### **1. Εισαγωγή**

Το Πρόβλημα του Περιπλανώμενου Πωλητή (Traveling Salesperson Problem - TSP) αποτελεί μία από τις πιο εντατικά μελετημένες προκλήσεις στον τομέα της συνδυαστικής βελτιστοποίησης, τόσο στην επιστήμη των υπολογιστών όσο και στην έρευνα επιχειρησιακών διαδικασιών. Στην ουσία, το πρόβλημα θέτει την εξής απλή ερώτηση: Δίνοντας μια λίστα πόλεων και τις αποστάσεις μεταξύ τους, ποια είναι η συντομότερη δυνατή διαδρομή που επισκέπτεται κάθε πόλη ακριβώς μία φορά και επιστρέφει στην αρχική πόλη; Παρά την απλή του διατύπωση, η υπολογιστική πολυπλοκότητα του TSP το καθιστά μια διαρκή πρόκληση και σημείο αναφοράς για την ανάπτυξη αλγορίθμων. Συγκεκριμένα, ο χώρος των εφικτών λύσεων του TSP αυξάνεται παραγοντικά με τον αριθμό των πόλεων (n), ακόμη και στην συμμετρική εκδοχή του προβλήματος, όπου απαιτείται η εξέταση (n−1)!/2​ πιθανών διαδρομών. Αυτή η παραγοντική αύξηση καθιστά την ακριβή επίλυση μέσω πλήρους εξάντλησης πρακτικά αδύνατη ακόμα και για σχετικά μικρούς αριθμούς πόλεων. Για να αποδώσουμε το μέγεθος του προβλήματος, στην συμμετρική μορφή του TSP, ο αριθμός των εφικτών διαδρομών για 10 πόλεις είναι 181.440, ενώ για 15 πόλεις αυξάνεται σε 43.589.145.600.

Μέθοδοι γραμμικού προγραμματισμού, όπως η προσέγγιση με cutting-plane και δυναμική αποκοπή υποδιαδρομών που υλοποιούμε στην παρούσα εργασία, προσφέρουν πιο αποδοτικά πλαίσια επίλυσης. Ωστόσο, ακόμα και αυτές οι προηγμένες μαθηματικές τεχνικές δεν ξεφεύγουν από τη βασική NP-hard φύση του προβλήματος. Ο χειρότερος χρόνος εκτέλεσης παραμένει εκθετικός, περιορίζοντας τη χρήση τους σε μεσαίου μεγέθους προβλήματα παρά τις δεκαετίες βελτιώσεων.

#### **1.2 Μια Προσέγγιση με Μηχανική Μάθηση**

Η παρούσα εργασία εξετάζει ένα εναλλακτικό παράδειγμα: Μπορούν τα νευρωνικά δίκτυα γράφων (Graph Neural Networks - GNNs) να μάθουν τα μοτίβα των βέλτιστων λύσεων του TSP από μικρά παραδείγματα και να γενικεύσουν αυτή τη γνώση σε μεγαλύτερα προβλήματα; Η προσέγγισή μας βασίζεται σε τρεις βασικές παρατηρήσεις:

* **Δομική Ομοιότητα:** Μικρά και μεγάλα παραδείγματα του TSP παρουσιάζουν κοινά τοπολογικά χαρακτηριστικά στις βέλτιστες λύσεις τους.
* **Τοπικά Μοτίβα:** Οι βέλτιστες διαδρομές συχνά εμφανίζουν αναγνωρίσιμα τοπικά μοτίβα επιλογής ακμών, τα οποία τα GNN μπορούν να μάθουν.
* **Ανοχή σε υποβέλτιστες λύσεις:** Αν και δεν εγγυώνται βέλτιστες λύσεις, οι νευρωνικές προσεγγίσεις μπορεί να προσφέρουν κοντινές στη βέλτιστη λύσεις με σημαντικά μειωμένο χρόνο υπολογισμού.

Αυτό υλοποιείται μέσω ενός υβριδικού πλαισίου όπου:

* Ένα GNN μαθαίνει να προβλέπει τις πιθανότητες επιλογής ακμών από βέλτιστες λύσεις μικρών παραδειγμάτων (20-50 κόμβοι).
* Οι προβλέψεις αυτές καθοδηγούν έναν αλγόριθμο beam search για την κατασκευή εφικτών διαδρομών.

#### **1.3 Συνεισφορές**

Η εργασία αυτή προσφέρει τρεις βασικές συνεισφορές:

* **Υλοποίηση:** Ανάπτυξη τόσο παραδοσιακών λύσεων γραμμικού προγραμματισμού όσο και νέων GNN-based λύσεων με ανοικτή πρόσβαση στον κώδικα.
* **Υβριδική Μεθοδολογία:** Επίδειξη του πώς η μηχανική μάθηση μπορεί να συμπληρώσει τον μαθηματικό προγραμματισμό στην επίλυση συνδυαστικών προβλημάτων.
* **Εμπειρική Επιβεβαίωση:** Συστηματική αξιολόγηση που αποδεικνύει ότι τα GNN μπορούν να συλλάβουν ουσιαστικά μοτίβα λύσεων, θέτοντας θεμέλια για μελλοντική έρευνα.

**2. Πρόβλημα Περιπλανώμενου Πωλητή**

**2.1 Διατύπωση του Προβλήματος**

Το Πρόβλημα του Περιπλανώμενου Πωλητή αποτελεί ένα κλασικό και ευρέως μελετημένο πρόβλημα ακέραιου προγραμματισμού και μπορεί να διατυπωθεί ως εξής: Δίνεται ένα σύνολο πόλεων και οι αποστάσεις μεταξύ κάθε πιθανού ζεύγους αυτών. Στόχος είναι να βρεθεί η συντομότερη διαδρομή που:

* επισκέπτεται κάθε πόλη ακριβώς μία φορά (1)
* αποτελεί έναν ενιαίο κύκλο που περικλείει όλες τις πόλεις (2)
* και ελαχιστοποιεί το συνολικό μήκος ή κόστος της διαδρομής (3)

**2.2 Προσεγγίσεις Μαθηματικής Μοντελοποίησης**

Στη βιβλιογραφία έχουν αναπτυχθεί διάφορες μαθηματικές διατυπώσεις για τη μοντελοποίησης του Προβλήματος του Πλανόδιου Πωλητή (TSP), με δύο από τις πιο διαδεδομένες να είναι εκείνες των **Miller–Tucker–Zemlin (MTZ)** και **Dantzig–Fulkerson–Johnson (DFJ)**. Αμφότερες οι προσεγγίσεις ξεκινούν εισάγοντας **δυαδικές μεταβλητές** xij οι οποίες λαμβάνουν τιμή 1 αν η ακμή από την πόλη i προς την πόλη j περιλαμβάνεται στη λύση, και 0 διαφορετικά. Με αυτόν τον τρόπο, το πρόβλημα μετασχηματίζεται σε έναν ακέραιο γραμμικό προγραμματισμό, όπου στόχος είναι η ελαχιστοποίηση του συνολικού κόστους των επιλεγμένων διαδρομών.

Ωστόσο, παρά τον κοινό αυτό κορμό, οι δύο μοντελοποιήσεις διαφέρουν σημαντικά στον τρόπο με τον οποίο διασφαλίζουν την **εγκυρότητα της δεύτερης συνθήκης** του προβλήματος, δηλαδή την ύπαρξη ενός και μόνο ενιαίου κύκλου που να περιλαμβάνει όλες τις πόλεις.

Σε αυτό το σημείο είναι κρίσιμο να αποσαφηνιστεί ο όρος **«επιμέρους διαδρομές»** , καθώς πρόκειται να χρησιμοποιηθεί συστηματικά στη συνέχεια της εργασίας. Ως επιμέρους διαδρομές ορίζονται **ανεξάρτητοι κλειστοί κύκλοι** που ενδέχεται να προκύψουν σε μία λύση. Αυτοί οι κύκλοι μπορεί να ικανοποιούν τη **συνθήκη (1)** —δηλαδή κάθε πόλη να επισκέπτεται μία μόνο φορά— αλλά **παραβιάζουν τη συνθήκη (2)**, αφού το σύνολο των ακμών δεν σχηματίζει ένα συνεκτικό μονοπάτι που διατρέχει όλες τις πόλεις. Στο πλαίσιο της θεωρίας γράφων, η παρουσία επιμέρους διαδρομών συνεπάγεται ότι η επιλεγμένη υποδομή ακμών αντιστοιχεί σε **μη συνεκτικό γράφο**.

Η **προσέγγιση MTZ** επιχειρεί να εξαλείψει τις επιμέρους διαδρομές εισάγοντας **βοηθητικές μεταβλητές** ui και uj, οι οποίες εκφράζουν τις «θέσεις» των πόλεων i και j εντός της συνολικής διαδρομής. Μεταξύ αυτών των μεταβλητών θέσεων επιβάλλεται ο ανισοτικός περιορισμός της μορφής:

ui - uj+1 ≤ (n -1) (1 – xij) ∀ i ε [2, n-1] και ι ≠j

οι οποίες διασφαλίζουν την αδυναμία σχηματισμού κυκλικών ακολουθιών όπως ui<uj<⋯<uι, οι οποίες θα οδηγούσαν σε επιμέρους διαδρομές. Οι τιμές των περιορίζονται εντός ενός καθορισμένου εύρους, εξασφαλίζοντας έτσι ότι δεν μπορεί να σχηματιστεί κύκλος σε υποσύνολο πόλεων S.

Αντίθετα, η **προσέγγιση DFJ** βασίζεται περισσότερο στη **συνδεσιμότητα** του γράφου. Σε αυτήν, η ύπαρξη ενός ενιαίου κύκλου που διατρέχει όλες τις πόλεις αποτυπώνεται στο γεγονός ότι το πλήθος των επιλεγμένων ακμών πρέπει να είναι ίσο με το πλήθος των πόλεων. Η απουσία συνδεσιμότητας εντοπίζεται μέσω της κατασκευής **περιορισμών κοπής** (*cutting planes*), οι οποίοι στην πράξη αποτρέπουν οποιοδήποτε κυκλικό μονοπάτι μήκους μικρότερου από τον αριθμό των πόλεων

Συνοψίζοντας, και οι δύο προσεγγίσεις επιδιώκουν τη δημιουργία ενός μοναδικού, συνεκτικού κύκλου. Η μέθοδος MTZ επιτυγχάνει αυτόν τον στόχο με τη χρήση επιπλέον μεταβλητών και περιορισμών τύπου θέσης, ενώ η μέθοδος DFJ υιοθετεί μια πιο δυναμική προσέγγιση, εξαλείφοντας τις ανεπιθύμητες λύσεις με βάση τη δομή του γράφου. Οι διαφορές αυτές έχουν σημαντικές επιπτώσεις στην αποδοτικότητα και την πολυπλοκότητα του μοντέλου, όπως θα παρουσιαστεί αναλυτικότερα στη συνέχεια της εργασίας.

**2.2.1** **Μαθηματική Διατύπωση του Μοντέλου MTZ**

Μία από τις πρώτες και πιο κλασικές μαθηματικές διατυπώσεις του προβλήματος του Πλανόδιου Πωλητή (TSP) προτάθηκε από τους Miller, Tucker και Zemlin (γνωστή ως **MTZ**). Η συγκεκριμένη προσέγγιση βασίζεται στην ιδέα ότι μπορούμε να περιγράψουμε το πρόβλημα μέσω ενός μικρού αριθμού γραμμικών περιορισμών και δυαδικών μεταβλητών, με σκοπό να αποκλείσουμε τους λεγόμενους υποκύκλους χωρίς να χρειαστεί να τους καταγράψουμε ρητά.

Ας θεωρήσουμε ότι έχουμε ένα πλήρως συνδεδεμένο γράφημα G = (V,E) όπου κάθε κόμβος i ∈ V αντιπροσωπεύει μία πόλη και κάθε ακμή (i,j) ∈ E έχει ένα αντίστοιχο κόστος μετακίνησης cij. Ο στόχος είναι να επισκεφθούμε κάθε πόλη ακριβώς μία φορά και να επιστρέψουμε στο σημείο εκκίνησης, ελαχιστοποιώντας το συνολικό κόστος.

Η διατύπωση MTZ χρησιμοποιεί τις εξής μεταβλητές:

* xij ∈ {0,1): είναι 1 αν ο πωλητής μετακινηθεί από την πόλη i στην πόλη j, αλλιώς 0.
* ui ∈ ℜ: βοηθητικές μεταβλητές που εισάγονται για την εξάλειψη των **επιμέρους κύκλων** (μόνο για κόμβους i=1,…,n).

Η διατύπωση του προβλήματος γίνεται ως εξής:

**Στόχος:**

(1)

**υπό τους περιορισμούς:**

(2)

(3)

(4)

Οι περιορισμοί **(2)** και **(3)** αποτελούνται από σύνολο n περιορισμών ο καθένας και επιβάλλουν τα εξής: κάθε πόλη να επισκέπτεται ακριβώς μία φορά ως πόλη αναχώρησης και μία φορά ως πόλη άφιξης, αντίστοιχα. Δηλαδή, από κάθε πόλη φεύγει ακριβώς μία διαδρομή και προς κάθε πόλη καταλήγει ακριβώς μία διαδρομή.

Ο τελευταίος περιορισμός **(4)** έχει ως στόχο να αποτρέψει την ύπαρξη επιμέρους διαδρομών — δηλαδή, κύκλων που δεν περιλαμβάνουν όλες τις πόλεις. Γι' αυτόν τον λόγο, οι δείκτες σε αυτόν τον περιορισμό ξεκινούν από το 2 και φτάνουν έως το n−1.

**Αναλυτικότερα:**

* Η πόλη 1 θεωρείται η αρχική πόλη εκκίνησης και δεν χρειάζεται να περιοριστεί εδώ.
* Οι βοηθητικές μεταβλητές ui​ ορίζουν τη θέση επίσκεψης κάθε πόλης στη διαδρομή.
* Με αυτόν τον περιορισμό διασφαλίζουμε ότι η σειρά των επισκέψεων δεν σχηματίζει **επιμέρους κύκλους**, επιτρέποντας όμως την επιστροφή από την τελευταία πόλη πίσω στην αρχική.

Για παράδειγμα, αν έχουμε 4 πόλεις, ο περιορισμός αυτός επιτρέπει μια διαδρομή της μορφής 1→2→3→4→1, δηλαδή επιστροφή από την τελευταία πόλη στην πρώτη, χωρίς να επιτρέψει κύκλους όπως 2→3→2 που δεν περνούν από όλες τις πόλεις.

**2.2.2 Μαθηματική Διατύπωση του Μοντέλου DFJ**

Η προσέγγιση του Dantzig–Fulkerson–Johnson (DFJ) αποτελεί μία από τις κλασικές και ακριβείς μαθηματικές διατυπώσεις του προβλήματος του Πλανόδιου Πωλητή (TSP). Όπως και στην περίπτωση της MTZ, το πλήρως συνδεδεμένο γράφημα G=(V,E) έχει κόμβους i ∈ V που αντιστοιχούν σε πόλεις, και ακμές (i, j) ∈ E με αντίστοιχο κόστος μετακίνησης cij​.

Οι δυαδικές μεταβλητές ορίζονται ως εξής:

* xij ∈ {0,1): είναι 1 αν ο πωλητής μετακινηθεί από την πόλη i στην πόλη j, αλλιώς 0.

Το πρόβλημα διατυπώνεται ως εξής:

(1)

**Υπό τους περιορισμούς:**

Κάθε πόλη πρέπει να επισκεφθεί ακριβώς μία φορά ως πόλη άφιξης

(2)

Κάθε πόλη πρέπει να επισκεφθεί ακριβώς μία φορά ως πόλη αναχώρησης

(3)

Αποτροπή επιμέρους κύκλων

(4)

Η διαφορά με το μοντέλο MTZ είναι ο τρόπος αντιμετώπισης των επιμέρους κύκλων, ενώ η MTZ χρησιμοποιεί βοηθητικές μεταβλητές για τη σειρά επίσκεψης, το μοντέλο DFJ τους αποτρέπει ρητά επιβάλλοντας το μήκος του κύκλου του αντιπροσωπεύει την βέλτιστη λύση να ισούται με τον αριθμό των πόλεων που πρέπει να επισκεφτεί ο πωλητής.