

Wojciech BOŻEJKO, Czesław SMUTNICKI
Politechnika Wroclawska

METODY PRZESZUKIWAŃ DYSKRETYCH PRZESTRZENI ROZWIĄZAŃ

Streszczenie. Proponujemy wykorzystanie graficznej reprezentacji przestrzeni rozwiązań problemów kombinatorycznych do badania własności tych problemów i analizy algorytmów rozwiązywania. Szczegółowo wprowadzane i dyskutowane są miary odległości rozwiązań dla przestrzeni permutacji oraz jej odwzorowania w euklidesowe przestrzenie 1,2,3D. Technikę zilustrowano na przykładzie algorytmów poszukiwań lokalnych dla jednomaszynowego problemu szeregowania z kryterium średniego opóźnienia zadań.

SEARCH METHODS OF THE DISCRETE SOLUTION SPACES

Summary. We propose to apply the graphic representation of the solution space of combinatorial problems for the analysis properties of the problem and solution algorithms. Particularly, there have been introduced and discussed distance measures between solutions in the space of permutations and its transformation into Euclidian spaces 1,2,3D. Local search algorithms for single-machine scheduling problem with the mean tardiness criterion have illustrated this technique.

1. Wstęp

Zadania optymalizacji kombinatorycznej i dyskretnej należą do klasy problemów bardzo trudnych zarówno z teoretycznego, jak i obliczeniowego punktu widzenia. Ich znaczenie praktyczne jest przy tym bezsporne w wielu dziedzinach życia, takich jak kodowanie sygnałów, telekomunikacja, szeregowanie zadań, montaż, sterowanie produkcją, systemy operacyjne, projektowanie, zarządzanie, chemia, przemysł polimerów i petrochemia [3]. Wyniki teorii złożoności obliczeniowej oraz rozmiar problemów praktycznych w sposób jednoznaczny eliminują z rozważań algorytmy dokładne (wyznaczające rozwiązanie globalnie optymalne) pozostawiając do zastosowania praktycznego jedynie algorytmy przybliżone. Z tego też względu wiele ośrodków na świecie zainteresowanych jest rozwojem tych dziedzin i narzędzi, które umożliwiają rozwiązywanie postawionych problemów w krótkim czasie z zadowalającą dokładnością (cechy te mają charakter silnie przeciwstawny).

Algorytmy optymalizacji kombinatorycznej muszą być „odporne” na podstawowe kłopoty numeryczne, takie jak: brak różniczkowalności lub ciągłości funkcji celu i ograniczeń,

istnienie olbrzymiej liczby ekstremów lokalnych, nieliniowość, przekleństwo wymiarowości, istnienie punktów zwodniczych. Powoduje to, że algorytmy wymienionej klasy są aktualnie bliższe podejściom stosowanym w dziedzinie sztucznej inteligencji (AI) i naturze niż „klasycznym” matematycznym metodom optymalizacji.

W latach dziewięćdziesiątych, odpowiednio do powyższych wniosków, nastąpił w optymalizacji kombinatorycznej zdecydowany odwrót od metod dokładnych oraz burzliwy rozwój “inteligentnych” algorytmów przybliżonych. Słuszność tego typu podejścia była tym bardziej uzasadniona, że wiele problemów uznawanych dotychczas za beznadziejnie trudne z obliczeniowego punktu widzenia doczekało się opracowania nowych szybkich i bardzo dokładnych technik przybliżonych nawet już dla przetwarzania sekwencyjnego [2]. Mimo istnienia wielu podejść stosowanych do rozwiązywania problemów tego typu, brak jest szczegółowych wskazówek, które kombinacje problem – podejście są najbardziej obiecujące; wyciąganie wniosków wymaga wykonania wielu żmudnych badań symulacyjnych. Alternatywnie, wskazówki takie można otrzymać między innymi poprzez szczegółową analizę cech przestrzeni rozwiązań.

W chwili obecnej znanych jest ponad 20 odmiennych strukturalnie podejść do rozwiązywania trudnych problemów optymalizacji kombinatorycznej (patrz przegląd w [3]) dla przetwarzania sekwencyjnego, zaś liczba ta mogłaby być ponad dwukrotnie większa, jeśli włączyć możliwości przetwarzania równoległego. Oprócz klasycznych już metod genetycznych, symulowanego wyzarcia, poszukiwania tabu czy spełnienia ograniczeń, występują także dotychczas mało znane, ale obiecujące techniki, jak symulowane wstrząsanie, poszukiwanie mrówkowe, poszukiwanie sterowane, zlepianie, poszukiwanie z pamięcią adaptacyjną, biochemiczne. Wiele z podejść jest wciąż w fazie rozwoju, niektóre tworzą już autonomiczne dziedziny, np. techniki genetyczne, sieci neuronowe. Niektóre z tych podejść w sposób „naturalny” umożliwiają wykonywanie przetwarzania równoległego (sieci neuronowe, przetwarzanie DNA), niestety, nie są one jeszcze konkurencją dla pozostałych. Najnowsze prace zmierzają w kierunku stosowania coraz bardziej “inteligentnych” sposobów przeszukiwania przestrzeni rozwiązań, ze wskazaniem na poszukiwania równoległe. Innowacje próbują zapobiec stagnacji procesu poszukiwań, na którą “cierpią” wszystkie znane metody, lecz której przyczyna nie została do końca wyjaśniona.

2. Odległości w przestrzeni rozwiązań

W celu obserwacji zachowania się wybranej metody poszukiwania potrzebne jest wprowadzenie pojęcia odległości pomiędzy elementami przestrzeni rozwiązań. Ze względu na szczupłość pracy, rozważania ograniczymy do tych problemów praktycznych, w których rozwiązania są reprezentowane permutacjami n -elementowymi (np. szeregowanie zleceń na jednym stanowisku, szeregowanie w systemie przepływowym, TSP, QAP i inne). Pokażemy, że takie miary odległości można wprowadzić w różny sposób. Oznaczmy przez $D(\alpha, \beta)$ odległość pomiędzy permutacjami α i β w przestrzeni permutacji P . Wskazane jest, by $D(\alpha, \beta)$ miała oczywiste własności metryki: (I) $D(\alpha, \beta) \geq 0$, (II) $D(\alpha, \beta) = 0 \Leftrightarrow \alpha = \beta$, (III) $D(\alpha, \beta) = D(\beta, \alpha)$, (IV) $D(\alpha, \beta) + D(\beta, \gamma) \geq D(\alpha, \gamma)$.

Miary odległości oparte na uporządkowaniu elementów. Jeśli algorytm generuje rozwiązania dopuszczalne w sposób systematyczny poprzez użycie specyficznego generatora, wtedy każdemu rozwiązaniu α można przyporządkować jego *numer porządkowy* $L(\alpha)$. Odpowiednio dla permutacji istnieją co najmniej cztery odmienne techniki generowania [1]: (a) w porządku leksykograficznym, (b) w porządku odwrotnym do leksykograficznego, (c) z minimalną liczbą transpozycji, (d) z minimalną liczbą transpozycji elementów przyległych. Odległość pomiędzy permutacjami może być zdefiniowana jako

$$D_1^o(\alpha, \beta) = (L(\beta) - L(\alpha) + p) \bmod p \quad (1)$$

gdzie p jest liczbą elementów przestrzeni P , $p = n!$, zaś \bmod jest operatorem modulo, lub

$$D_2^o(\alpha, \beta) = |L(\beta) - L(\alpha)|, \quad (2)$$

gdzie $|x|$ oznacza wartość bezwzględną z x . Pomijając oczywisty brak symetrii funkcji (1), obie wielkości mają koszt obliczeń bezpośrednio zależny od kosztu wyznaczenia wartości $L(\alpha)$ dla danej α . Poza tym ich wartości mogą wynosić aż $n!$, co może stwarzać problemy obliczeniowe dla dużych n .

Miary odległości oparte na przyleganiu elementów. Miary tego typu zliczają liczbę par elementów przylegających w obu permutacjach i mogą mieć postać

$$D_1^a(\alpha, \beta) = n - 1 - \|\{(i, j) : \underline{\alpha}_j - \underline{\alpha}_i = 1, \underline{\beta}_j - \underline{\beta}_i = 1\}\| \quad (3)$$

lub

$$D_2^a(\alpha, \beta) = n - 1 - \|\{(i, j) : |\underline{\alpha}_j - \underline{\alpha}_i| = 1, |\underline{\beta}_j - \underline{\beta}_i| = 1\}\|, \quad (4)$$

gdzie $\|A\|$ oznacza moc zbioru A , zaś $\underline{\gamma}$ jest permutacją odwrotną do permutacji γ (to znaczy $\underline{\gamma}_j$ jest pozycją w permutacji γ , na której występuje element o wartości j), czyli

$$\underline{\gamma}_{\gamma_s} = s, s=1,2,\dots,n. \quad (5)$$

Mimo iż (4) wydaje się bardziej intuicyjna niż (3), nie spełnia ona jednak warunku (II) osiągając wartość zero również dla pewnych $\alpha \neq \beta$.

Miary oparte na skojarzeniach. Miary odległości tego typu zliczają liczbę elementów będących na tej samej pozycji w obu rozwiązaniach, przykładowo

$$D_1^m(\alpha, \beta) = n - \| \{j : \underline{\alpha}_j = \underline{\beta}_j\} \|. \quad (6)$$

Miary odległości oparte na poprzedzaniu elementów. Porównują one relacje poprzedzania elementów w obu rozwiązaniach. Wprowadzając zbiór par *zgodnych* z permutacją α jako $R(\alpha) = \{(\alpha(i), \alpha(j)) : 1 \leq i < j \leq n\}$, można zdefiniować odległość

$$D_1^r(\alpha, \beta) = \| R(\alpha) \setminus R(\beta) \|. \quad (7)$$

Kolejna miara odległości zlicza liczbę wspólnie skierowanych par w obu permutacjach

$$D_2^r(\alpha, \beta) = \frac{n(n-1)}{2} - \| \{(i, j) : \underline{\alpha}_i < \underline{\alpha}_j, \underline{\beta}_i < \underline{\beta}_j\} \|. \quad (8)$$

Dalej, niech k_{ij}^α będzie wartością binarną równą 1, gdy i poprzedza j w permutacji α . Istnieje również inny sposób wprowadzenia odległości, mianowicie

$$D_3^r(\alpha, \beta) = \sum_{i,j \in N, i \neq j} (k_{ij}^\alpha \text{ xor } k_{ij}^\beta). \quad (9)$$

Miary odległości oparte na rozproszeniu elementów. Porównują one pozycję każdego z elementów w obu rozwiązaniach, przykładowo

$$D_1^p(\alpha, \beta) = \sum_{j=1}^n | \underline{\alpha}_j - \underline{\beta}_j | \quad (10)$$

$$D_2^p(\alpha, \beta) = \sum_{j=1}^n (\underline{\alpha}_j - \underline{\beta}_j)^2. \quad (11)$$

Miary oparte na ruchach. Jako miarę odległości przyjmujemy minimalną liczbę ruchów (np. transpozycji elementów, wymian dowolnych dwóch elementów, wstawienia elementów na określoną pozycję) potrzebnych do przekształcenia permutacji α w permutację β , tzn.

$$D^\nu(\alpha, \beta) = \min \{ k : (\pi^0, \pi^1, \dots, \pi^k), \pi^0 = \alpha, \pi^i \in N(\pi^{i-1}), i = 1, 2, \dots, k, \pi^k = \beta \}, \quad (12)$$

gdzie $N(\gamma)$ oznacza zbiór wszystkich permutacji osiągalnych z γ , gdy wykonywany jest jeden ustalony rodzaj ruchów (tzw. sąsiedztwo lub otoczenie). Oznaczmy dalej przez D_1^ν miarę

wykorzystującą ruchy oparte na transpozycji elementów przyległych, przez D_2^y miarę z ruchami polegającymi na wymianie dowolnych dwóch elementów, oraz przez D_3^y miarę opartą na ruchach będących wstawieniem elementu na dowolną pozycję w permutacji.

Miary odległości oparte na wartości kryterium. Przyjmując, że permutacji α odpowiada wartość funkcji celu $K(\alpha)$, to miarą może być

$$D^k(\alpha, \beta) = |K(\alpha) - K(\beta)|. \quad (13)$$

W odróżnieniu od poprzednich, miary oparte na wartości kryterium są ściśle związane z problemem optymalizacyjnym, a nie z samą przestrzenią rozwiązań.

Miary problemowo-zorientowane. Miary te bazują na specyficznych danych i własnościach problemu. Przykładowo, rozważając problem szeregowania na jednej maszynie z terminami gotowości r_j , w którym permutacja γ implikuje terminy zakończenia zadań o wartościach C_j^γ , możemy wprowadzić jedną z miar odległości

$$D_1^d(\alpha, \beta) = \sum_{j=1}^n |C_j^\alpha - C_j^\beta|, \quad (14)$$

$$D_2^d(\alpha, \beta) = \sum_{j=1}^n |r_{\alpha(j)} - r_{\beta(j)}|, \quad (15)$$

lub inne analogiczne, zastępując sumowanie operatorem maksimum.

Tak skonstruowane funkcje spełniają (lub nie) własności (I)-(IV) wymienione w wstępie, co jednak w niektórych przypadkach nie jest oczywiste i wymaga formalnego dowodu. Dodatkowo, pomiędzy nimi istnieją pewne zależności pozwalające zredukować ich liczbę i uprościć proces ich obliczania. Pewne z tych własności przedstawiamy poniżej bez dowodów.

Własność 1. Dla dowolnych permutacji α, β zachodzi

$$D_1^r(\alpha, \beta) = D_3^r(\alpha, \beta) = \frac{1}{2} D_2^r(\alpha, \beta). \quad (16)$$

Własność 2. Dla dowolnych permutacji α, β , zachodzi

$$D_1^y(\alpha, \beta) = \frac{1}{2} D_3^y(\alpha, \beta) \quad (17)$$

3. Geometryczna interpretacja przestrzeni rozwiązań

Celem naszym jest uzyskanie transformacji T przestrzeni dyskretnej P w euklidesową ciągłą przestrzeń k -wymiarową E^k z odległością d . Oczekujemy, że T nie będzie zbyt kosztowne obliczeniowo oraz „w miarę możliwości” zachowa odległość D przekształcając rozwiązania bliskie w P w punkty bliskie w E^k , zaś odległe w P - w odległe w E^k . Istnieje wiele sposobów konstrukcji takiej transformacji. Poniżej opiszemy tylko jeden z nich oparty na technice punktów referencyjnych, umożliwiającą odwzorowanie P w płaszczyznę E^2 . Odpowiednio wartość funkcji kryterialnej może zostać odwzorowana w kolor lub stopień szarości.

Rozpoczynamy od wyboru odległości D używanej w P (jedna z opisanych w rozdziale poprzednim). Następnie wybieramy permutacje referencyjne $\alpha^1, \alpha^2, \alpha^3 \in P$ oraz konstruujemy ich obrazy $e^1, e^2, e^3 \in E^2$, $e^i = T(\alpha^i)$, posługując się warunkami $d(e^1, e^2) = D(\alpha^1, \alpha^2)$, $d(e^2, e^3) = D(\alpha^2, \alpha^3)$, $d(e^3, e^1) = D(\alpha^3, \alpha^1)$. Jako miarę odległości d przyjmujemy zwykłą odległość euklidesową. Wybór punktów referencyjnych jest w zasadzie dowolny, jednak należy dążyć do dużego rozproszenia ich obrazów w E^2 . Obraz dowolnej permutacji γ możemy uzyskać w dwóch krokach. Wpierw konstruujemy pomocniczy punkt t w przestrzeni E^3 taki, że $d(t, e^1) = D(\gamma, \alpha^1)$, $d(t, e^2) = D(\gamma, \alpha^2)$, $d(t, e^3) = D(\gamma, \alpha^3)$. Następnie dokonujemy rzutu prostokątnego punktu t z przestrzeni E^3 na płaszczyznę E^2 .

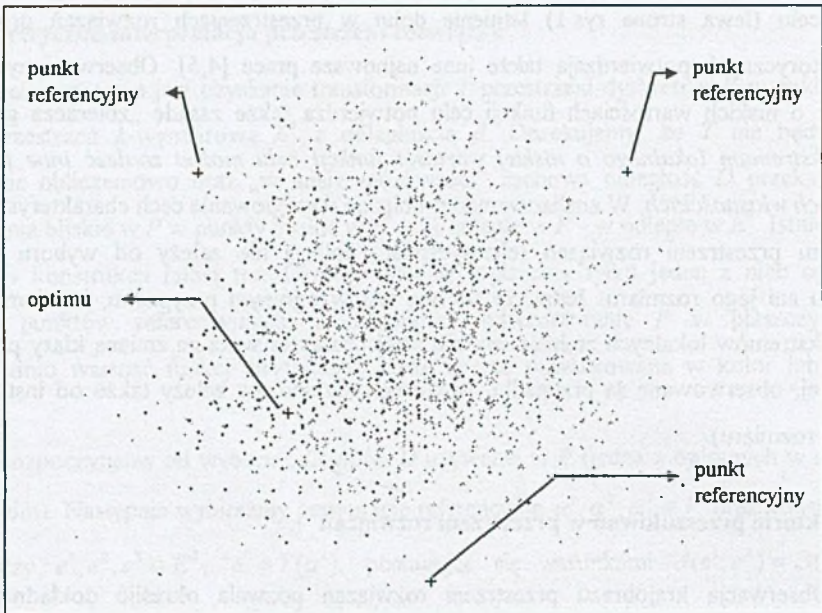
Przykład zastosowania tak opisaną transformacji można znaleźć na rys. 1-4. Obrazy zawierają zestaw losowych permutacji 25-elementowych reprezentujących rozwiązania losowej instancji problemu szeregowania zadań na jednej maszynie z niezerowymi żądanymi terminami ich zakończenia oraz z kryterium średniego opóźnienia zadań. Jako miara odległości w P została użyta D'_3 , równoważna z D_1^* na mocy Wł. 2. Miary te miały najslabiej występujący efekt “zlepiania się” punktów (kilka elementów przestrzeni rozwiązań jest rzutowanych na jeden punkt przestrzeni dwuwymiarowej), niekorzystny przy redukcji wymiaru przestrzeni. Wartość funkcji celu została odwzorowana w poziomy szarości punktów, punktom szarym odpowiada wysoka wartość funkcji celu, ciemnym – niska. Wyróżniono punkty referencyjne oraz optimum (dokładniej, najlepsze wśród analizowanych). Przekształcenie T pozwoliło na uzyskanie wizualizacji “krajobrazu” (*landscape*) przestrzeni rozwiązań wymienionego problemu. Można zauważyć charakterystyczny chaotyczny rozkład ekstremów lokalnych oraz „dolinę” (*valley*) zawierającą rozwiązania o podobnych, bliskich optymalnej wartościach

funkcji celu (lewa strona rys.1) Istnienie dolin w przestrzeniach rozwiązań problemów kombinatorycznych potwierdzają także inne najnowsze prace [4,5]. Obserwowany rozkład punktów o niskich wartościach funkcji celu potwierdza także zasadę „zbieracza grzybów” *blisko ekstremum lokalnego o niskiej wartości funkcji celu można znaleźć inne punkty o podobnych własnościach*. W analizowanym problemie występowanie cech charakterystycznych krajobrazu przestrzeni rozwiązań (chaotyczność, doliny) nie zależy od wyboru instancji problemu ani jego rozmiaru. Jednakże tak nie jest w ogólnym przypadku, bowiem rozkład dolin i ekstremów lokalnych zmienia istotnie swój charakter wraz ze zmianą klasy problemu. Co więcej, obserwowane są przypadki, w których rozkład ten zależy także od instancji (jej danych i rozmiaru).

4. Trajektorie przeszukiwań w przestrzeni rozwiązań

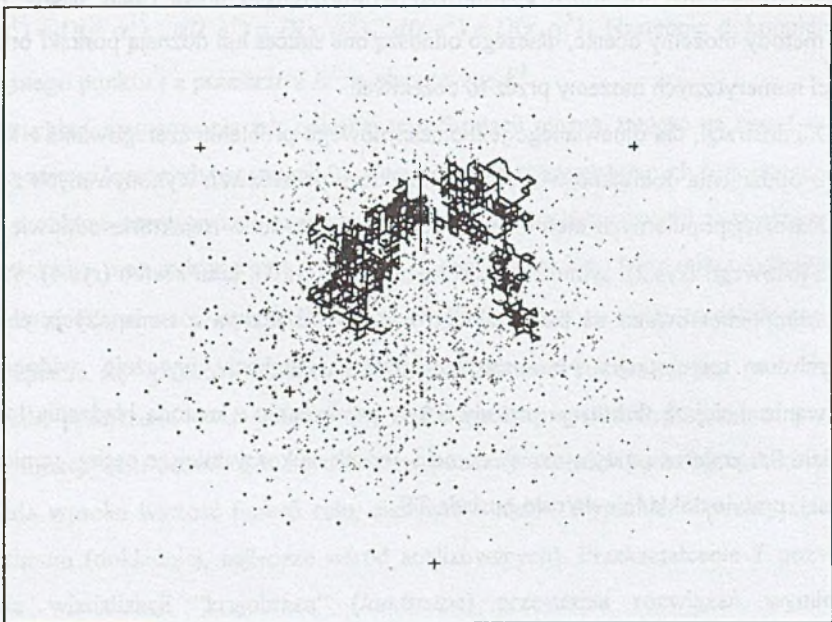
Obserwacja krajobrazu przestrzeni rozwiązań pozwala określić dokładniej, jakie własności powinna mieć potencjalna metoda rozwiązywania oparta na przeszukiwaniu tej przestrzeni. W szczególności można sprecyzować, jak określić równowagę pomiędzy rozproszeniem (*diversification*) poszukiwań a ich intensyfikacją (*intensification*). Z kolei dokonując wizualizacji trajektorii poszukiwań wykonywanych przez różne znane w chwili obecnej metody możemy ocenić, dlaczego odnoszą one sukces lub doznają porażki oraz jakich własności numerycznych możemy przez to oczekiwać.

Dla ilustracji, dla omawianego jednomaszynowego problemu szeregowania z kryterium średniego opóźnienia dokonano wizualizacji trajektorii poszukiwań wykonywanych z użyciem kilku najbardziej popularnych metod. Na rys.2-4 przedstawiono trajektorie odpowiednie dla: błądzenia losowego (rys.2), symulowanego wyzarzania (rys.3), tabu search (rys.4). Wszystkie metody zaimplementowano na bazie takiego samego sąsiedztwa z transpozycją elementów przyległych w permutacji. Na przedstawionych rysunkach wyraźnie widoczna jest zdecydowanie mniejsza fluktuacja metody SA w porównaniu z metodą błądzenia losowego. Wprawdzie SA zmierza „statystycznie” do celu, jednak najkorzystniejsze cechy, „zmierzające” najszybciej, prawie dokładnie do celu posiada TS.



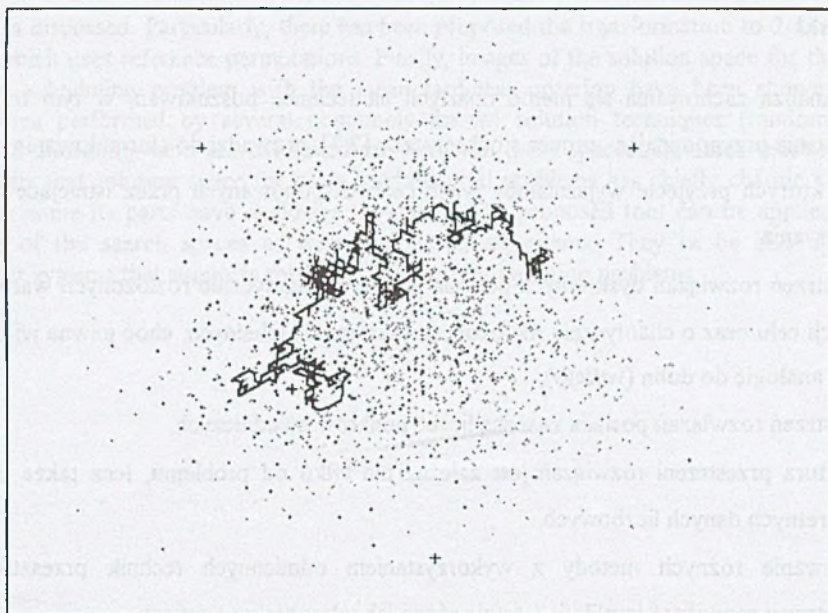
Rys.1. Przestrzeń permutacji 25 elementów. Ciemniejszy kolor oznacza rozwiązania o wartościach funkcji celu bliskich optymalnej

Fig. 1. Space of 25 elements permutations. Dark colour denotes solutions with goal function value close to optimal

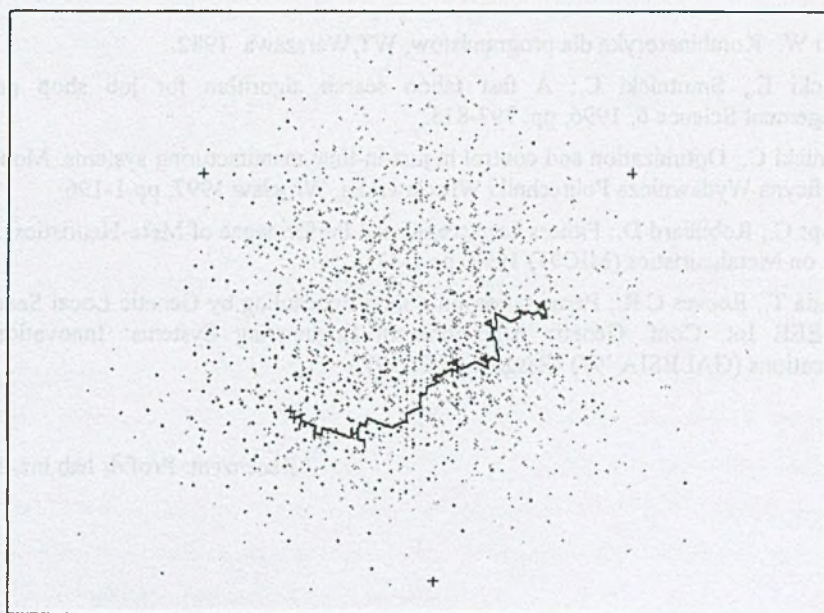


Rys.2. Trajektoria poszukiwań dla błędzenia losowego (wymiana par przyległych)

Fig. 2. Search trajectory for random search algorithm (transposition of adjacent elements)



Rys.3. Trajektoria poszukiwań algorytmu symulowanego wyzarczania (SA)
Fig.3. Search trajectory for simulated annealing algorithm (SA)



Rys.4. Trajektoria poszukiwań algorytmu Taboo Search (TS)
Fig.4. Search trajectory for Taboo Search algorithm (TS)

5. Wnioski

Analiza zachowania się metod opartych na technice poszukiwań, w tym trajektorii poszukiwania przypominając proces stochastyczny [2,3], prowadzi do sformułowania szeregu hipotez, których przyjęcie wyjaśniałoby wiele cech eksponowanych przez istniejące metody rozwiązywania:

- przestrzeń rozwiązań dyskretnych posiada punkty o chaotycznie rozłożonych wartościach funkcji celu oraz o chaotycznie rozłożonych ekstremach lokalnych, choć pewne jej obszary mają analogię do dolin (*valleys*),
- przestrzeń rozwiązań posiada znaczną liczbę punktów zwodniczych,
- struktura przestrzeni rozwiązań jest zależna nie tylko od problemu, lecz także od jego konkretnych danych liczbowych,
- stosowanie różnych metody z wykorzystaniem odmiennych technik przeszukiwania przestrzeni rozwiązań implikują istotnie różne ich własności numeryczne.

LITERATURA

1. Lipski W.: Kombinatoryka dla programistów, WT, Warszawa 1982.
2. Nowicki E., Smutnicki C.: A fast taboo search algorithm for job shop problem. *Management Science* 6, 1996, pp. 797-813.
3. Smutnicki C.: Optimization and control in just-in-time manufacturing systems. Monografia 25, Oficyna Wydawnicza Politechniki Wrocławskiej, Wrocław 1997, pp.1-196
4. Fonlupt C., Robilliard D.: Fitness Landscapes nad Performance of Meta-Heuristics. 2nd Int. Conf. on Metaheuristics (MIC97) 1997, pp.1-13.
5. Yamada T., Reeves C.R.: Permutation Flowshop Scheduling by Genetic Local Search. 2nd IEE/IEEE Int. Conf. Genetic Algorithms in Engineering Systems: Innovations and Applications (GALESIA '97) Glasgow, UK 1997.

Recenzent: Prof.dr hab.inż. K.Wala

Abstract

We propose to apply the graphic representation of the solution space of combinatorial problems for the analysis properties of the problem and solution algorithms. First, there have been introduced and discussed distance measures between solutions in the space of permutations. These measures can base on permutation order, adjacency of elements in a permutation, precedence of elements, positions of elements, criterion value, or specific data of the problem. Next, the subject of transformation of permutation space into Euclidian spaces

1,2,3D is discussed. Particularly, there has been proposed the transformation to 2-dimensional plane, which uses reference permutations. Finally, images of the solution space for the single-machine scheduling problem with the mean tardiness criterion have been shown. Search trajectories performed by several commonly known solution techniques (random search, simulated annealing, tabu search) have been drawn in these spaces. Obtained results confirm hypothesis that solution space for most combinatorial problems has chiefly chaotic character, however some its parts have analogies to valleys. The proposed tool can be applied for the analysis of the search spaces as well as solution algorithms. They can be also applied in computer systems that supports solving of the hard optimisation problems.