

Studi esplorativi sul problema del commesso viaggiatore tramite algoritmo genetico

Carlo Zollo

14 giugno 2022

Indice

| | |
|---|----------|
| Introduzione | 2 |
| Problema del commesso viaggiatore | 2 |
| Algoritmi genetici | 2 |
| Approccio al problema | 4 |
| Implementazione algoritmo | 5 |
| Adattamento dello schema base al TSP | 5 |
| Struttura del codice | 6 |
| Risultati e conclusioni | 7 |
| Confronto tra operatori di incrocio | 7 |
| Attendibilità generale dell'algoritmo | 8 |
| Conclusioni | 12 |

Introduzione

Problema del commesso viaggiatore

Il problema del commesso viaggiatore (TSP, acronimo dall'inglese *Travelling Salesman Problem*) è rappresentativo della classe di problemi di ottimizzazione combinatoria. In questo lavoro lo schematizziamo così: un reticolo quadrato di lato L ha N siti¹ occupati (da qui, equivalentemente, città); la condizione è di partire da uno di questi e attraversare tutti gli altri esattamente una volta, poi tornare a quello iniziale. La richiesta è di scegliere il percorso che minimizza la distanza totale. Delle diverse interpretazioni, useremo quella simmetrica² e con distanza euclidea. Uno dei modi naturali per descrivere un percorso valido è assegnargli una stringa contenente l'etichetta dei siti da attraversare, nell'ordine in cui vengono attraversati.

Risolvere esattamente il TSP è molto costoso in termini di risorse computazionali³, ma ha diverse applicazioni; per questo sono stati proposti diversi algoritmi, euristici ed esatti. Uno degli approcci ideali è tramite algoritmi genetici, che hanno il vantaggio di riuscire a sondare *bene* i molti minimi locali presenti in questa classe di problemi.

Algoritmi genetici

Gli algoritmi genetici (GA) sono una classe di algoritmi stocastici basati sul principio di evoluzione: in natura gli individui più adatti hanno maggiori chance di riprodursi, quindi ogni generazione dovrebbe essere in media *migliore* di quella precedente. Lo schema base di questi algoritmi è il seguente:

- Generazione di N_{pop} individui e calcolo della loro *fitness*;

¹etichettati, uno per ogni città

²la distanza tra due città è la stessa sia che si parta da una che dall'altra.

³una stima grezza dell'andamento temporale si può avere contando tutti i possibili percorsi, $\approx N!$.

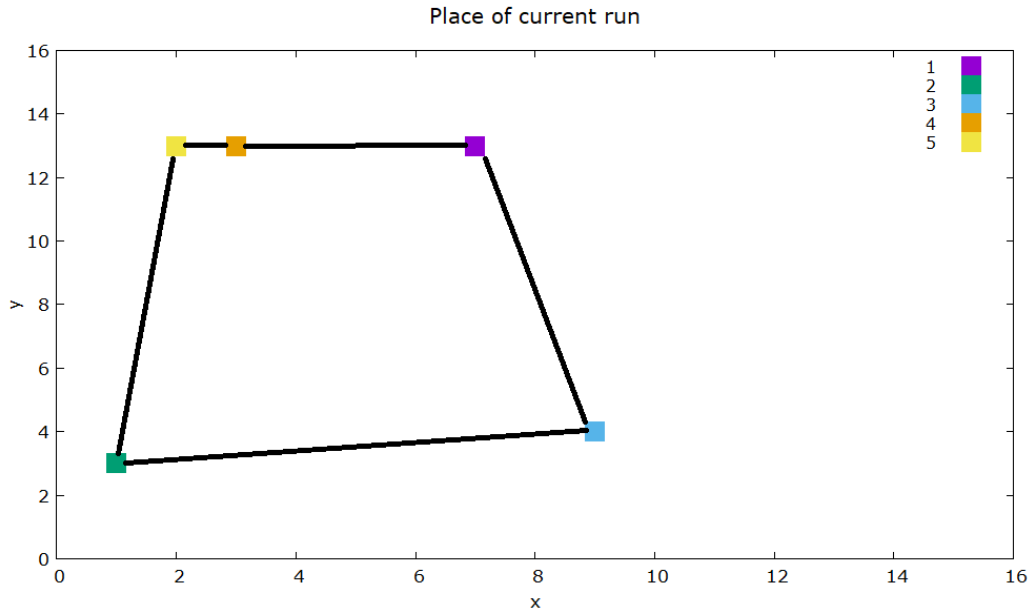


Figura 1: Reticolo quadrato di lato $L = 15$ contenente $N = 5$ siti occupati, o città. Il percorso più breve è quello in linea nera e viene schematizzato con $\langle 1\ 3\ 2\ 5\ 4 \rangle$, o una qualsiasi permutazione che preservi l'ordine di visita.

- Un operatore di selezione agisce sulla popolazione, restituendo due individui in base alla loro *fitness*;
- Su questi agisce un operatore di incrocio, che restituisce due individui *figlio*, con una certa probabilità P_C ;
- Sulla prole agisce un operatore di mutazione secondo una certa probabilità P_M ;
- Quando l'operatore di selezione avrà agito $N_{pop}/2$ volte, la generazione iniziale verrà sostituita dai figli, che inizieranno un altro ciclo.
- L'algoritmo termina una volta soddisfatta una certa condizione, o dopo un numero massimo di generazioni N_{gen} .

Nella presentazione dello schema è stata introdotta un termine di fondamentale importanza, *fitness*: intendiamo una certa proprietà di un individuo che ne quantifica il grado di adattamento all'ambiente. Tra la terminologia tipica della biologia troviamo un nome più familiare: operatore; selezione, incrocio (o *crossover*), e mutazione sono il nucleo del processo[1], ciò che

distingue un algoritmo genetico da un altro. In questo lavoro ci concentriamo in particolare sul secondo, fondamentale per questa specifica classe di problemi.

Approccio al problema

L'idea del lavoro si basa sull'articolo[2]: gli autori propongono un nuovo operatore di incrocio, CX2, confrontandone le soluzioni ottenute con quelle restituite dai più utilizzati PMX e OX. Questo progetto vuole replicare alcuni dei risultati ottenuti dagli autori, utilizzando alcune configurazioni dei TSP dalla libreria[3]; inoltre, come parte originale⁴, vogliamo verificare la bontà del GA, modificando i parametri e la strategia interni, con diverse configurazioni generate casualmente e al variare di N . I risultati di questa seconda parte sono ottenuti confrontando le soluzioni del GA con quelle calcolate *brute-force*.

⁴oltre all'implementazione dell'intero algoritmo

Implementazione algoritmo

Adattamento dello schema base al TSP

Adattiamo la terminologia base degli algoritmi genetici al TSP. Gli individui saranno delle sequenze $\{S_p\}_p$ del tipo $S_p = \langle p_1 p_2 \dots p_N \rangle$ con $p_i \in \mathbb{N}^+ \forall i \in [1, N]$; sono valide se non contengono due volte lo stesso numero (nel codice chiamato impropriamente *bit*). Vogliamo minimizzare la distanza totale, allora scegliamo come *fitness*:

$$F(S_p) = \frac{L^2}{\sum_{i=1}^{N-1} d_{i,i+1}^{(S_p)} + d_{N,1}^{(S_p)}}, \quad (1)$$

dove $d_{i,j}^{(S_p)}$ indica la distanza della città p_i da p_j e il fattore L^2 è scelto⁵ in modo da lavorare con numeri vicini all'unità. Siccome in questo lavoro il ruolo fondamentale è dell'operatore di *crossover*, abbiamo implementato dei modelli semplici per gli altri due; come operatore di selezione si è scelto la cosiddetta *roulette wheel*: a ogni sequenza si associa come probabilità la sua *fitness* divisa per la somma delle *fitness* di tutta la popolazione. Come operatore di mutazione abbiamo scelto la trasposizione (per la classe dei TSP) del cosiddetto *one-bit flip*: nella sequenza vengono randomicamente scelti due bit e scambiati di posto. Gli operatori di *crossover* sono PMX, *Partially Mixed crossover operator*, OX *Order crossover operator*, e CX2, *Cycle crossover operator 2*; per brevità di esposizione⁶ aggiungiamo solo che l'idea di base dei primi due è di preservare delle porzioni, scelte randomicamente, delle sequenze *genitore*, mentre il CX2 è stato proposto per limitare la possibilità di avere sequenze *figlio* uguali a quelle *genitore*. Modifica fondamentale rispetto al GA proposto dagli autori, è l'implementazione della cosiddetta *elitism selection strategy*: una piccola percentuale, il parametro `elitism`, dei migliori individui di una generazione non viene sostituita dai peggiori individui della

⁵senza perdita di generalità.

⁶Maggiori informazioni nell'articolo[2]

successiva. Abbiamo deciso di agire in questo modo in seguito ai test preliminari per $N \gtrsim 10$, che mostravano una crescita *piccola* della *fitness* media della popolazione.

Struttura del codice

Per le simulazioni abbiamo usato il codice `GA_for_TSP.f90`⁷, che descriviamo brevemente.

- Genera una configurazione casuale (o ne legge una) del TSP e da qui costruisce una matrice contenente le distanze tra le città⁸;
- inizia la *run* vera e propria: N_{sim} simulazioni (è importante sondare l'*evoluzione* a partire da diversi genitori) di N_{gen} generazioni che si susseguono a partire da una generata casualmente. L'ordine è quello descritto nello schema base dei GA, e ogni simulazione è ripetuta per i 3 operatori di *crossover*;
- il codice tiene traccia della *fitness* media e della sua dispersione per ogni generazione, e soprattutto *fitness* e composizione della cosiddetta sequenza d'*elite*: l'individuo meglio adattato nel corso di tutta l'*evoluzione*, che sarà il risultato dell'algoritmo;
- Per finire, l'approccio *brute-force*: vengono calcolate tutte le permutazioni possibili delle N città e valutate le *fitness* di ogni sequenza così prodotta.

⁷Consultabile alla repository https://github.com/DeWitt46/HW_Fisica_Computazionale.

⁸una sola volta, non è necessario calcolare le distanze ogni volta che serve la *fitness*

Risultati e conclusioni

Confronto tra operatori di incrocio

Vogliamo confrontare i risultati ottenuti dai 3 diversi operatori di *crossover*. Per tutti i problemi in questa sezione abbiamo fissato i parametri $P_C = 0.95$, $P_M = 0.1$, $N_{sim} = 30$, **elitism** = 15%; Tab.1 mostra gli altri e le configurazioni nelle quali sono applicati⁹. Nella Tab.2 mostriamo i risultati ottenuti

| configurazione TSP | N_{pop} | N_{gen} |
|---------------------|-----------|-----------|
| SEVEN ($N = 7$) | 30 | 10 |
| P_01 ($N = 15$) | 200 | 40 |
| GR_17 ($N = 17$) | 200 | 40 |
| FRI_26 ($N = 26$) | 400 | 40 |
| ATT_48 ($N = 48$) | 1200 | 34 |

Tabella 1: Parametri dell'algoritmo genetico utilizzati per i 3 operatori di *crossover* nelle diverse configurazioni del TSP.

dai confronti: il valore ottimale è preso dalla libreria, per *optimum* intendiamo il numero di volte che il miglior risultato si è presentato sul totale delle simulazioni; infine, la media è ottenuta dai migliori individui di ogni simulazione. Con l'implementazione della *elitism selection strategy* notiamo innanzitutto un generale incremento nelle prestazioni dell'algoritmo rispetto all'articolo[2], ma anche un disaccordo nel comportamento dell'operatore proposto da Hussain et al.; nel loro lavoro mostrano un lieve vantaggio nell'uso di CX2 per un numero contenuto di città, mentre per $N \gtrapprox 30$ c'è generale accordo con gli altri operatori, escluso due configurazioni per le quali il vantaggio è consistente. Guardando Tab.2 CX2 è in linea con PMX ed OX per $N \lesssim 20$, ma per configurazioni con un numero maggiore di città si presenta un netto vantaggio nell'uso di OX2, che riesce a trovare anche il risultato

⁹disponibili nella libreria [3], mentre SEVEN è in [2].

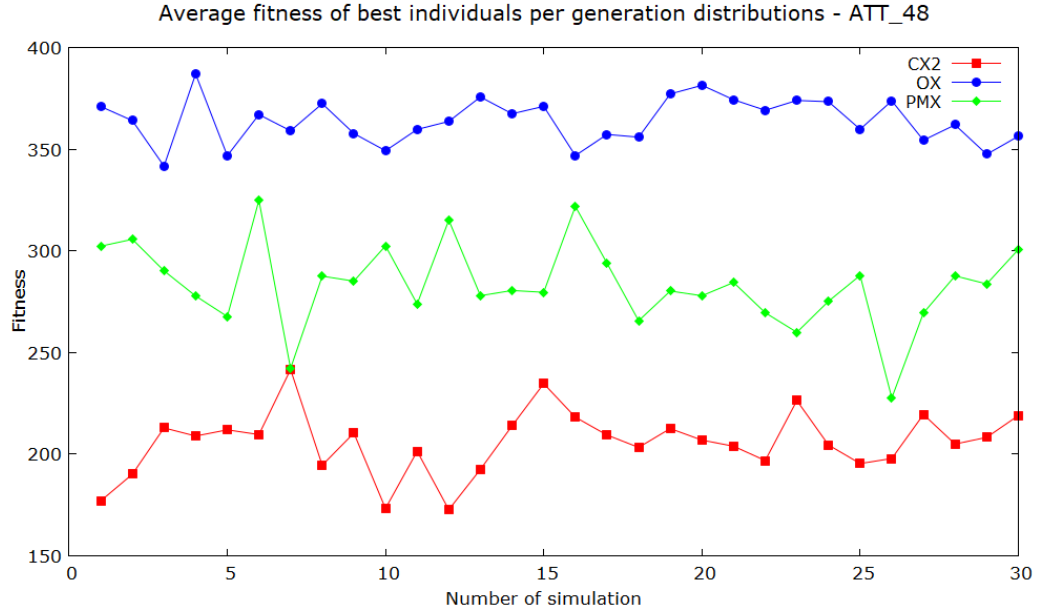


Figura 2: Distribuzioni della *fitness* media dei migliori individui tra tutte le generazioni, per ogni simulazione, a confronto per i 3 operatori. OX ha stabilmente una *fitness* media maggiore.

ottimale per la configurazione FRI_26. Una possibile motivazione per questo contrasto è da ricercare anche nella scelta dei parametri: date le nostre limitate risorse computazionali $N_{pop} \leq 40^{10}$.

Aggiungiamo qui che è risultato vantaggioso, per ATT_48, abbassare il numero degli individui per permettere di aumentare di molto N_{gen} visto che, come ci si aspetta dalla classe dei GA, è in generale difficile trovare un plateau nella distribuzione della *fitness*_{3,4}.

Attendibilità generale dell'algoritmo

Vogliamo ora confrontare la bontà dell'algoritmo su diverse configurazioni randomiche, il cui valore ottimale viene calcolato *brute-force* verificando la *fitness* di tutte le possibili permutazioni delle città. Per ogni $N \leq 11$ generiamo 10 problemi: siamo interessati all'*optimum* e alla *fitness* media, in più vogliamo stimare il vantaggio in termini di risorse computazionali dell'algoritmo genetico. Siccome N è *piccolo*, utilizziamo CX2 con i seguenti parametri: $P_C = 0.95$, $P_M = 0.1$, $N_{sim} = 30$, $N_{pop} = 30$, $N_{gen} = 30$.

¹⁰in termini di risorse incide di più rispetto a N_{gen} .

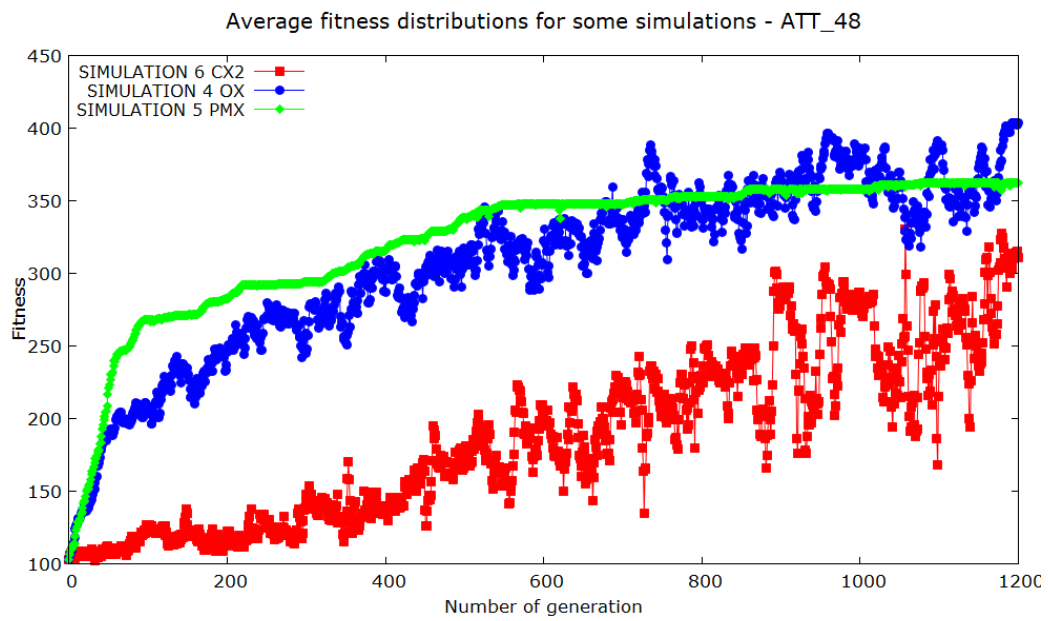


Figura 3: Distribuzioni della *fitness* media di tutti gli individui al variare della generazione, per la simulazione migliore, a confronto per i 3 operatori. Il comportamento medio di PMX è in linea con OX, ma quest'ultimo ha una evoluzione genuinamente con maggiore possibilità di *diversità*, che gli consente di avere individui d'*elite* con migliore adattamento.

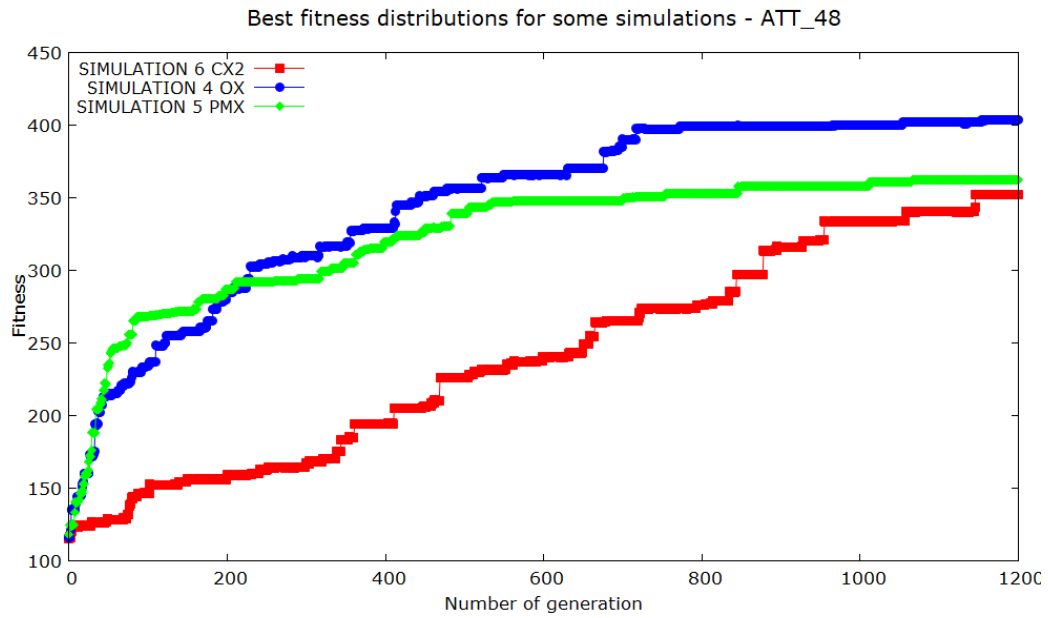


Figura 4: Distribuzioni della *fitness* del miglior individuo al variare della generazione, per la simulazione migliore, a confronto per i 3 operatori.

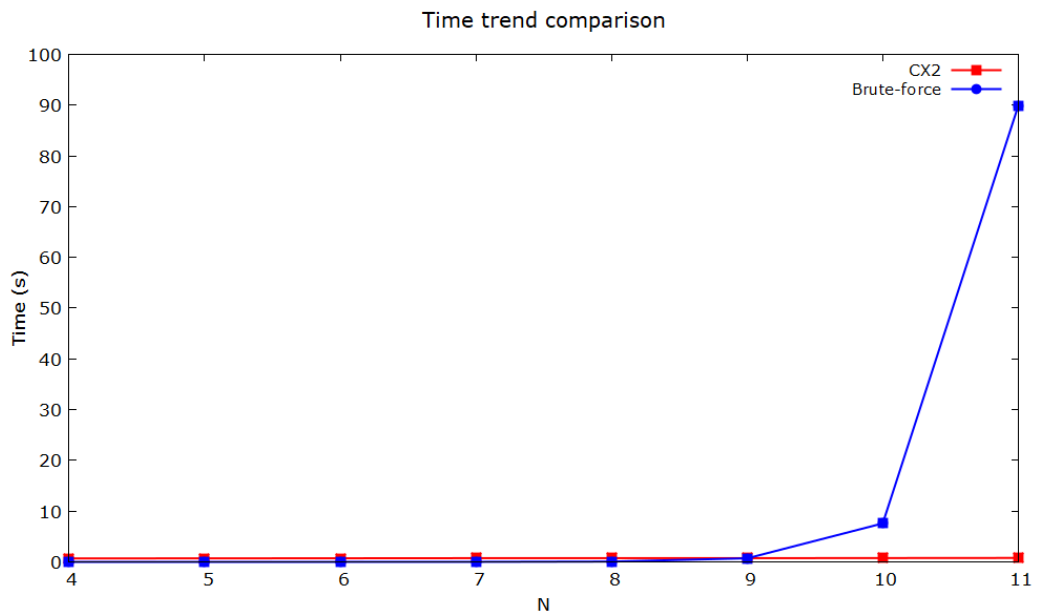


Figura 5: Andamento temporale, mediato su 10 configurazioni random, degli algoritmi genetico e *brute-force* a confronto.

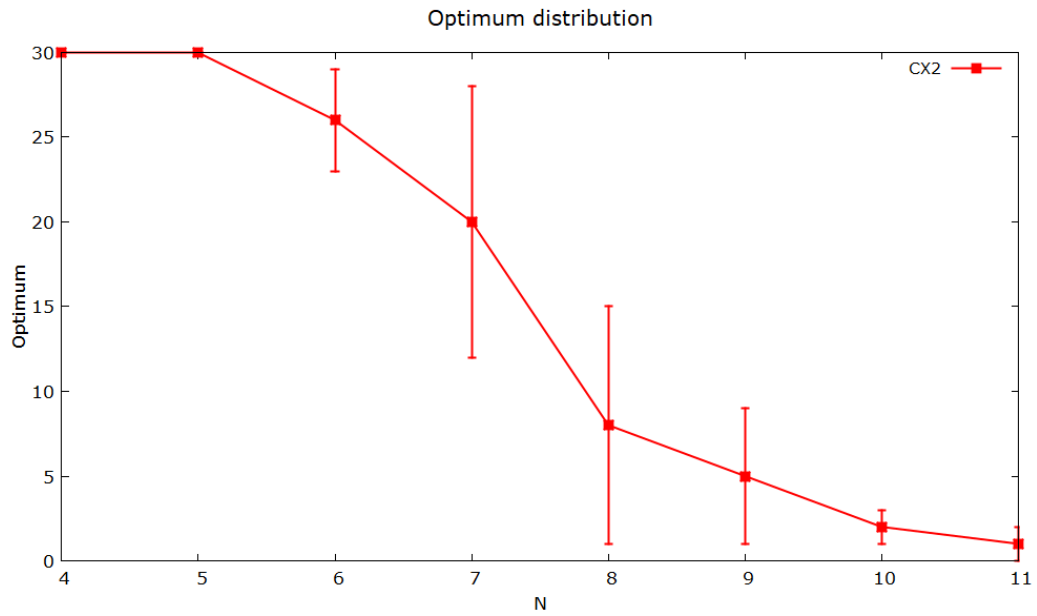


Figura 6: Distribuzione dell'*optimum*, mediato su 10 configurazioni random, dell'algoritmo genetico.

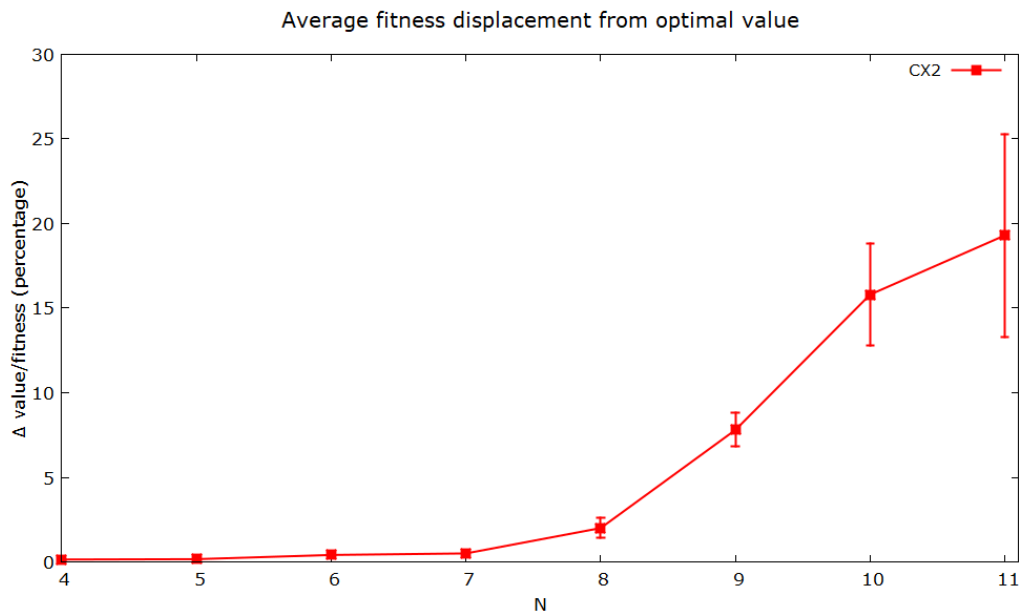


Figura 7: Andamento, mediato su 10 configurazioni, della differenza percentuale del valor medio della *fitness* dal valore ottimale.

| configurazione TSP | Valore ottimale | Risultato | PMX | OX | CX2 |
|---------------------|-----------------|-----------|---------|---------|---------|
| SEVEN ($N = 7$) | 159 | Migliore | 159 | 159 | 159 |
| | | Optimum | 14/30 | 20/30 | 23/30 |
| | | Media | 160.2 | 160 | 160.4 |
| P_01 ($N = 15$) | 291 | Migliore | 291 | 291 | 291 |
| | | Optimum | 2/30 | 23/30 | 10/30 |
| | | Media | 317.4 | 296.7 | 340.7 |
| GR_17 ($N = 17$) | 2085 | Migliore | 2085 | 2085 | 2085 |
| | | Optimum | 2/30 | 2/30 | 3/30 |
| | | Media | 2175.9 | 2112.6 | 2179.8 |
| FRI_26 ($N = 26$) | 937 | Migliore | 1020 | 937 | 970 |
| | | Optimum | 1/30 | 2/30 | 2/30 |
| | | Media | 1161.5 | 1011.2 | 1312.8 |
| ATT_48 ($N = 48$) | 33523 | Migliore | 42105 | 36068 | 45070 |
| | | Optimum | 1/30 | 1/30 | 1/30 |
| | | Media | 49536.8 | 37647.1 | 52313.4 |

Tabella 2: Risultati dell’algoritmo genetico per 3 operatori di *crossover* a confronto su diverse configurazioni del TSP.

Fig.5 mostra l’andamento temporale: come ci si aspettava, il metodo *brute-force* scala come $N!$, mentre il costo di GA dipende, in prima approssimazione, solo da N_{pop} e N_{gen} ed è infatti costante. L’accuratezza generale dell’algoritmo genetico è in 6, 7; mostriamo solo l’andamento della differenza della *fitness* media dal valore ottimale e non della migliore perché per tutti i problemi¹¹ il GA ha trovato la sequenza migliore.

Conclusioni

Come ci si aspettava, i GA sono efficaci nella ricerca del minimo per la classe dei TSP; per quanto l’algoritmo implementato sia stato in grado di trovare il valore ottimale di configurazioni anche a N *non basso*, il lavoro non è esaustivo. In particolare, si può indagare sulla possibilità di un diverso operatore di selezione in modo da avere maggiore pressione nella scelta delle

¹¹escluse due configurazioni per $N = 11$, dove infatti la dispersione è maggiore. È comunque possibile risolverle con il GA aumentando N_{gen} a 50.

sequenze genitore; un'idea potrebbe essere l'implementazione di pesi (che tengano conto della dispersione della generazione) nella *roulette wheel*.

Bibliografia

- [1] Fu C., Zhang L., Wang X., et al. (2018). *Solving TSP problem with improved genetic algorithm*. AIP Conference Proceedings 1967, 040057: <https://aip.scitation.org/doi/abs/10.1063/1.5039131>
- [2] Hussain A., Muhammad Y. S., Nauman Sajid M., Hussain, I., Mohamd Shoukry A., Gani S. (2017). *Genetic algorithm for Traveling Salesman Problem with Modified Cycle Crossover Operator*. Computational Intelligence and Neuroscience: <https://doi.org/10.1155/2017/7430125>
- [3] TSP test data: <https://people.sc.fsu.edu/~jburkardt/datasets/tsp/tsp.html>