'algoritmo non ha mai fallito.


Tempo di esecuzione vs ordine
$\cdot 10^3$
Tempo di esecuzione [s]
80
60
40
20
0
10
15
20
25
30
35
40
Ordine
pop = 25
pop = 10
Xie Kang

algoritmo di Xie e Kang – distribuzione dei tempi di esecuzione I

Distribuzione dei tempi di esecuzione

Routine	Tempo speso (%)
`selectFittest`	~ 0.01
`mutate`	~ 0.7
`rectifyDiagonals`	~ 7.7
`rectifyLines`	~ 91
/ \	/ \
`onePair` | `twoPairs`	~ 13 | ~ 87

ALGORITMO DI XIE E KANG – DISTRIBUZIONE DEI TEMPI DI ESECUZIONE II

Perché? (Rettificazioni a due coppie)

```
(*i1,j1 indici del primo elemento*)
For[i1 = 1, i1 <= N, i1++,
    For[j1 = 1, j1 <= N, j1++,
        (*Scorro il resto del quadrato dopo i1,j1*)
        For[i2 = i1 + 1, i2 <= N, i2++,
            For[j2 = 1, j2 <= N, j2++,
               [...]  (*Vari controlli*)
```

Il numero di operazioni cresce come N^4.
E' necessaria questa implementazione perché bisogna operare direttamente con gli indici.

CONCLUSIONI E SVILUPPI FUTURI

- E’ possibile realizare con successo algoritmi stocastici per la costruzione di quadrati magici se non si usano crossover e se si interviene in modo sistematico
- Questi algoritmi sono molto più efficienti della ricerca a tappeto
- Si è mostrato che l’approccio di Xie e Kang funziona
- Non si è ritrovata la legge di scala trovata da Xie e Kang, probabilmente a causa della quasi totale ignoranza riguardo l’implementazione originale

CONCLUSIONI E SVILUPPI FUTURI — GENERALIZZAZIONI E SVILUPPI FUTURI

Alcune questioni lasciate aperte:

- Ottimizzare implementazione, `Compile[]`?
- Parallelizzare i metodi di rettificazione
- Indagare dipendenza del tempo di esecuzione dalla dimensione della popolazione

Possibili estensioni: E' possibile generalizzare l'algoritmo fintato che si generalizzano i metodi di rettificazione, quindi per tutti quei casi in cui *m.v.* è fissato. Ad esempio:

- Quadrati vincolati
- Quadrati non normali con costante magica fissata

Mathematica non si è rivelato necessario nell'implementazione di questi algoritmi perché la quasi totalità della manipolazione è numerica e non simbolica.
Tuttavia

-

GRAZIE PER L'ATTENZIONE!