Metóda zakázaného hľadania aplikovaná na TSP.

Branislav Květon

2001

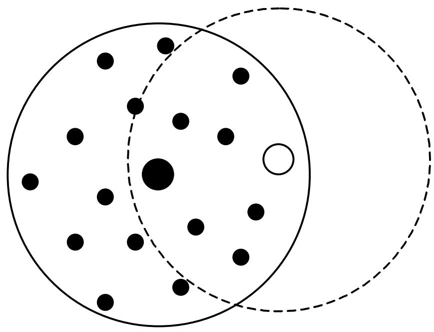
Úvod.

Problém obchodného cestujúceho patrí medzi známe NP-úplné problémy, ktorý je vďaka kombinatorickej zložitosti veľmi obtiažne riešiteľný. I napriek tomu, že existujú polynomiálne algoritmy, ktoré dokážu vypočítať najviac raz takú dlhú cestu ako je najkratšia, algoritmus riešiaci tento problém pre väčší vstup v “rozumnom“ čase zatiaľ neexistuje. Práve z týchto dôvodov nachádzajú mnohé algoritmy, ktorých kolískou je odbor umelej inteligencie, v tejto problematike širokú oblasť uplatnenia. Hlavným prínosom všetkých týchto algoritmov je dosiahnutie približného riešenia pri určitej chybe, pričom dochádza k rádovému zníženiu výpočtového času na rozdiel od riešení presných.

Táto “case study“ sa zaoberá riešením problému obchodného cestujúceho s pomocou metódy zakázaného hľadania. Aby bolo možné porovnať dosiahnuté výsledky s najlepším riešením, problém je riešený na ortogonálnej mriežke, kde každý vrchol mriežky predstavuje mesto. Výsledkom štúdie je dosiahnuť čo možno najlepší výsledok optimalizáciou parametrov počet iterácií a veľkosť tabu zoznamu. Tieto výsledky sú rozoberané aj z pohľadu zväčšujúcej sa dimenzie mriežky, pričom si všímame aj suboptimálne výsledky.

Horolezecký algoritmus (Hill climbing).

Horolezecký algoritmus patrí medzi základné stochastické optimalizačné metódy. Ideou algoritmu je iteračne hľadať najlepšie možné riešenie v danom okolí. Toto riešenie je v nasledovnom kroku algoritmu použité ako nová pozícia, v ktorej okolí opätovne hľadáme najlepšie riešenie. Algoritmus sa volá horolezecký, pretože vždy vyberá zo svojho okolia najlepšie riešenie, čo pripomína vytrvalý výstup na pomyselný kopec, ktorý predstavuje riešenie.



Obr. 1. Idea horolezeckého algoritmu. Veľký čierny bod je stredom okolia označeného kružnicou s plným okrajom, kde čierne bodky označujú nájdené lokálne riešenia. Veľká biela bodka označuje najlepšie lokálne riešenie, ktoré sa stáva stredom novej oblasti (kružnica s prerušovaným okrajom) v ďalšom kroku.

Horolezecký algoritmu môžeme chápať aj ako stochastickú mutáciu pôvodného vektora α na nový vektor α'. Operátor mutácie označíme O_{mut}, pričom stochastičnosť procesu určíme pravdepodobnosťou P_{mut}.

$$\alpha' = O_{mut}(\alpha)$$

$$\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, ..., \alpha_n), \alpha' = (\alpha'_1, \alpha'_2, ..., \alpha'_n)$$

$$\alpha'_i = \alpha_i \text{, ak nenastala mutácia}$$

$$\alpha'_i = \beta \text{, ak nastala mutácia s pravdepodobnosťou } P_{mut}$$

V prípade, že máme spojite danú oblasť riešení, kde v každom mieste existuje derivácia, vieme bez problémov vypočítať smer najstrmšieho klesania, ktorým sa máme k nasledovnému okoliu pohnúť. Oveľa častejším prípadom je ale nespojitá oblasť riešení. V takomto prípade ku zvolenému okoliu vygenerujeme náhodne predpísaný počet okolitých riešení. Z týchto riešení vyberieme to najlepšie a použijeme ho v ďalšom kroku ako stred nového okolia. Náhodné vytvorenie okolia U(α) popisujeme ako mutáciu vektora α nasledovne

$$U(\alpha) = \{\alpha' \mid \alpha' = O_{mut}(\alpha)\}$$
$$\alpha^* = \arg\min_{\alpha' \in U(\alpha)} f(\alpha)$$

kde vektor α^* označuje najlepšie lokálne riešenie a f je vopred daná ohodnocovacia funkcia problému, ktorú sa snažíme minimalizovať.

Samotný horolezecký algoritmus nie je veľmi vhodný na riešenie problémov, ktorých ohodnocovacia funkcia má viacero lokálnych miním (to je drvivá väčšina problémov). Práve preto existuje množstvo modifikácií tohto algoritmu, ktoré sa snažia uviaznutiu predísť. Našu pozornosť sústredíme na metódu zakázaného hľadania.

Metóda zakázaného hľadania (Tabu search).

Metóda zakázaného hľadania bola navrhnutá na riešenie zložitých optimalizačných problémov ako vylepšenie horolezeckého algoritmu. Medzi základný problém horolezeckého algoritmu patrí, že algoritmus má tendencie vracať sa po určitom čase k už navštíveným lokálnym minimám. Na zabránenie tomuto negatívnemu javu je k horolezeckému algoritmu pripojený tabu zoznam, ktorý si pamätá všetky inverzné transformácie k presunom medzi poslednými navštívenými centrami. Transformácie, ktoré sú uvedené v tabu zozname, sú potom neprístupné a teda nie je možné vracať sa k centru, v ktorom sme sa v predošlých krokoch nachádzali. Zadefinujeme si opätovne okolie ako množinu transformácií t vybraných z množiny prípustných transformácií S

$$t : \alpha \to \alpha'$$
$$S = (t_1, t_2, ..., t_n)$$
$$U(\alpha) = \{t\alpha \mid t \in S\}$$

Definíciu okolia centra potom môžeme jednoducho rozšíriť o zakázanie transformácií z tabu zoznamu T ako

$$T = (t_1, t_2, ..., t_m)$$
$$U(\alpha) = \{\alpha' \mid \forall t \in S \setminus T, \alpha' = t\alpha\}$$

Tabu zoznam je teda veľmi jednoduchá pamäť algoritmu. Skúsenosti s využívaním tejto metódy ukazujú, že podstatný vplyv na hľadanie riešenia má veľkosť tabu zoznamu. Ak je tabu zoznam malý, je problematické unikať z lokálnych miním, ktoré sa nachádzajú v širokých údoliach. Ak je naopak tabu zoznam veľký, algoritmus bude musieť ignorovať mnohé cesty, pretože nebude môcť vykonať danú transformáciu. Ak je veľkosť tabu zoznamu väčšia než počet transformácií, ktoré môžeme vykonať, po vyčerpaní všetkých možností sa nebudeme môcť pohnúť.

Problém obchodného cestujúceho (TSP).

Problém obchodného cestujúceho je vo všeobecnosti neriešiteľný, pretože výpočtový čas potrebný na dosiahnutie riešenia rastie exponenciálne v závislosti od vstupu. Medzi veľké úspechy umelej inteligencie sa radí aj približné riešenie týchto problémov, kde bol nájdený rozumný kompromis medzi presnosťou riešenia a výpočtovou zložitosťou.

Pod úlohou obchodného cestujúce chápeme problém, v akom poradí má obchodný cestujúci navštíviť jednotlivé mestá tak, aby jeho cesta bola čo najkratšia. Zadefinujme si kompletný graf G = K(n), kde n je počet vrcholov grafu, ktoré predstavujú jednotlivé mestá. Nech existuje kladné ohodnotenie d(i,j) hrán (ciest), ktoré spájajú jednotlivé vrcholy (mestá). Pod obchodnou cestou potom rozumieme Hamiltonovský cyklus v tomto grafe, kde obchodný cestujúci navštívi každé mesto práve raz a nakoniec sa vráti do východzieho mesta. Obchodná cesta je teda permutácia P

$$P = (p_1, p_2, ..., p_n)$$

$$f(P) = \sum_{i=1}^{n-1} d(p_i, p_{i+1}) + d(p_n, p_1)$$

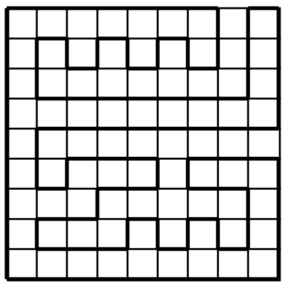
a ohodnotenie problému je celková dĺžka cyklu f. Cieľom je nájdenie optimálnej permutácie P_{opt}, kde je vzdialenosť $f_{opt} = f(P_{opt})$ medzi mestami minimálna.

Problém obchodného cestujúceho (TSP) na ortogonálnej mriežke.

Tento špeciálny prípade TSP je riešený na pravouhlej ortogonálnej mriežke, kde vrcholy mriežky predstavujú jednotlivé mestá. Na meranie vzdialenosti medzi mestami je použitá Hammingova metrika. Funkciu d(i,j) potom môžeme vyjadriť ako

$$d(i, j) = \sum_{k=1}^{2} Abs(i[k] - j[k])$$

kde i[k] (j[k]) je k-tá súradnica i-tého (j-tého) mesta.



Obr. 2. Problém obchodné cestujúceho riešený na ortogonálnej mriežke 10 x 10. Každý vrchol mriežky predstavuje jedno mesto. Hrubšia čiara v mriežke predstavuje jednu z možných ciest obchodného cestujúceho. Hamiltonovský cyklus má dĺžku 100.

Pravouhlú mriežku sme si vybrali práve preto, že je tu veľmi jednoduché vyriešiť problém obchodného cestujúceho. Ak je dimenzia mriežky n (počet bodov na jej jednom okraji) párne číslo, potom má optimálna cesta dĺžku $f_{opt} = n^2$. V prípade, že n je nepárne číslo, existuje optimálna cesta dĺžky $f_{opt} = n^2+1$.

Počítačová simulácia TSP.

Pri riešení TSP sa používala metóda tabu zoznamu, ktorá bola bez problémov implementovaná v prostredí Delphi. Spolu s riešením bola implementovaná aj jednoduchšia metóda Hill climbing, ktorá je ponímaná ako metóda Tabu search s nulovou dĺžkou zakázaného zoznamu.

Začiatočná cesta je generovaná ako náhodná permutácia vektora miest, pričom všetky porovnávané algoritmy v rámci jednej dimenzie začínali za rovnakých podmienok (až na nastavenie náhodného generátora čísel).

Okolie centra bolo konštruované náhodným generovaním n.n/10 mutácií vektora miest, kde sa pod mutáciou rozumie výmena ľubovoľných dvoch pozícií vo vektore. I keď závislosť počtu generovaných mutácií od dimenzie mriežky nie je vhodná pri veľkom n, tento postup bol volený, aby sa pri porovnávaní výkonnosti Tabu search v závislosti od n eliminoval faktor počtu náhodných výberov. Ak použijeme 100 náhodných výberov pri dimenzii 4, podarí sa nám pokryť viac ako 30% možných mutácií, no pri dimenzii 10 pokrývame iba 1% možností. V našom prípade pokrývame pre každú dimenziu presne 10% mutácií.

Priložený program je plne funkčná verzia počítajúca optimálnosť dosiahnutej cesty s meniacimi sa parametrami dimenzií n, počtu krokov a veľkosti tabu zoznamu. Pre naše potreby bola ale použitá modifikácia programu, ktorá počítala všetko automaticky a výsledky zaznamenávala do súborov.

Dosiahnuté výsledky a diskusia.

Pre hodnoty dimenzie n = 4, 5, 6 sa podarilo dosiahnuť pre tabu zoznam veľkosti 3 výsledky, ktoré sa od dĺžky optimálnej cesty nelíšia o viac ako 5%. Tento výsledok je potvrdený priemernou najkratšou dosiahnutou cestou počas 10 náhodných pokus, kde v každom bolo vykonaných 2000 krokov. Konkrétne hodnoty je možné nájsť v tabuľke.

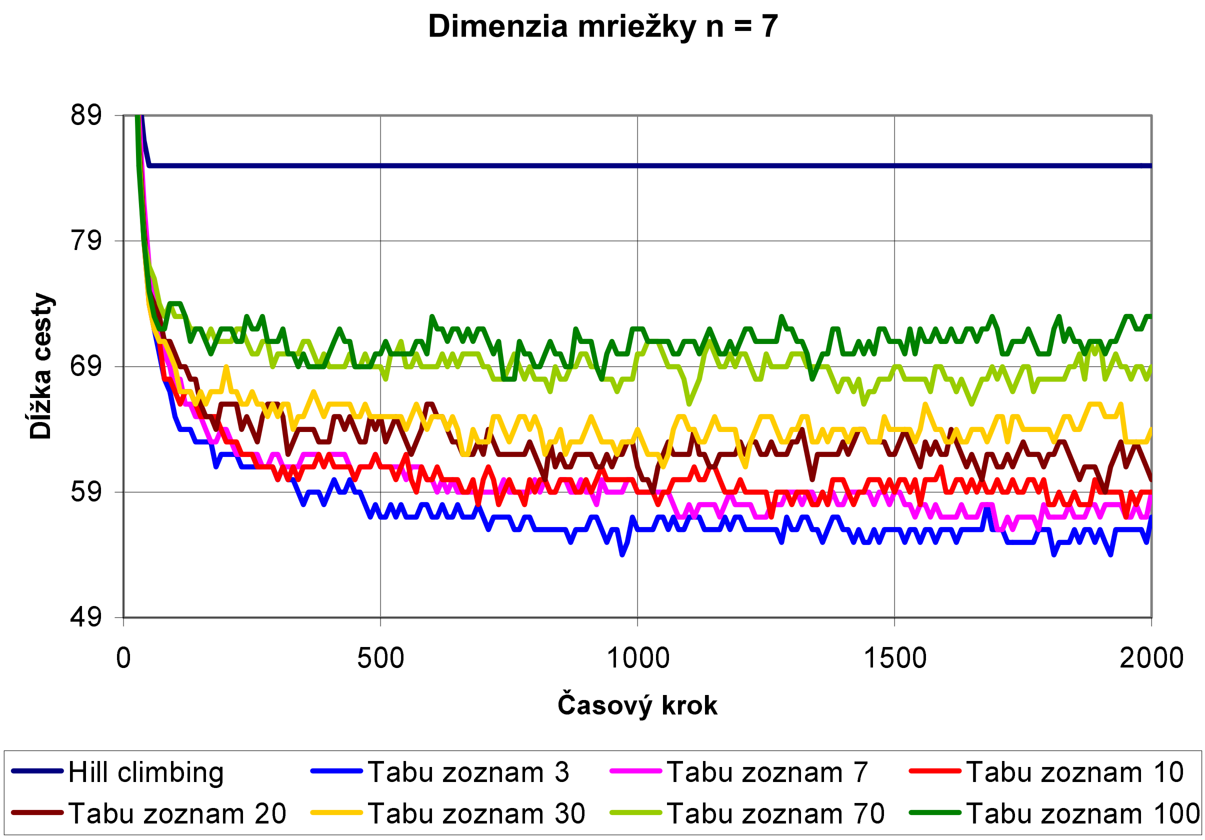
Pre hodnoty dimenzie n = 7, 8, 9, 10 sa podarilo postupne dosahovať výsledky, ktoré sa líšia do 20% od dĺžky optimálnej cesty pre rôznu veľkosť tabu zoznamu. Najoptimálnejšiu hodnotu pre tabu zoznam vyberáme z tabuľky podľa najmenšej hodnoty priemeru pre patričnú dimenziu mriežky. Lepšie výsledky sa dajú určite dosiahnuť zvýšením počtu krokov algoritmu. Táto domnienka je podložená grafmi pre dimenzie n = 7, 8, 9, 10, kde je badateľný klesajúci charakter kriviek. Krivky zodpovedajú priemernej hodnote veľkosti nájdenej cesty v jednotlivých krokoch algoritmu, kde priemer bol urobený cez 10 nezávislých pokusov. Optimálne hodnoty pre tabu zoznam sú iba orientačné, pretože ich presnejšie určenie je podmienené zvyšovaním počtu pokusov. Napriek tomu je z nich badateľná závislosť veľkosti tabu zoznamu a nájdenej minimálnej cesty, ktorú by bolo možné popísať parabolickou krivkou.

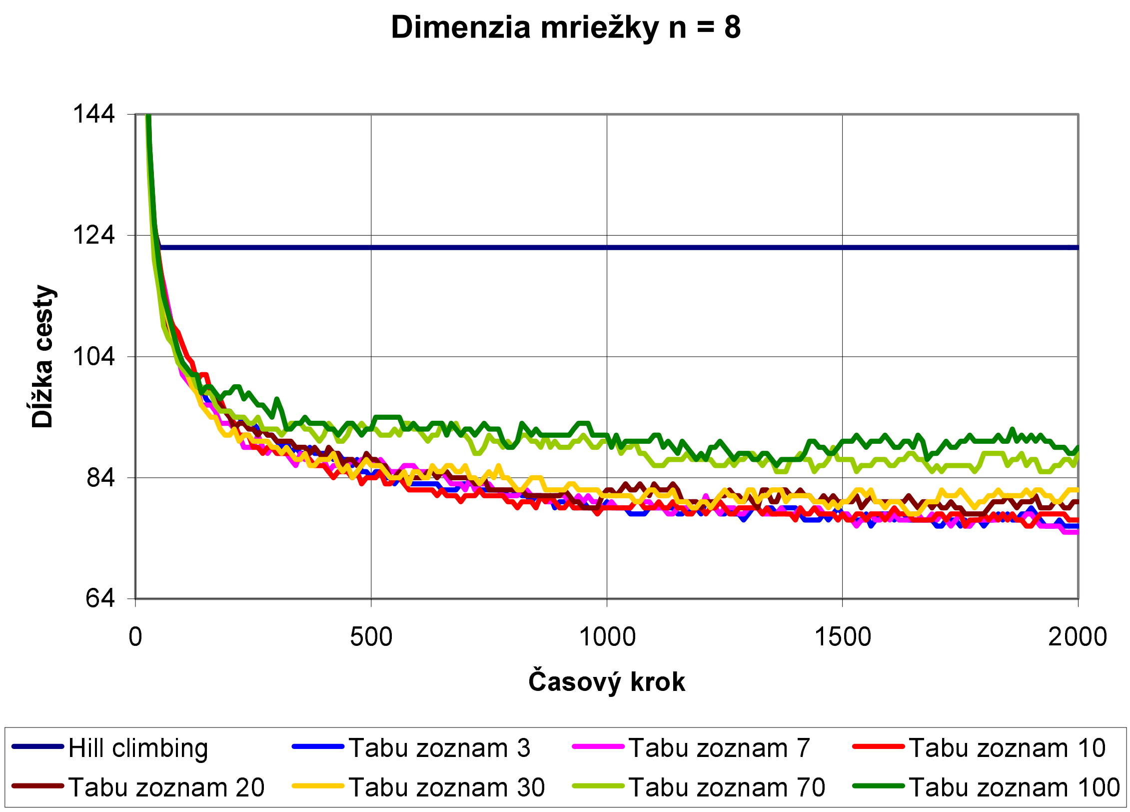
Ak si ešte všimneme grafy, je viditeľné veľmi skoré dosiahnutie lokálneho minima algoritmom Hill climbing. Ten dosahuje konečný výsledok po menej než 200 krokoch, pričom od optimálneho výsledku sa miestami líši o viac než 100%. Algoritmy Tabu search veľmi rýchlo predstihnú Hill climbing, a majú tendenciu stále sa zlepšovať. No postupné zlepšovanie sa mení s rastúcim časom simulácie na prešľapovanie okolo jednej hodnoty minimálnej nájdenej cesty, pretože krivky zodpovedajúce Tabu search sa pravdepodobne chovajú ako lineárna lomená funkcia.

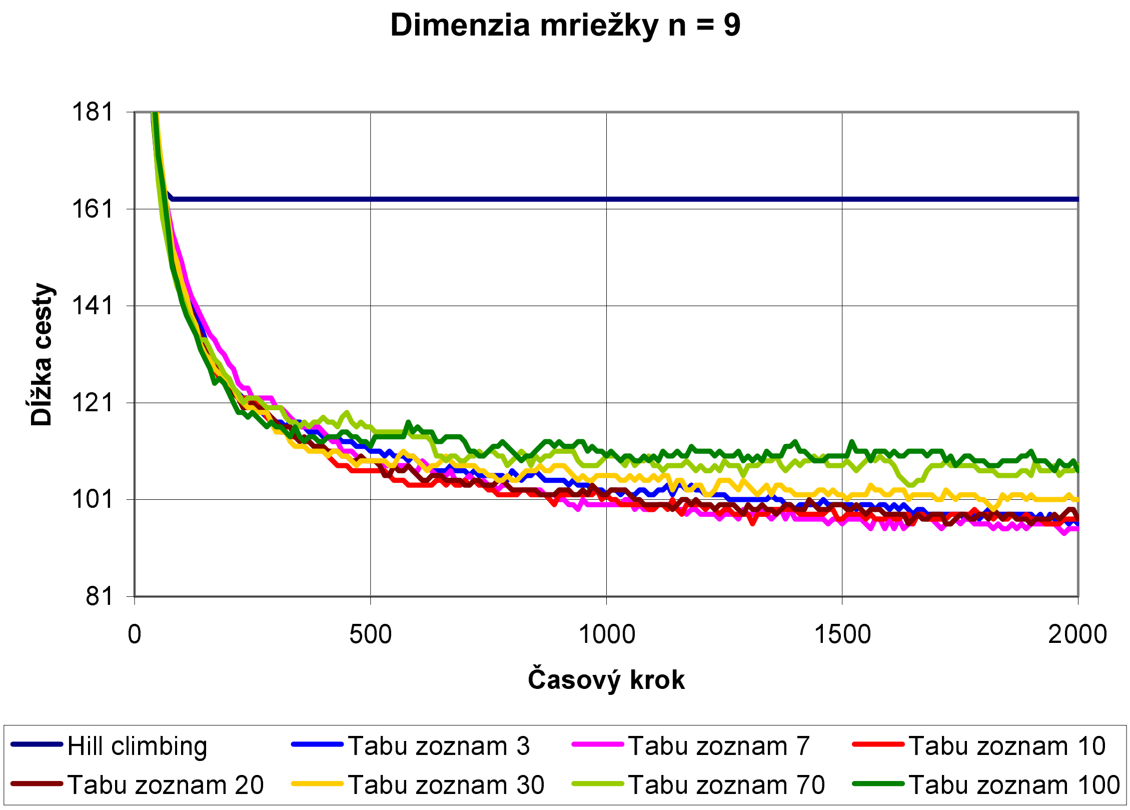
Grafy veľmi zreteľne vypovedajú aj o suboptimálnych výsledkoch (nie sú zobrazené grafy pre dimenziu n = 4, 5, 6, pretože ľahkosť dosiahnutia riešenia zapríčinila skorú osciláciu kriviek okolo optimálnych hodnôt, čo znížilo vypovedaciu hodnotu grafu). Je viditeľné, že pre všetky hodnoty tabu zoznamu dochádza s rastúcim časom simulácie k spomaľovaniu optimalizačného procesu. A teda je potrebné nájsť rozumný kompromis medzi časom simulácie a presnosťou výsledkov.

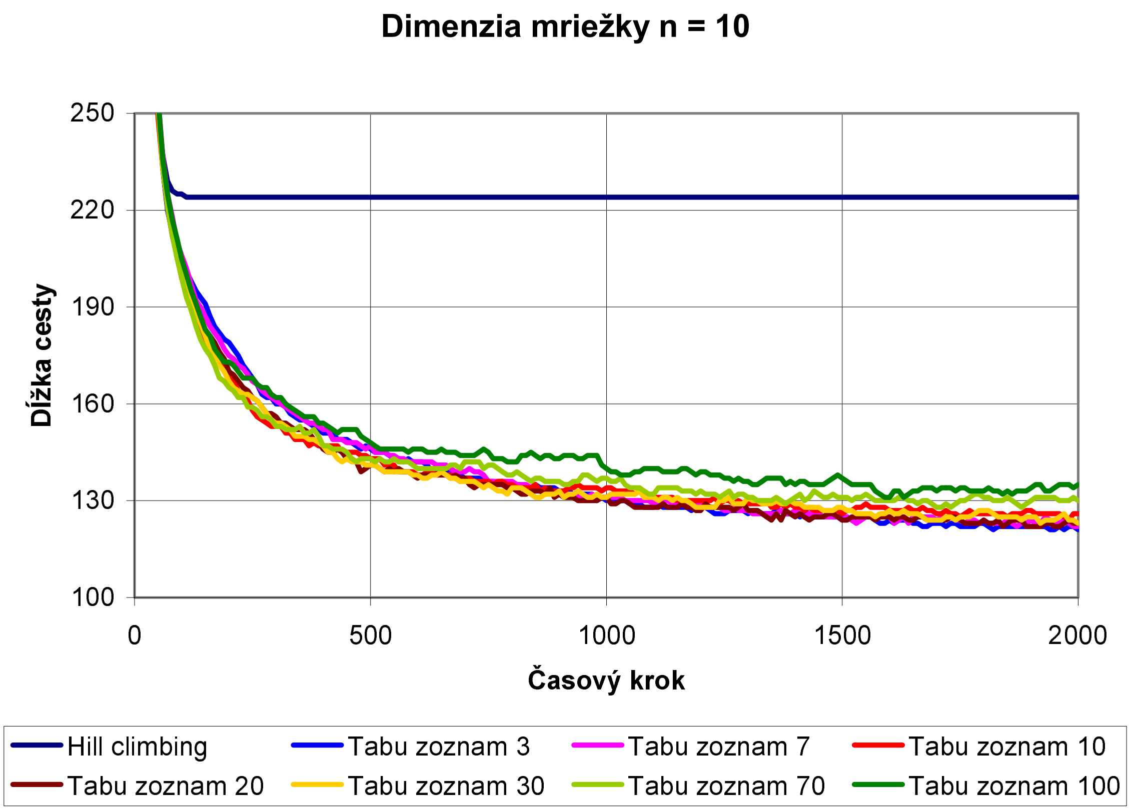
Minimálna nájdená dĺžka cesty počas 2000 krokov.

Dimenzia mriežky	Tabu zoznam	Pokusy										
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	Priemer
4	Hill climbing	26	20	22	22	22	22	22	18	22	22	21,80
	3	16	18	16	16	16	16	16	16	16	16	16,20
	7	16	16	18	18	16	16	18	18	18	18	17,20
	10	16	18	16	18	18	18	18	16	18	16	17,20
	20	18	18	18	16	18	18	18	18	18	18	17,80
	30	18	18	18	18	18	18	18	18	20	18	18,20
	70	20	20	20	20	20	20	20	20	20	22	20,20
	100	18	20	20	20	20	20	20	22	24	20	20,40
5	Hill climbing	38	40	36	44	40	46	44	42	40	36	40,60
	3	26	26	26	26	26	26	26	26	26	26	26,00
	7	26	26	26	26	28	26	26	28	28	28	26,80
	10	28	26	26	26	26	28	26	26	26	26	26,40
	20	28	28	28	28	28	28	28	26	28	26	27,60
	30	28	28	30	28	28	28	30	30	28	28	28,60
	70	32	32	30	32	30	30	30	30	30	32	30,80
	100	32	30	32	30	30	34	32	32	32	32	31,60
6	Hill climbing	50	54	54	60	64	62	64	58	60	62	58,80
	3	36	38	38	36	38	38	40	38	40	36	37,80
	7	38	40	40	38	38	40	40	40	38	36	38,80
	10	40	38	40	40	38	40	38	40	40	38	39,20
	20	40	42	40	40	42	40	40	40	38	40	40,20
	30	44	42	40	40	40	42	42	40	40	42	41,20
	70	46	42	44	44	42	42	44	46	42	44	43,60
	100	44	46	46	46	46	46	42	44	44	46	45,00
7	Hill climbing	80	94	88	80	84	82	96	90	88	82	86,40
	3	52	54	52	52	50	52	52	52	52	50	51,80
	7	52	52	52	50	54	50	52	56	54	54	52,60
	10	54	52	52	52	54	52	54	52	54	54	53,00
	20	54	56	54	54	54	56	54	58	56	52	54,80
	30	56	58	56	58	54	56	56	56	52	56	55,80
	70	56	58	58	60	58	60	60	60	58	60	58,80
	100	62	62	60	60	60	60	58	64	64	62	61,20
8	Hill climbing	112	120	122	112	118	104	124	120	134	126	119,20
	3	76	78	72	70	70	76	70	70	68	70	72,00
	7	68	70	74	72	70	70	72	70	70	72	70,80
	10	76	78	68	76	74	80	74	70	76	74	74,60
	20	70	72	74	74	72	70	72	74	76	74	72,80
	30	74	72	74	72	72	76	74	76	74	76	74,00
	70	78	80	76	80	74	76	76	80	78	76	77,40
	100	72	80	76	76	76	82	80	78	80	78	77,80
9	Hill climbing	150	180	152	168	162	152	154	156	152	150	157,60
	3	92	88	96	86	94	92	92	88	86	96	91,00
	7	92	88	86	92	92	92	86	94	94	96	91,20
	10	96	96	90	90	92	92	88	92	92	92	92,00
	20	92	90	94	90	94	90	98	90	86	90	91,40
	30	94	96	92	92	92	92	96	94	98	92	93,80
	70	98	100	94	104	96	98	102	100	102	94	98,80
	100	98	100	102	100	100	102	98	102	100	100	100,20
10	Hill climbing	236	212	224	216	232	224	194	228	210	220	219,60
	3	110	120	118	122	118	116	114	120	130	126	119,40
	7	124	114	124	120	110	120	112	112	124	118	117,80
	10	116	112	122	116	116	118	112	116	120	118	116,60
	20	126	120	112	114	122	120	118	116	122	120	119,00
	30	122	124	122	128	128	114	118	124	114	120	121,40
	70	126	124	122	124	118	118	120	124	116	120	121,20
	100	124	126	128	124	128	124	128	124	124	128	125,80


Dimenzia mriežky n = 7
89
79
69
59
49
Dĺžka cesty
0
500
1000
1500
2000
Časový krok
Hill climbing
Tabu zoznam 3
Tabu zoznam 7
Tabu zoznam 10
Tabu zoznam 20
Tabu zoznam 30
Tabu zoznam 70
Tabu zoznam 100


Dimenzia mriežky n = 8
144
124
104
84
64
Dĺžka cesty
0
500
1000
1500
2000
Časový krok
Hill climbing
Tabu zoznam 3
Tabu zoznam 7
Tabu zoznam 10
Tabu zoznam 20
Tabu zoznam 30
Tabu zoznam 70
Tabu zoznam 100


Dimenzia mriežky n = 9
181
161
141
121
101
81
Dĺžka cesty
0
500
1000
1500
2000
Časový krok
Hill climbing
Tabu zoznam 3
Tabu zoznam 7
Tabu zoznam 10
Tabu zoznam 20
Tabu zoznam 30
Tabu zoznam 70
Tabu zoznam 100


Dimenzia mriežky n = 10
250
220
190
160
130
100
Dĺžka cesty
0
500
1000
1500
2000
Časový krok
Hill climbing
Tabu zoznam 3
Tabu zoznam 7
Tabu zoznam 10
Tabu zoznam 20
Tabu zoznam 30
Tabu zoznam 70
Tabu zoznam 100