

πανεπιστημιο πειραιωσ – τμημα πληροφορικησ

Πρόγραμμα Μεταπτυχιακών Σπουδών

«Κυβερνοασφάλεια και Επιστήμη Δεδομένων»

Μεταπτυχιακή Διατριβή

|  |  |
| --- | --- |
| Τίτλος Διατριβής | Νευρωνικά Δίκτυα Γράφων για την επίλυση του Προβλήματος του Περιπλανώμενου Πωλητή: Συνδυασμός Μαθηματικού Προγραμματισμού και Μηχανικής Μάθησης  Graph Neural Networks for Solving the Traveling Salesman Problem: Combining Mathematical Programming and Machine Learning |
| Ονοματεπώνυμο Φοιτητή | Ιωάννης Μούγιος |
| Πατρώνυμο | Παντελεήμων |
| Αριθμός Μητρώου | mpked2327 |
| Επιβλέπων | Όνομα Επώνυμο, Βαθμίδα |

|  |  |
| --- | --- |
| Ημερομηνία Παράδοσης | Μήνας Έτος |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Τριμελής Εξεταστική Επιτροπή | | |
| Κορωνάκος Γρηγόριος  Επίκουρος Καθηγητής | Διονύσιος Σωτηρόπουλος  Αναπληρωτής Καθηγητής | Δημήτρης Αποστόλου  Καθηγητής |

### **Πίνακας Περιεχομένων**

### **1 Εισαγωγή**

1.1 Το Πρόβλημα του Περιπλανώμενου Πωλητή (TSP)  
1.2 Μια Προσέγγιση με Μηχανική Μάθηση  
1.3 Συνεισφορές

### **2 Επίλυση του TSP με Γραμμικό Προγραμματισμό**

2.1 Προσεγγίσεις Μαθηματικής Μοντελοποίησης

2.1.1 Μαθηματική Διατύπωση του Μοντέλου Miller, Tucker και Zemlin

2.1.2 Μαθηματική Διατύπωση του Μοντέλου Dantzig–Fulkerson–Johnson

2.2 Ακέραιος Γραμμικός Προγραμματισμός (ILP)

2.3 Ανασκόπηση Μεθόδων Αποκατάστασης Ακεραιότητας

2.3.1 Μέθοδος της Εξάντλησης και υπολογιστικής πολυπλοκότητας

2.3.2 Διακλάδωση και Φραγμός (Branch and Bound)

2.3.3 Τέμνοντα Επίπεδα (Cutting Planes)

**3 Εισαγωγή στα Νευρωνικά Δίκτυα Γράφων**

3.1 Βασικές Αρχές Νευρωνικών Δικτύων

3.2 Θεμελιώδης Περιορισμοί και Γενίκευση της Συνέλιξης

3.2.1 Κίνητρο για Γενίκευση της Συνέλιξης

3.2.2 Συνέλιξη σε μη Ευκλείδειες δομές

3.2.3 Δίκτυα Μηχανισμών Προσοχής

3.3 Κατηγορίες Εκπαίδευσης Νευρωνικών Δικτύων Γράφων

3.3.1 Επιτηρούμενη και Ημι-επιτηρούμενη Μάθηση σε Γράφους

3.3.2 Επαγωγική και Μεταγωγική Μάθηση σε Γράφους

3.4 Μοντελοποίηση του Προβλήματος του Πλανόδιου Πωλητή με GNN

3.4.1 Αναπαράσταση του Συμμετρικού TSP ως Μη Κατευθυνόμενος Γράφος

3.4.2 Νευρωνικό Δίκτυο για την Εκτίμηση της Λύσης του TSP

### **4 Μεθοδολογία – Πειραματισμός – Αξιολόγηση**

4.1 Δημιουργία Βέλτιστων Λύσεων με Ακέραιο Γραμμικό Προγραμματισμό

4.2 Παραγωγή συνόλων δεδομένων

4.3 Εκπαίδευση Νευρωνικού Δικτύου και Παραμετροποίηση

4.4 Αξιολόγηση απόδοσης στο σύνολο ελέγχου

4.5 Συμπεράσματα

## **Περίληψη**

Η παρούσα διατριβή εξετάζει τη χρήση Νευρωνικών Δικτύων Γράφων (Graph Neural Networks - GNNs) για την επίλυση του Κλασικού Προβλήματος του Πλανόδιου Πωλητή (Traveling Salesman Problem, TSP). Το TSP αποτελεί ένα από τα σημαντικότερα προβλήματα συνδυαστικής βελτιστοποίησης και έχει χαρακτηριστεί ως NP-πλήρες. Για την παραγωγή βέλτιστων λύσεων αξιοποιήθηκε ένας λύτης Γραμμικού Προγραμματισμού (Linear Programming, LP), με σκοπό τη δημιουργία συνόλων δεδομένων υψηλής ποιότητας. Τα δεδομένα αυτά χρησιμοποιήθηκαν για την εκπαίδευση και αξιολόγηση μοντέλων GNN, με στόχο την πρόβλεψη των ακμών που συνθέτουν τη βέλτιστη διαδρομή σε πλήρως συνδεδεμένους γράφους.

Η μεθοδολογία που αναπτύχθηκε συνδυάζει κλασικές τεχνικές βελτιστοποίησης με σύγχρονες προσεγγίσεις μηχανικής μάθησης, αναδεικνύοντας τον ρόλο των GNNs στη μοντελοποίηση δομών γραφημάτων και στην επίλυση προβλημάτων συνδυαστικής φύσης. Τα πειραματικά αποτελέσματα καταδεικνύουν ότι τα GNN μοντέλα μπορούν να μάθουν αποτελεσματικά τα μοτίβα που διέπουν τις βέλτιστες λύσεις και να γενικεύσουν σε νέα παραδείγματα, γεγονός που επιβεβαιώνει τη δυναμική τους για την αντιμετώπιση πολύπλοκων προβλημάτων βελτιστοποίησης.

## **Abstract**

This dissertation investigates the use of Graph Neural Networks (GNNs) for solving the classical Traveling Salesman Problem (TSP). The TSP is a cornerstone problem in combinatorial optimization and is classified as NP-complete. In order to obtain optimal solutions, a Linear Programming (LP) solver was employed to generate high-quality datasets. These datasets were then used to train and evaluate GNN models, aiming to predict the edges that constitute the optimal tour in fully connected graphs.

The proposed methodology integrates classical optimization techniques with modern machine learning approaches, highlighting the ability of GNNs to model graph structures and address combinatorial problems. Experimental results demonstrate that GNN models can effectively learn the patterns underlying optimal solutions and generalize to unseen problem instances, thereby confirming their potential as a powerful tool for solving complex optimization challenges.

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 , ακόμη και στην συμμετρική εκδοχή του προβλήματος, όπου απαιτείται η εξέταση ​ πιθανών διαδρομών. Με τον χαρακτηρισμό συμμετρική εκδοχή ενός TSP δεχόμαστε την υπόθεση ότι το κόστος μετάβασης από το σημείο Α στο σημείο Β ισούται με το κόστος μετάβασης από το σημείο Β στο σημείο Α. Μολονότι η υπόθεση αυτή συνεπάγεται μείωση των μεταβλητών απόφασης στο μισό, ο χώρος των εφικτών λύσεων συνεχίζει να αυξάνεται παραγοντικά ως προς τον αριθμό των πόλεων, καθιστώντας 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 διαδρομών 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. Η κλασική διατύπωση Dantzig–Fulkerson–Johnson (DFJ) παρουσιάζει χειρότερη χρονική πολυπλοκότητα της τάξης

και χειρότερη χωρική πολυπλοκότητα , όπου n είναι ο αριθμός των πόλεων και

οι ακμές του πλήρους γράφου. Οι εκθετικές αυτές απαιτήσεις καθιστούν την πρακτική εφαρμογή της μεθόδου περιορισμένη σε μεσαίου μεγέθους προβλήματα, παρά τις δεκαετίες βελτιστοποιήσεων [Algorithm-Wiki, 2024].

1.1 Μια Προσέγγιση με Μηχανική Μάθηση

Η παρούσα εργασία εξετάζει αν τα νευρωνικά δίκτυα γράφων (Graph Neural Networks - GNNs) μπορούν να μάθουν τα μοτίβα των βέλτιστων λύσεων του TSP από μικρά παραδείγματα και να γενικεύσουν αυτή τη γνώση σε μεγαλύτερα προβλήματα. Η προσέγγιση μας βασίζεται σε τρείς 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.

1.2 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 Επίλυση του TSP με Γραμμικό Προγραμματισμό

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)

**2.1** Προσεγγίσεις **Μαθηματικής Μοντελοποίησης**

Στη βιβλιογραφία έχουν αναπτυχθεί διάφορες μαθηματικές διατυπώσεις για τη μοντελοποίηση του Προβλήματος του Πλανόδιου Πωλητή (TSP), με δύο από τις πιο διαδεδομένες να είναι εκείνες των Miller–Tucker–Zemlin (MTZ) (Miller, Tucker & Zemlin, 1960) και Dantzig–Fulkerson–Johnson (DFJ) (Dantzig, Fulkerson & Johnson, 1954). Αμφότερες οι προσεγγίσεις ξεκινούν εισάγοντας δυαδικές μεταβλητές ​ 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 ένα πρόβλημα ακέραιου γραμμικού προγραμματισμού, 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 κύκλοι» , καθώς πρόκειται να χρησιμοποιηθεί συστηματικά στη συνέχεια της εργασίας. Ως επιμέρους κύκλοι 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 τησυνθήκη (2), αφού το σύνολο των ακμών δεν σχηματίζει ένα συνεκτικό μονοπάτι που διατρέχει όλες τις πόλεις. Στο πλαίσιο της θεωρίας γράφων, η παρουσία επιμέρους κύκλων 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:

οι οποίες διασφαλίζουν την αδυναμία σχηματισμού κυκλικών ακολουθιών όπως ui<uj<⋯<uι, οι οποίες θα οδηγούσαν σε επιμέρους κύκλους. Οι τιμές των ui 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 αντιμετωπίζεται μέσω της κατασκευής περιορισμών-επιπέδων που περιορίζουν τον χώρο των εφικτών λύσεων (*cutting planes*), αποτρέποντας 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 το μήκος του κυκλικού μονοπατιού που αντιπροσωπεύει την λύση. Οι διαφορές αυτές έχουν σημαντικές επιπτώσεις στην αποδοτικότητα και την πολυπλοκότητα του μοντέλου, όπως θα παρουσιαστεί αναλυτικότερα στη συνέχεια της εργασίας.

2.1.1 Μαθηματική Διατύπωση του Μοντέλου Miller, Tucker και Zemlin

Μία από τις πρώτες και πιο κλασικές μαθηματικές διατυπώσεις του προβλήματος του Πλανόδιου Πωλητή (TSP) προτάθηκε από τους Miller, Tucker και Zemlin (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=2,…, n).

Η διατύπωση του προβλήματος είναι η ακόλουθη:

(1.1)

υπό τους περιορισμούς:

(1.2)

(1.3)

(1.4)

(1.5)

Οι περιορισμοί (1.2) και **(**1.3) 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 (1.4) 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 επιλέγεται ως αρχική πόλη εκκίνησης της διαδρομής. Δεν χρειάζεται να συμμετέχει στους περιορισμούς υποκύκλων (1.4), καθώς οι υπόλοιπες πόλεις 2,…,n καθορίζουν τη σειρά επισκέψεων και η πόλη 1 θα αποτελέσει τη φυσική επιστροφή στο τέλος της διαδρομής.
* 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.

2.1.2 Μαθηματική Διατύπωση του Μοντέλου Dantzig–Fulkerson–Johnson

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:

(2.1)

Υπό τους περιορισμούς:

(2.2)

(2.3)

(2.4)

Οι περιορισμοί (2.2) και (2.3) διασφαλίζουν από κοινού ότι κάθε κόμβος έχει ακριβώς μία εισερχόμενη και μία εξερχόμενη ακμή, ενώ ο περιορισμός (2.4) αποτρέπει τη δημιουργία επιμέρους διαδρομών(subtours) μέσω της απαρίθμησης όλων των πιθανών υποσυνόλων κόμβων που θα μπορούσαν να σχηματίσουν υποκύκλους.

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 που αντιπροσωπεύει την βέλτιστη λύση να ισούται με τον αριθμό των πόλεων που πρέπει να επισκεφτεί ο πωλητής. Ωστόσο, ακόμη και σε αυτή την προσέγγιση, ο αριθμός των περιορισμών που απαιτούνται για την αποτροπή όλων των επιμέρους κύκλων αυξάνεται εκθετικά με τον αριθμό των πόλεων. Συγκεκριμένα, για ένα πρόβλημα με n πόλεις, θα πρέπει να εισαχθούν περιορισμοί για όλους τους δυνατούς κύκλους που περιλαμβάνουν από 2 έως n−1 πόλεις, δηλαδή για κάθε υποσύνολο κόμβων που ενδέχεται να σχηματίσει ανεξάρτητο κύκλο. Για παράδειγμα, σε ένα πρόβλημα με 5 πόλεις, απαιτείται η αποτροπή όλων των δυνατών κύκλων με 2, 3 και 4 κόμβους, γεγονός που οδηγεί σε έναν εκθετικά αυξανόμενο αριθμό περιορισμών καθώς μεγαλώνει το πλήθος των πόλεων.

Για την παρούσα εργασία, ο επιλυτής του προβλήματος TSP που υλοποιήθηκε σε γλώσσα Python πραγματοποιήθηκε με χρήση τεχνικών άμεσης ανίχνευσης επιμέρους κύκλων και προσθήκης των αντίστοιχων περιορισμών. Το συγκεκριμένο μοντέλο χρησιμοποιήθηκε για την παραγωγή βέλτιστων λύσεων, οι οποίες αποτέλεσαν τη βάση εκπαίδευσης του Νευρωνικού Δικτύου Γράφων(GNN). Η λεπτομέρειες αναφορικά με την υλοποίηση του επιλυτή καθώς η αρχιτεκτονική και τα χαρακτηριστικά του νευρωνικού μοντέλου θα αναλυθούν σε επόμενο τμήμα της εργασίας.

2.2 Ακέραιος Γραμμικός Προγραμματισμός

Ο Ακέραιος Γραμμικός Προγραμματισμός (Integer Linear Programming - ILP) αποτελεί μια υποκατηγορία του γραμμικού προγραμματισμού, στην οποία επιλύεται ένα πρόβλημα βελτιστοποίησης με γραμμική αντικειμενική συνάρτηση και γραμμικούς περιορισμούς, με τη διαφορά ότι ορισμένες ή όλες οι μεταβλητές απόφασης πρέπει να λάβουν ακέραιες τιμές.

Αν όλες οι μεταβλητές είναι ακέραιες, τότε το πρόβλημα χαρακτηρίζεται ως αμιγώς ακέραιοςγραμμικός προγραμματισμός (Pure ILP ή PILP), ενώ αν κάποιες μεταβλητές επιτρέπεται να λάβουν συνεχείς τιμές, τότε πρόκειται για μικτό ακέραιο γραμμικό προγραμματισμό (Mixed-Integer Linear Programming - MILP).

Μια ειδική περίπτωση του ILP είναι ο δυαδικός ακέραιος προγραμματισμός, κατά τον οποίο οι μεταβλητές μπορούν να λάβουν μόνο τις τιμές 0 ή 1. Η μορφή αυτή είναι ιδιαιτέρως χρήσιμη σε προβλήματα όπου απαιτούνται δυαδικές αποφάσεις, όπως επιλογή/απόρριψη, ενεργοποίηση/απενεργοποίηση, ή ύπαρξη/απουσία σχέσης μεταξύ οντοτήτων. Το Πρόβλημα του Πλανόδιου Πωλητή (TSP), το οποίο αποτελεί το αντικείμενο της παρούσας εργασίας, ανήκει ακριβώς σε αυτήν την κατηγορία.

Η γενική μαθηματική διατύπωση ενός ILP προβλήματος είναι η εξής:

Υπό τους περιορισμούς:

Σε περίπτωση δυαδικού ILP, ισχύει:

Η κύρια πρόκληση του ακέραιου γραμμικού προγραμματισμού έγκειται στο ότι ο περιορισμός της ακεραιότητας κάποιων μεταβλητών απόφασης καθιστά το σύνολο εφικτών λύσεων μη κυρτό. Στον κλασικό γραμμικό προγραμματισμό, οι λύσεις βρίσκονται σε ένα κυρτό πολύεδρο – δηλαδή, οποιοδήποτε σημείο μεταξύ δύο εφικτών λύσεων είναι επίσης εφικτό. Ωστόσο, όταν απαιτείται οι λύσεις να είναι ακέραιες, το σύνολο εφικτών λύσεων αποτελείται από διακριτά σημεία, γεγονός που αναιρεί την ιδιότητα της κυρτότητας.

Πρακτικά, αυτό σημαίνει ότι αλγόριθμοι όπως ο Simplex ή οι μέθοδοιεσωτερικούσημείου (Interior Point Methods), παρότι επιλύουν αποδοτικά προβλήματα γραμμικού προγραμματισμού, δεν εγγυώνται ότι η λύση τους θα ανήκει στο σύνολο των εφικτών λύσεων του αρχικού προβλήματος ILP. Ο λόγος είναι ότι το αποτέλεσμα αυτών των μεθόδων ενδέχεται να είναι μερικώς ή πλήρως μηακέραιο, καθώς επιλύουν το συνεχές χαλαρωμένο πρόβλημα και όχι το διακριτό.

Η τυπική διαδικασία επίλυσης ενός ILP προβλήματος ακολουθεί επομένως δύο στάδια:

1. Χαλάρωση (Relaxation): Επίλυση της συνεχούς εκδοχής του προβλήματος (LP Relaxation), όπου οι περιορισμοί ακεραιότητας αγνοούνται. Το πρόβλημα επιλύεται μέσω καθιερωμένων αλγορίθμων γραμμικού προγραμματισμού (π.χ. Simplex, Interior Point), και η βέλτιστη τιμή του παρέχει ένα φράγμα (κάτω φράγμα σε προβλήματα ελαχιστοποίησης ή άνω φράγμα σε προβλήματα μεγιστοποίησης) για το αρχικό ακέραιο πρόβλημα.
2. Αποκατάσταση της Ακεραιότητας (Restoring Integrality): Εφόσον η λύση του LP Relaxation δεν ικανοποιεί τους ακέραιους περιορισμούς, απαιτείται περαιτέρω διαδικασία ώστε να εντοπιστεί η βέλτιστη λύση εντός του συνόλου των ακέραιων εφικτών σημείων.

έστω το γενικό πρόβλημα Ακέραιου Γραμμικού Προγραμματισμού (ILP):

Ορίζεται το πολύεδρο εφικτών λύσεων του LP Relaxation:

Το σύνολο των ακέραιων εφικτών λύσεων είναι:

*X =* P ∩

H κυρτή θήκη των ακέραιων λύσεων είναι:

Px = conv(X)

Τότε ισχύει:

X ⊆ Px​ ⊆ P

και για τη βέλτιστη τιμή ενός προβλήματος ακέραιου προγραμματισμού:

Αυτό σημαίνει ότι το LP Relaxation παρέχει:

* ένα κάτω φράγμα (σε προβλήματα ελαχιστοποίησης), και
* μία καλή προσέγγιση της γεωμετρίας του συνόλου των ακέραιων λύσεων.

Τα παραπάνω αποτελούν αναγκαία στοιχεία για όλες τις σύγχρονες μεθόδους αποκατάστασης της ακεραιότητας. Είτε πρόκειται για δέντρα διακλάδωσης και φραγμών (Branch and Bound) είτε για τέμνοντα επίπεδα (Cutting Planes), οι μέθοδοι αυτές βασίζονται στα αποτελέσματα του LP Relaxation τόσο για την παραγωγή φραγμάτων όσο και για την παραγωγή πρόσθετων περιορισμών ή την επιλογή υπό-προβλημάτων.

2.3 Ανασκόπηση Μεθόδων Αποκατάστασης Ακεραιότητας

Παρόλο που το βήμα της αποκατάστασης της ακεραιότητας είναι ένα φαινομενικά απλό βήμα, στην πραγματικότητα αποτελεί κρίσιμο και πολύπλοκο στάδιο, καθώς μετατρέπει προβλήματα που αρχικά μπορεί να έχουν πολυωνυμική χρονική πολυπλοκότητα σε NP-hard προβλήματα. Για το λόγο αυτό, η εύρεση αποδοτικών μεθόδων για την αποκατάσταση της ακεραιότητας είναι θεμελιώδης για την πρακτική επίλυση προβλημάτων Ακέραιου Γραμμικού Προγραμματισμού.

2.3.1 Μέθοδος της Εξάντλησης και υπολογιστικής πολυπλοκότητας

Η πλέον άμεση —και θεωρητικά ακριβής— προσέγγιση για την επίλυση ενός προβλήματος Ακέραιου Γραμμικού Προγραμματισμού (ILP) είναι η πλήρης απαρίθμηση όλων των δυνατών ακέραιων λύσεων και η επιλογή της βέλτιστης μεταξύ αυτών. Ωστόσο, η μέθοδος αυτή καθίσταται υπολογιστικά μη εφαρμόσιμη στην πράξη, εξαιτίας της παραγοντικής αύξησης του χώρου των εφικτών λύσεων. Η υπολογιστική πολυπλοκότητα είναι συνάρτηση του πλήθος των τιμών που μπορεί να λάβει κάθε ακέραια μεταβλητή, αλλά κυρίως από το πλήθος των μεταβλητών που υπόκεινται σε ακέραιο περιορισμό. Αναλυτικότερα αν ένα πρόβλημα ακέραιου προγραμματισμού έχει:

* n ακέραιες μεταβλητές
* και κάθε μεταβλητή xι​ μπορεί να πάρει κι​ διακριτές τιμές

Το πλήθος των λύσεων είναι:

Ακόμη και σε προβλήματα δυαδικού προγραμματισμού, όπου κάθε μεταβλητή μπορεί να λάβει μόνο τις τιμές 0 ή 1, το πλήθος των δυνατών λύσεων αυξάνεται ραγδαία με τον αριθμό των ακέραιων μεταβλητών. Για παράδειγμα, σε ένα συμμετρικό TSP με n πόλεις, το πλήθος των πιθανών διατάξεων είναι (n−1)!/2, αριθμός που καθιστά την εξαντλητική απαρίθμηση απαγορευτική ήδη για n > 15. Για τον λόγο αυτό, έχουν αναπτυχθεί αποδοτικότερες μέθοδοι αποκατάστασης της ακεραιότητας, οι οποίες βασίζονται στην προηγούμενη επίλυση του αντίστοιχου συνεχούς γραμμικού προβλήματος(LP Relaxation). Οι μέθοδοι αυτές αξιοποιούν τη λύση του συνεχούς προβλήματος είτε για την κατασκευή φραγμάτων είτε για την καθοδήγηση της αναζήτησης κατάλληλων πρόσθετων περιορισμών. Δύο από τις σημαντικότερες τεχνικές είναι:

* η μέθοδος Διακλάδωσης και Φραγμού (Branch and Bound) και
* η μέθοδος Τεμνόντων Επιπέδων (Cutting Planes).

2.3.2 Διακλάδωση και Φραγμός

Η μέθοδος Διακλάδωσης και Φραγμού (Branch and Bound) αποτελεί μία από τις πιο διαδεδομένες τεχνικές για την επίλυση προβλημάτων ακέραιου γραμμικού προγραμματισμού. Η βασική ιδέα της βασίζεται στην επαναληπτική και αναδρομική επίλυση ολοένα και λιγότερο χαλαρωμένων υποπροβλημάτων, δηλαδή προβλημάτων που προκύπτουν όταν αγνοούνται προσωρινά οι περιορισμοί ακεραιότητας.

Υπό το πλαίσιο της μεθόδου, ο όρος υποπρόβλημα αναφέρεται σε ένα νέο πρόβλημα που προκύπτει από το αρχικά χαλαρωμένο γραμμικό πρόβλημα μέσω της προοδευτικής προσθήκης ενός επιπλέον περιορισμού. Κατά τη διαδικασία της διακλάδωσης (branching), δημιουργούνται τέτοια υποπροβλήματα, με στόχο τη σταδιακή επιβολή της ακεραιότητας σε όλες τις μεταβλητές απόφασης. Κάθε υποπρόβλημα ορίζει έναν μικρότερο υπόχωρο εφικτών λύσεων του αρχικού προβλήματος και επιλύεται ως ένα νέο χαλαρωμένο γραμμικό πρόβλημα.

Η λύση κάθε χαλαρωμένου προβλήματος παρέχει φράγματα (bounds) που καθοδηγούν τη διαδικασία αναζήτησης:

* Η καλύτερη ακέραιη λύση που έχει εντοπιστεί μέχρι εκείνο το σημείο παρέχει ένα άνω φράγμα(πρόβλημα ελαχιστοποίησης)

Το αντίστροφο ισχύει σε προβλήματα μεγιστοποίησης.

Αν η λύση του χαλαρωμένου προβλήματος είναι ήδη ακέραια, τότε αποτελεί βέλτιστη λύση και η διαδικασία ολοκληρώνεται. Διαφορετικά, επιλέγεται μια μεταβλητή με μη ακέραιη τιμή και δημιουργούνται δύο νέα υποπροβλήματα με τους παρακάτω περιορισμούς:

Η διαδικασία επαναλαμβάνεται αναδρομικά έως ότου ισχύσει ένα από τα παρακάτω:

* Το υποπρόβλημα είναι ανέφικτο.
* Η βέλτιστη λύση του υποπροβλήματος είναι χειρότερη από το άνω φράγμα, άρα μπορεί να απορριφθεί.
* Η λύση είναι ακέραια και βελτιώνει το άνω φράγμα.

Η δύναμη της μεθόδου έγκειται στο γεγονός ότι, μέσω της διαδικασίας του φραγμού, αποκλείονται μεγάλες περιοχές του εφικτού χώρου χωρίς να απαιτείται η εξαντλητική αναζήτηση όλων των δυνατών λύσεων. Μέσω της διαδικασίας του φραγμού διασφαλίζεται η εύρεση της βέλτιστης ακέραιας λύσης χωρίς να απαιτείται η εξαντλητική εξέταση όλων των δυνατών συνδυασμών. Αυτό επιτυγχάνεται, περιορίζοντας το εύρος αναζήτησης μόνο στις υποπεριπτώσεις που έχουν προοπτική βελτίωσης της βέλτιστης λύσης. Τα παραπάνω μπορούν να γίνουν κατανοητά με την χρήση του παρακάτω παραδείγματος.

Έστω το πρόβλημα ελαχιστοποίησης:

(3.1)

υπό τους περιορισμούς:

(3.2)

(3.3)

(3.4)

(3.5)

(3.6)

Αρχικά, επιλύεται το χαλαρωμένο πρόβλημα παραλείποντας τον περιορισμό ακεραιότητας (3.6).

Η βέλτιστη λύση είναι:

Με τιμή αντικειμενικής συνάρτησης:

Εφόσον x1 δεν είναι ακέραια, ξεκινά η διαδικασία διακλάδωσης με βάση τον περιορισμό:

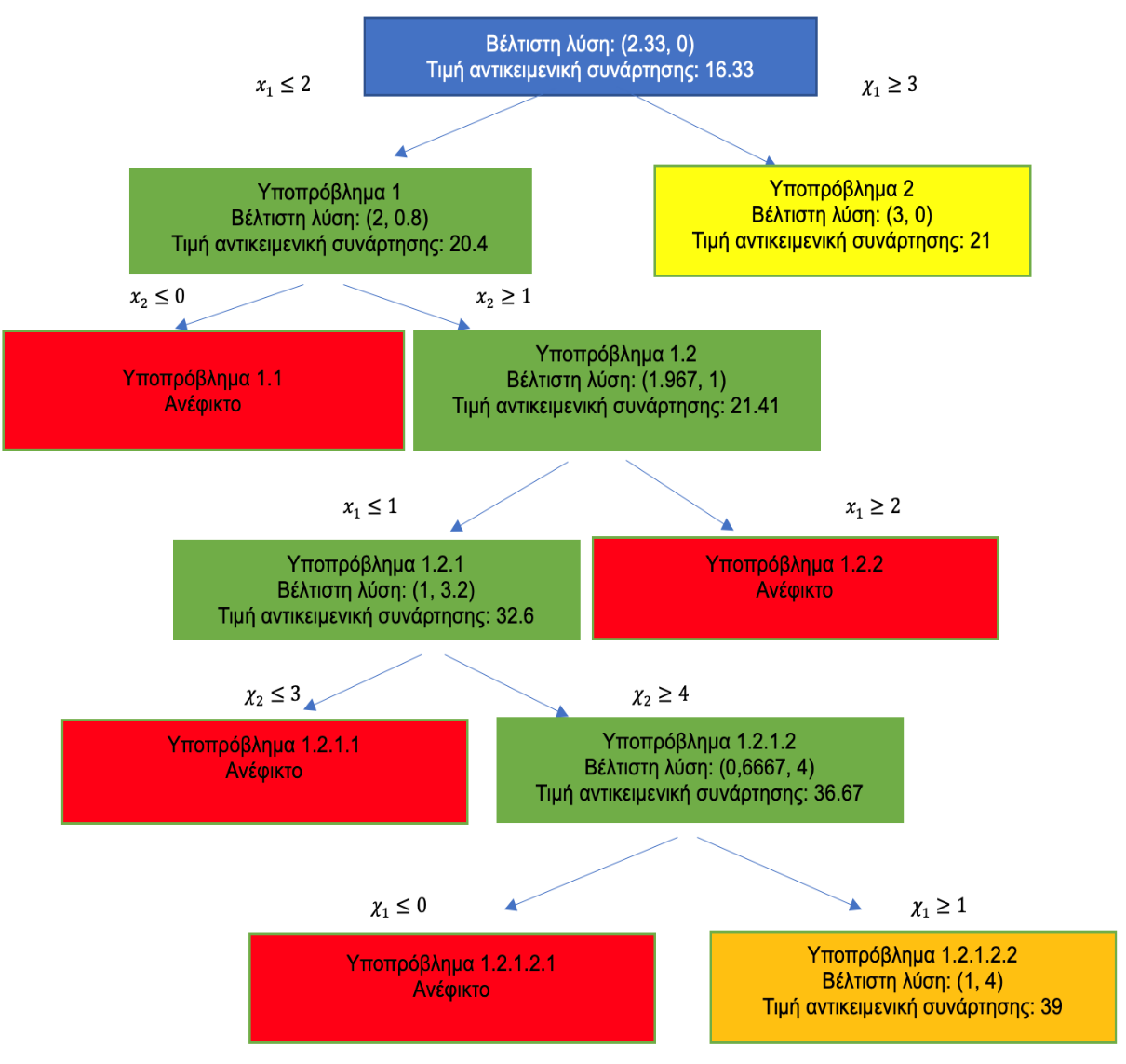
Ακολουθεί αναδρομικά νέα διακλάδωση με βάση την τιμή του x2​ κ.ο.κ. Στο αντίστοιχο δέντρο διακλάδωσης, οι καταστάσεις απεικονίζονται χρωματικά:

Πράσινο: συνεχίζεται η διαδικασία.

Κόκκινο: τερματισμός λόγω ανεφικτότητας ή χειρότερης λύσης.

Πορτοκαλί: εφικτή ακέραια λύση (όχι απαραίτητα τελική).

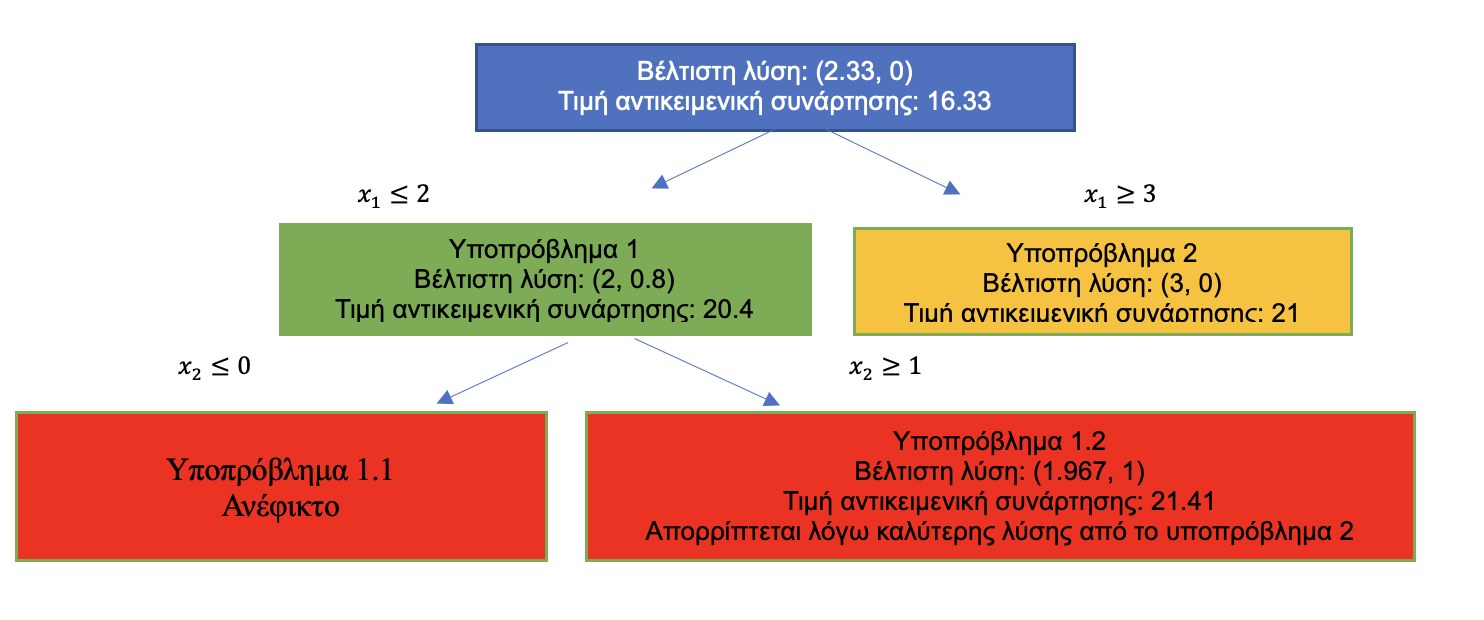
Κίτρινο: τελική βέλτιστη λύση.



**Σχήμα 2.1:Δέντρο διακλάδωσης για την επίλυση του προβλήματος με τη μέθοδο Branch and Bound**

Αξίζει να σημειωθεί ότι η διαδικασία της διακλάδωσης εκτείνεται καθ’ ύψος, με την έννοια ότι πριν εξεταστεί το επόμενο υποπρόβλημα στο ίδιο επίπεδο του δέντρου (οριζόντια διακλάδωση), θα πρέπει η αναδρομική επίλυση του προηγούμενου κλάδου να έχει πλήρως ολοκληρωθεί. Η ολοκλήρωση αυτή μπορεί να προκύψει είτε λόγω ανεφικτότητας του υποπροβλήματος είτε λόγω εύρεσης ακέραιης λύσης — ανεξαρτήτως αν αυτή γίνεται αποδεκτή ή απορρίπτεται με βάση τα υπάρχοντα φράγματα. Το χαρακτηριστικό αυτό διασφαλίζει ότι η εξερεύνηση του δέντρου πραγματοποιείται κατά βάθος (depth-first search), επιτρέποντας την έγκαιρη ενημέρωση του άνω φράγματος σε περίπτωση εύρεσης έγκυρων ακέραιων λύσεων.

Ωστόσο, η ταχύτητα σύγκλισης προς τη βέλτιστη λύση επηρεάζεται σημαντικά και από τη σειρά με την οποία επιλύονται τα υποπροβλήματα σε κάθε επίπεδο. Στο συγκεκριμένο παράδειγμα, αν η επίλυση είχε ξεκινήσει από το υποπρόβλημα 2, ο αλγόριθμος θα μπορούσε να είχε τερματίσει νωρίτερα. Η λύση του υποπροβλήματος 2 είναι ακέραιη και θα μπορούσε εξαρχής να λειτουργήσει ως άνω φράγμα για το αρχικό πρόβλημα. Η ύπαρξη ενός ισχυρού άνω φράγματος ήδη από τα πρώτα στάδια της διαδικασίας θα είχε οδηγήσει σε νωρίτερη αποκοπή (pruning) πολλών υποπροβλημάτων, επιταχύνοντας σημαντικά τη σύγκλιση προς τη βέλτιστη λύση. Παρακάτω παρατίθεται το δέντρο διακλάδωσης σε περίπτωση που ξεκινούσαμε τον αλγόριθμο από την επίλυση του υποπροβλήματος 2 αντί του υποπροβλήματος 1.

**Σχήμα 2.2: Δέντρο διακλάδωσης όταν προηγείται το υποπρόβλημα 2 κατά την διαδικασία επίλυσης.**

Στο δέντρο διακλάδωσης, ξεκινώντας από την επίλυση του υποπροβλήματος 2, προκύπτει μια εφικτή λύση με τιμή αντικειμενικής συνάρτησης ίση με 21. Η τιμή αυτή λειτουργεί ως άνω φράγμα για το πρόβλημα. Στη συνέχεια, όταν εξετάζουμε το υποπρόβλημα 1.2 και διαπιστώνουμε ότι η τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης είναι μεγαλύτερη από 21, ο αλγόριθμος τερματίζει, καθώς δεν μπορεί να βρεθεί καλύτερη λύση.

Η μέθοδος του Διακλάδωσης και Φραγμών  (Branch and Bound) επιδιώκει τη βέλτιστη ακέραια λύση μέσω του συστηματικού περιορισμού του χώρου των εφικτών λύσεων, αξιοποιώντας μια αναδρομική προσέγγιση τύπου «διαίρει και βασίλευε». Με τη διαδοχική διαίρεση του προβλήματος σε υποπροβλήματα και την αξιολόγησή τους βάσει άνω και κάτω φραγμάτων, η μέθοδος επιτρέπει την αποκοπή μεγάλων περιοχών του χώρου λύσεων που δεν μπορούν να περιέχουν καλύτερες λύσεις. Από την άλλη πλευρά, η μέθοδος Branch and Cut επεκτείνει τη βασική προσέγγιση εισάγοντας τέμνοντα επίπεδα (cutting planes) τα οποία στοχεύουν στον περαιτέρω περιορισμό του χώρου των εφικτών λύσεων του χαλαρωμένου προβλήματος, χωρίς όμως να αποκλείουν καμία ακέραια λύση. Η προσέγγιση αυτή προσφέρει σημαντική ενίσχυση στη διαδικασία σύγκλισης, όπως θα αναλυθεί στο επόμενο τμήμα.

2.3.3 Τεμνόντων Επιπέδων

Η μέθοδος των τεμνόντων επιπέδων (cutting planes) αποτελεί θεμελιώδη τεχνική στον Ακέραιο Γραμμικό Προγραμματισμό (ILP), με κύριο στόχο την αποκατάσταση της ακεραιότητας των μεταβλητών σε προβλήματα που αρχικά επιλύονται στη χαλαρωμένη (γραμμική) τους μορφή. Η βασική ιδέα της μεθόδου είναι η επαναληπτική προσθήκη νέων γραμμικών περιορισμών — γνωστών ως *τομές* — οι οποίοι περικόπτουν τον χώρο των εφικτών λύσεων του χαλαρωμένου προβλήματος, αποκλείοντας τις μη ακέραιες λύσεις, χωρίς όμως να εξαιρούν καμία από τις πιθανές ακέραιες λύσεις του αρχικού προβλήματος.

Η αποτελεσματικότητα αυτής της τεχνικής βασίζεται στην παρατήρηση ότι η βέλτιστη ακέραια λύση ενός προβλήματος ILP συχνά βρίσκεται κοντά στη λύση της χαλαρωμένης μορφής. Όταν η τελευταία δεν είναι ακέραια, κατασκευάζονται κατάλληλες τομές που περικόπτουν το συγκεκριμένο τμήμα του πολυέδρου που περιέχει τη μη αποδεκτή λύση. Οι τομές αυτές σχεδιάζονται προσεκτικά ώστε να περνούν από το εσωτερικό του εφικτού πολυέδρου, αφαιρώντας μόνο τις ανεπιθύμητες (μη ακέραιες) κορυφές, διατηρώντας όμως ανέπαφες όλες τις ακέραιες λύσεις. Η διαδικασία επαναλαμβάνεται: κάθε νέα τομή συνοδεύεται από εκ νέου επίλυση του προβλήματος με τους επικαιροποιημένους περιορισμούς, μέχρι είτε την επίτευξη ακέραιας λύσης είτε την απόδειξη αδιεξόδου.

Στην πράξη, ωστόσο, η μέθοδος μπορεί να είναι υπολογιστικά απαιτητική. Ο ακριβής αριθμός τομών που απαιτείται δεν είναι εκ των προτέρων γνωστός, ενώ επαναλαμβανόμενοι υπολογισμοί ενδέχεται να οδηγήσουν σε αριθμητικές αστάθειες. Παρόλα αυτά, η μέθοδος παραμένει ένας ισχυρός μηχανισμός επίλυσης, ιδιαίτερα όταν συνδυάζεται με άλλες τεχνικές, όπως η μέθοδος Διακλάδωσης και Φραγμών (*Branch-and-Bound*).

Στο Πρόβλημα του Πλανόδιου Πωλητή (TSP) εμφανίζονται δύο βασικές τεχνικές δυσκολίες. Η πρώτη αφορά την επιβολή ακεραιότητας στις δυαδικές μεταβλητές xij, οι οποίες δηλώνονται στον επιλυτή με όρια [0,1] και ρητή απαίτηση ακεραιότητας (*integrality = 1*). Στην πράξη, η διασφάλιση της ακεραιότητας επιτυγχάνεται μέσω της μεθόδου διακλάδωσης και φραγμού, η οποία εφαρμόζεται εσωτερικά από τον επιλυτή (scipy.optimize.linprog) για την αποκοπή μη ακέραιων λύσεων. Η δεύτερη δυσκολία σχετίζεται με την αποτροπή της εμφάνισης υποκύκλων (subtours), δηλαδή λύσεων που σχηματίζουν κύκλους χωρίς να καλύπτουν όλες τις πόλεις. Το ζήτημα αυτό αντιμετωπίζεται μέσω της δυναμικής εισαγωγής περιορισμών εξάλειψης υποκύκλων (Subtour Elimination Constraints, SECs). Οι τομές αυτές δεν επιβάλλουν ακεραιότητα, αλλά περιορίζουν περαιτέρω τον εφικτό χώρο λύσεων ώστε να περιλαμβάνει κυκλικά μονοπάτια που διέρχονται από όλα τα σημεία του εκάστοτε προβλήματος.

Κατά συνέπεια, στο TSP η μέθοδος των τεμνόντων επιπέδων (cutting planes) αποκτά έναν εναλλακτικό ρόλο: δεν χρησιμοποιείται για να επιβάλει ακεραιότητα στις μεταβλητές, αλλά ως μηχανισμός ενίσχυσης της δομής της λύσης. Μέσω της δυναμικής ενσωμάτωσης περιορισμών εξάλειψης υποκύκλων στο πλαίσιο των τεμνόντων επιπέδων, ο αλγόριθμος επιτυγχάνει αποτελεσματικό αποκλεισμό των υποκύκλων και καθιστά εφικτή την επίλυση προβλημάτων TSP σε μεγαλύτερη κλίμακα καθώς:

* Δεν απαιτείται η εκ των προτέρων κατασκευή του εκθετικού συνόλου όλων των SECs.
* Οι περιορισμοί προστίθενται *μόνο* όταν εντοπιστούν παραβιάσεις τους στη λύση.

2.4 Συμμετρική μορφή TSP: Μαθηματική Διατύπωση και Υλοποίηση Επίλυσης σε Python

Στο πλαίσιο της παρούσας εργασίας, υιοθετήθηκε και υλοποιήθηκε η συμμετρική εκδοχή του προβλήματος του Πλανόδιου Πωλητή (Symmetric TSP), στην οποία θεωρούμε ότι το κόστος μετάβασης μεταξύ δύο πόλεων είναι το ίδιο ανεξαρτήτως κατεύθυνσης, δηλαδή ​. Η παραδοχή αυτή απλοποιεί τη μαθηματική μοντελοποίηση, επιτρέποντας την αναπαράσταση του προβλήματος ως ένα πλήρη μη κατευθυνόμενο γράφο. Σε όρους γραμμικού προγραμματισμού διατυπώνεται ως εξής:

(4.1)

Υπό τους περιορισμούς:

(4.2)

(4.3)

(4.4)

Όπου:

* E: Σύνολο ακμών.
* V: Σύνολο κορυφών (πόλεων).
* ​: Δυαδική μεταβλητή που δηλώνει αν η ακμή e περιλαμβάνεται στη λύση.
* ​: Κόστος/απόσταση της ακμής e.
* N(v): Σύνολο ακμών που συνδέονται με την κορυφή v.
* E(S): Υποσύνολο των ακμών που συνδέουν τις κορυφές του υποσυνόλου S⊂V.

O πρώτος περιορισμός της συμμετρικής διατύπωσης του TSP:

V(4.2)

προκύπτει ως αποτέλεσμα της μετάβασης από τη κατευθυνόμενη (ασύμμετρη) μορφή του προβλήματος σε μια μη κατευθυνόμενη (συμμετρική) εκδοχή. Στην ασύμμετρη περίπτωση, η πορεία του πωλητή αναπαρίσταται μέσω κατευθυνόμενων ακμών, και κάθε κόμβος πρέπει να έχει μία εισερχόμενη και μία εξερχόμενη ακμή, κάτι που απαιτεί δύο ξεχωριστούς ισοτικούς περιορισμούς (in-degree και out-degree) για κάθε κόμβο:

Στη συμμετρική εκδοχή όμως, οι ακμές είναι μη κατευθυνόμενες. Καθώς δεν υπάρχει πλέον έννοια κατεύθυνσης, δεν έχει σημασία ποια είναι η “είσοδος” ή η “έξοδος” από μια πόλη —σημασία έχει μόνο το αν η πόλη συμμετέχει ακριβώς σε δύο ακμές της τελικής διαδρομής. Έτσι, οι δύο προηγούμενοι περιορισμοί συγχωνεύονται σε έναν ενιαίο περιορισμό βαθμού, ο οποίος δηλώνει ότι κάθε κόμβος έχει βαθμό 2 στο γράφο της λύσης.

Αξίζει να σημειωθεί ότι η μετάβαση από τη γενική (κατευθυνόμενη) εκδοχή του Προβλήματος του Πλανόδιου Πωλητή στη συμμετρική (μη κατευθυνόμενη) μορφή συνοδεύεται από σημαντικά υπολογιστικά οφέλη. Συγκεκριμένα, ενώ στη γενική περίπτωση το σύνολο των ακμών περιλαμβάνει και τις δύο κατευθύνσεις για κάθε ζεύγος πόλεων (i,j) και (j,i) στη συμμετρική μορφή λαμβάνεται υπόψη μόνο μία από αυτές. Ως αποτέλεσμα, ο συνολικός αριθμός δυαδικών μεταβλητών y​e που χρησιμοποιούνται στη μαθηματική μοντελοποίηση μειώνεται σχεδόν στο μισό. Αυτή η μείωση επιφέρει σημαντική συρρίκνωση του χώρου των εφικτών λύσεων και συμβάλλει καθοριστικά στο χρόνο σύγκλισης προς την βέλτιστη λύση.

3 Εισαγωγή στα Νευρωνικά Δίκτυα Γράφων (GNNs)

Ένας μαθηματικός γράφος είναι μια δομή δεδομένων που περιγράφει σχέσεις μεταξύ οντοτήτων. Τυπικά, ένας γράφος ορίζεται ως ένα ζεύγος G = (V, E) όπου το σύνολο V περιέχει τους κόμβους (ή κορυφές) και το σύνολο περιέχει τις ακμές (ή συνδέσεις) μεταξύ των κόμβων. Οι ακμές μπορεί να έχουν φορά και στην περίπτωση αυτή ο γράφος χαρακτηρίζεται ως κατευθυνόμενος ή μπορεί να περιγράφουν αμφίδρομες σχέσεις όπου η φορά της σύνδεσης δεν έχει σημασία και τότε ο γράφος χαρακτηρίζεται ως μη κατευθυνόμενος. Επιπλέον, οι ακμές μπορούν να συνοδεύονται από — όπως αριθμητικά βάρη (π.χ. αποστάσεις, κόστη) ή κατηγορικές ετικέτες που δηλώνουν τον τύπο της σχέσης (π.χ. «φιλική», «επαγγελματική»).

Αυτή η εννοιολογική ευελιξία καθιστά τους γράφους εξαιρετικά ισχυρό εργαλείο μοντελοποίησης. Επιτρέπουν την αναπαράσταση μιας ευρείας γκάμας πραγματικών συστημάτων: από κοινωνικά και οδικά δίκτυα, μέχρι χημικές ενώσεις, πληροφοριακές ροές, και αλληλεπιδράσεις σε φυσικά και βιολογικά περιβάλλοντα. Χάρη σε αυτή την εκφραστική δύναμη, οι γράφοι έχουν αποκτήσει κεντρική θέση σε πολλά επιστημονικά πεδία — όπως η πληροφορική, η φυσική, η βιολογία και τα οικονομικά.

Τα τελευταία χρόνια, η σημασία των γράφων έχει αναδειχθεί ιδιαίτερα και στο πεδίο της μηχανικής μάθησης, καθώς προσφέρουν έναν ευέλικτο τρόπο οργάνωσης των δεδομένων που υπερβαίνει τις παραδοσιακές δομές, όπως οι μήτρες(πίνακες). Η αναπαράσταση των δεδομένων με την χρήση γράφων επιτρέπει τη μοντελοποίηση πολύπλοκων συσχετίσεων και αλληλεπιδράσεων, καθιστώντας την ιδανική για μια πληθώρα εφαρμογών.

Σε αυτό το πλαίσιο, έχουν διαμορφωθεί ορισμένες γενικές κατηγορίες προβλημάτων που προσεγγίζονται μέσω της δομής των γράφων:

* Κατηγοριοποίηση κόμβων (node classification**):** Πρόβλεψη ετικέτας για έναν μεμονωμένο κόμβο, όπως ο προσδιορισμός του τύπου ενός κυττάρου σε ένα βιολογικό δίκτυο.
* Πρόβλεψη ακμών (link prediction**):** Εκτίμηση της πιθανότητας εμφάνισης νέας σύνδεσης μεταξύ δύο κόμβων, π.χ. πρόβλεψη νέας φιλίας σε κοινωνικά δίκτυα.
* Κατηγοριοποίηση γράφων (graph classification**):** Ανάθεση μιας συνολικής ετικέτας σε έναν γράφο, όπως η ταξινόμηση ενός μορίου ανάλογα με τη φαρμακολογική του δράση.
* Συστήματα συστάσεων (recommendation systems**):** Ειδική περίπτωση πρόβλεψης ακμών, όπου χρήστες και προϊόντα αναπαρίστανται ως κόμβοι σε διμερείς γράφους, και το ζητούμενο είναι η πρόβλεψη πιθανών αλληλεπιδράσεων (π.χ. αξιολογήσεις ή αγορές).

Για να κατανοηθεί σε βάθος πώς επιτυγχάνεται η μάθηση από τέτοιου είδους δομημένα δεδομένα, είναι χρήσιμο να προηγηθεί μια σύντομη ανασκόπηση των βασικών αρχών των νευρωνικών δικτύων. Στην επόμενη ενότητα, θα παρουσιαστούν τα κύρια χαρακτηριστικά τους, ώστε να τεθεί το υπόβαθρο για την κατανόηση των Νευρωνικών Δικτύων Γράφων (Graph Neural Networks – GNNs).

3.1 Βασικές Αρχές Νευρωνικών Δικτύων

Τα κλασικά νευρωνικά δίκτυα (Artificial Neural Networks – ANNs) έχουν ως θεμελιώδες δομικό στοιχείο τον τεχνητό νευρώνα — μια υπολογιστική μονάδα που δέχεται είσοδο, πολλαπλασιάζει κάθε τιμή με ένα αντίστοιχο βάρος (weight), εφαρμόζει μία μη γραμμική συνάρτηση ενεργοποίησης (activation function) και παράγει την τελική έξοδο. Η διαδικασία εκπαίδευσης βασίζεται στη μέθοδο της «προς τα πίσω διάδοσης» (backpropagation), κατά την οποία τα βάρη ενημερώνονται με βάση το σφάλμα πρόβλεψης.

Στις παραδοσιακές αρχιτεκτονικές, οι είσοδοι οργανώνονται ως δισδιάστατοι πίνακες διαστάσεων N×F, όπου κάθε γραμμή αντιστοιχεί σε μία παρατήρηση (sample), και κάθε στήλη σε μία μεταβλητή χαρακτηριστικό (feature) του χώρου εισόδου. Σε αυτά τα πλαίσια, η διάταξη (σειρά) των γραμμών και των στηλών δεν φέρει σημασιολογική πληροφορία· δηλαδή, μπορούμε να αναδιατάξουμε είτε τις παρατηρήσεις είτε τα χαρακτηριστικά, αρκεί να διατηρείται η αντιστοιχία μεταξύ των στοιχείων. Είναι ωστόσο κρίσιμο να επισημανθεί ότι, για ένα συγκεκριμένο νευρωνικό δίκτυο, ο αριθμός των χαρακτηριστικών (στηλών **F**) παραμένει σταθερός, ενώ ο αριθμός των παρατηρήσεων (γραμμών Ν) μπορεί να ποικίλλει ανάλογα με το σύνολο δεδομένων. Η ιδιότητα αυτή προσφέρει μεγάλη ευελιξία στα παραδοσιακά μοντέλα μάθησης. Αντιθέτως, όταν επιχειρούμε να περιγράψουμε δομές όπως γράφοι μέσω πίνακα γειτνίασης (adjacency matrix), η εισαγωγή ή η αφαίρεση κόμβων τροποποιεί άμεσα τις διαστάσεις του πίνακα, γεγονός που διαταράσσει τη δομή εισόδου και δημιουργεί δυσκολίες στη γενίκευση του μοντέλου.

Αξίζει επιπλέον να σημειωθεί ότι υπάρχουν περιπτώσεις στις οποίες η διάταξη των στοιχείων στον πίνακα εισόδου είναι κρίσιμη, καθώς φέρει χωρική ή χρονική πληροφορία. Αυτή είναι η περίπτωση της δομή δεδομένωνπλέγματος(grids) π.χ. εικόνες ή σήματα, όπου η σχετική θέση των παρατηρήσεων επιτρέπει την αξιοποίηση της τοπικότητας μέσω της διαδικασίας της συνέλιξης (convolution). Τα Συνελικτικά Νευρωνικά Δίκτυα (Convolutional Neural Networks – CNNs) έχουν βασιστεί σε αυτή την αρχή και έχουν φέρει επανάσταση σε εφαρμογές όπως η αναγνώριση εικόνων και η επεξεργασία φυσικής γλώσσας (Zhou et al., 2018; Wu et al., 2019).

Στην περίπτωση των γραφημάτων, η ενσωμάτωση της έννοιας της συνέλιξης αποτελεί θεμελιώδη πρόκληση, κυρίως λόγω δύο βασικών χαρακτηριστικών:

1. Οι γράφοι δεν διαθέτουν εγγενή διάταξη μεταξύ των κόμβων — δεν υπάρχει φυσική σειρά, όπως στις εικόνες.
2. Ο ίδιος γράφος μπορεί να έχει πολλαπλές ισομορφικές αναπαραστάσεις, δηλαδή διαφορετικές αλγεβρικές μορφές που περιγράφουν ακριβώς την ίδια δομή.

Αυτά τα εμπόδια οδήγησαν στην ανάπτυξη νέων μεθόδων και αρχιτεκτονικών που γενικεύουν τη συνέλιξη σε δομές δεδομένων όπως οι γράφοι — δίνοντας έτσι τη βάση για τα Νευρωνικά Δίκτυα Γράφων (Graph Neural Networks – GNNs).

3.2 Θεμελιώδης Περιορισμοί και Γενίκευση της Συνέλιξης σε Γράφους

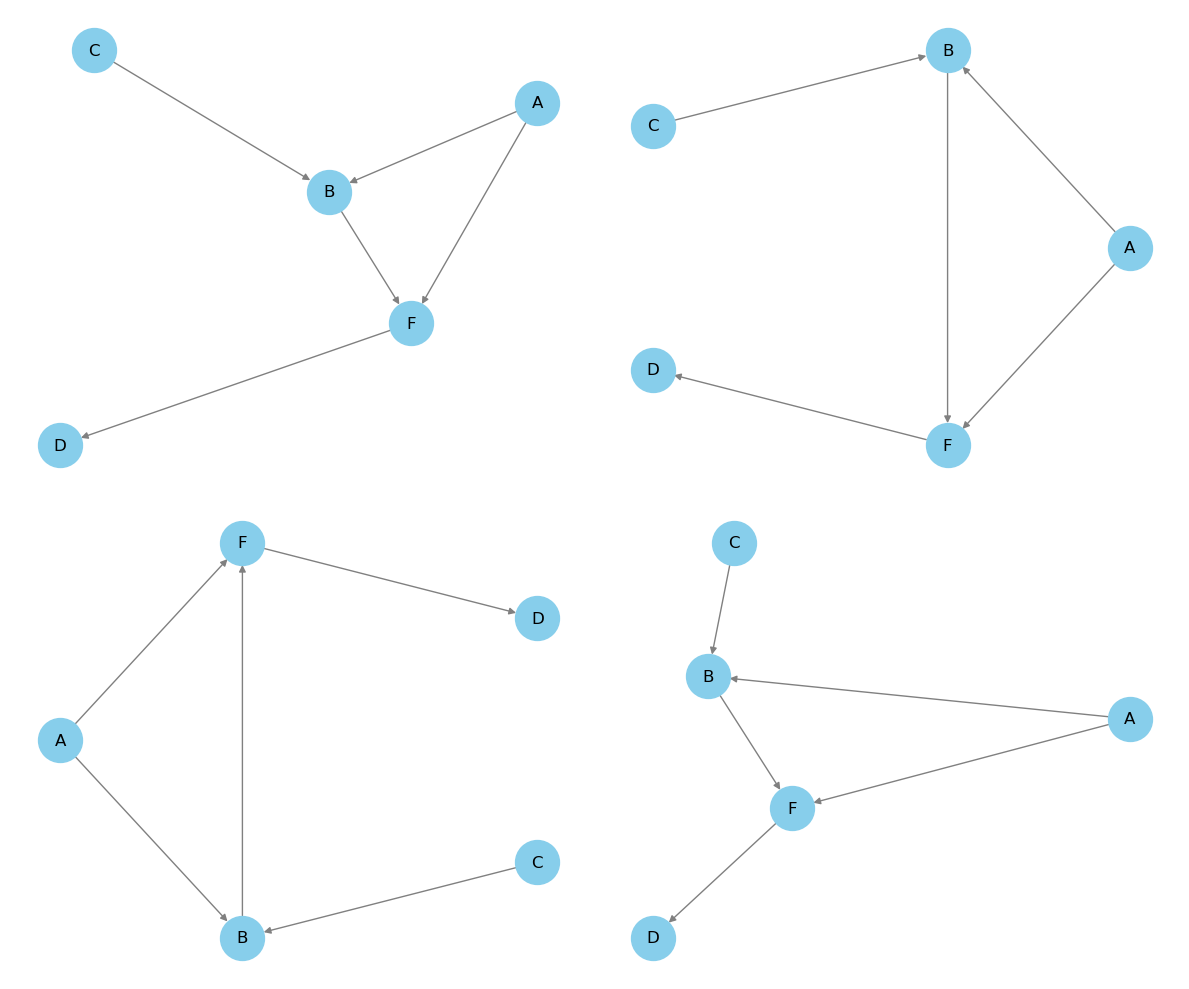
Η επέκταση της έννοιας της συνέλιξης από δεδομένα οργανωμένα σε δομές πλέγματος (όπως εικόνες ή ηχητικά σήματα) σε δομές γράφων αποτελεί μία από τις σημαντικότερες θεωρητικές και πρακτικές προκλήσεις στο πεδίο των Νευρωνικών Δικτύων Γράφων (Graph Neural Networks – GNNs) (Zhou et al., 2018; Wu et al., 2019). Σε αντίθεση με τα Συνελικτικά Νευρωνικά Δίκτυα (CNNs), τα οποία επωφελούνται από την σταθερή διάταξη των εισερχόμενων δεδομένων, οι γράφοι συνιστούν ετερογενείς δομές με δύο βασικά χαρακτηριστικά:

* Δεν υφίσταται εγγενής ή φυσική σειρά μεταξύ των κόμβων.
* Ο ίδιος γράφος μπορεί να έχει πολλαπλές ισομορφικές αναπαραστάσεις, δηλαδή διαφορετικές αλγεβρικές μορφές που περιγράφουν την ίδια τοπολογία.

Για να κατανοήσουμε την πολυπλοκότητα αυτή, ας εξετάσουμε τον παρακάτω πίνακα γειτνίασης:

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|  | A | B | C | D | F |
| A | 0 | 1 | 0 | 0 | 1 |
| B | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 |
| C | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| D | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| F | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 |

Ο παραπάνω πίνακας μπορεί να αναπαριστά πολλούς φαινομενικά διαφορετικούς γράφους, όπως φαίνεται στο Σχήμα 3.1. Παρότι η γραφική απεικόνιση αλλάζει, η υποκείμενη δομή παραμένει η ίδια.

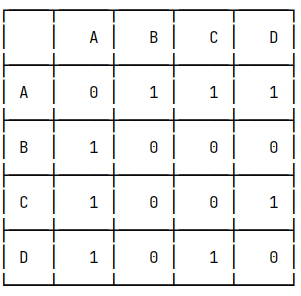
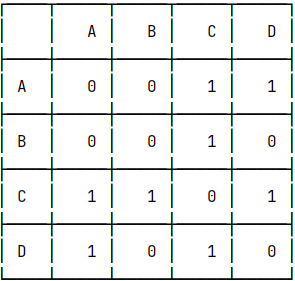


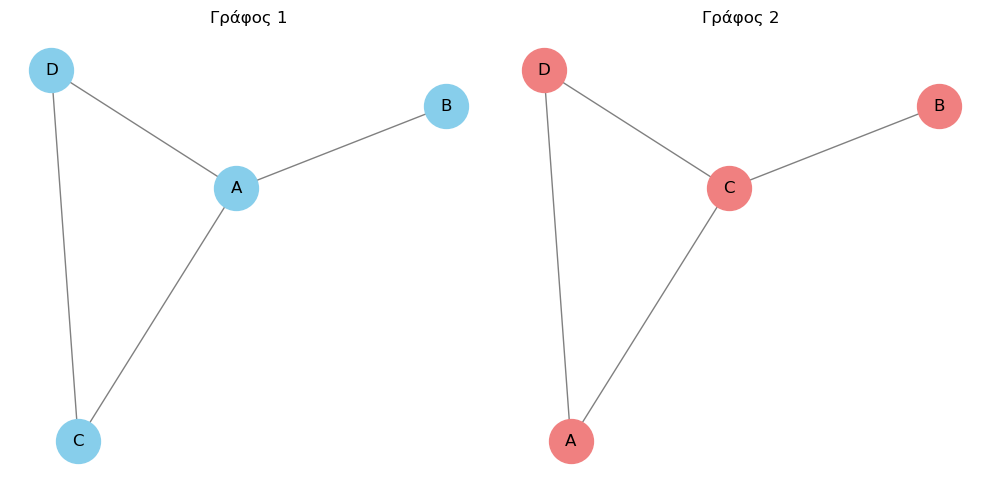
**Σχήμα 3.1 Διαφορετικές διατάξεις του ίδιου γράφου**

Αντιστρόφως, ο ίδιος γράφος μπορεί να παρασταθεί από διαφορετικούς πίνακες γειτνίασης με απλή αναδιάταξη της σειρά των κόμβων. Το φαινόμενο αυτό είναι γνωστό ως *πρόβλημα της μετάθεσης* (*permutation problem*) και αποτελεί ειδική περίπτωση του προβλήματος του ισομορφισμού. Για παράδειγμα, ο παρακάτω πίνακας γειτνίασης περιγράφει την ίδια τοπολογία, αλλά με διαφορετική διάταξη των κορυφών Α και Β:

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|  | Β | Α | C | D | F |
| B | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 |
| A | 1 | 0 | 0 | 0 | 1 |
| C | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| D | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| F | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 |

Εν κατακλείδι, στην περίπτωση της μετάθεση του γράφου G(V,E) τα σύνολα Ε και Vπαραμένουν αμετάβλητα. Αξίζει ωστόσο να σημειωθεί ότι ό ισομορφισμός συνιστά σημαντική πρόκληση στην εφαρμογή τεχνικών μηχανικής μάθησης σε γράφους, καθώς δύο διαφορετικά αλγεβρικά μοντέλα μπορεί να αναπαριστούν την ίδια τοπολογία. Δύο γράφοι θεωρούνται ισομορφικοί όταν υπάρχει μια αμφιμονοσήμαντη αντιστοίχιση τέτοια ώστε κάθε ακμή να αντιστοιχεί στην ακμή. Με άλλα λόγια, η δομή των συνδέσεων διατηρείται, ακόμη κι αν αλλάξουν οι ονομασίες ή η σειρά των κόμβων.

****

****

**Σχήμα 3.2: Ισομορφισμός λόγω ανταλλαγής θέσης κορυφών Α και C**

Το Σχήμα 3.2 απεικονίζει ένα παράδειγμα ισομορφισμού μεταξύ δύο γράφων.

Τα σύνολα ακμών είναι:

* .

Αν και τα σύνολα ακμών είναι διαφορετικά, η συνδετική δομή είναι ουσιαστικά η ίδια. Η δεύτερη περίπτωση προκύπτει από την ανταλλαγή των ονομάτων των κορυφών A και C στον αρχικό γράφο.

Εκτός από το ζήτημα του ισομορφισμού, η ετερογένεια των γράφων εμφανίζεται και σε άλλες περιπτώσεις όπως όταν:

* Ο αριθμός των κόμβων και ακμών διαφέρει μεταξύ γράφων.
* Οι κόμβοι μπορεί να έχουν διαφορετικό αριθμό γειτόνων (μεταβλητός βαθμός).
* Οι γράφοι μπορεί να περιέχουν πολλαπλούς τύπους κόμβων και ακμών, όπως π.χ. άτομα, προϊόντα, αξιολογήσεις, συναλλαγές κ.λπ.

Σε αντίθεση με τα εικονοστοιχεία (pixels**)** μιας εικόνας:

* Υπάρχει σταθερή διάταξη και 1-προς-1 αντιστοίχιση θέσης.
* Οι διαστάσεις είναι σταθερές (π.χ., 28×28).
* Κάθε pixel έχει τον ίδιο αριθμό γειτόνων.
* Η συνέλιξη εφαρμόζεται ομοιόμορφα σε όλο το πεδίο.

Αντιθέτως, στους γράφους δεν υπάρχει τέτοια κανονικότητα, γεγονός που καθιστά την εφαρμογή της συνέλιξης μη τετριμμένη.

3.2.1 Κίνητρο για γενίκευση της συνέλιξης

Τα συνελικτικά νευρωνικά δίκτυα (Convolutional Neural Networks, CNNs) έχουν καταφέρει εντυπωσιακά αποτελέσματα σε προβλήματα υπολογιστικής όρασης, επεξεργασία φυσικής γλώσσας και γενικά σε δεδομένα που παρουσιάζουν ευκλείδεια δομή: εικόνες, κείμενο, ήχος. Σε τέτοιες περιπτώσεις, η τοπολογία των δεδομένων είναι σταθερή, και η γειτονιά κάθε σημείου (π.χ. pixel) είναι σαφώς ορισμένη και σταθερών διαστάσεων.

Ωστόσο, σε πλήθος πραγματικών προβλημάτων, η δομή των δεδομένων δεν ακολουθεί αυστηρά ευκλείδεια γεωμετρία. Παραδείγματα περιλαμβάνουν:

* Κοινωνικά δίκτυα (οι κόμβοι είναι χρήστες, οι ακμές φιλικές σχέσεις),
* Μόρια στην επιστήμη της βιολογίας (οι κόμβοι είναι άτομα, οι ακμές χημικοί δεσμοί),
* Δίκτυα μεταφορών, επικοινωνίας, ή πληροφορίας,
* Τεχνουργημένες περιπτώσεις όπως ο πλήρης γράφος στην περίπτωση του TSP.

Αυτές οι δομές περιγράφονται με γράφους, οι οποίοι είναι μη ευκλείδειες, ανομοιογενείς, γεωμετρίες. Ο αριθμός και η τοπολογία των γειτόνων κάθε κόμβου διαφέρει, καθιστώντας την απευθείας εφαρμογή της συνέλιξης μέσω σταθερής μάσκας ανέφικτη. Για να γίνει πιο κατανοητό ας προσπαθήσουμε να ορίσουμε την ‘**γειτονία’** σε μια εικόνα και σε ένα γράφο.

Σε έναν δισδιάστατο πίνακα εικόνας, κάθε pixel έχει σταθερούς γείτονες (π.χ. 8 σε 3×3 πυρήνα(kernel)). Σε έναν γράφο, κάθε κόμβος u έχει γείτονες με μη σταθερό πλήθος και χωρίς συγκεκριμένη διάταξη. Επομένως:

* Δεν μπορούμε να εφαρμόσουμε πυρήνες συνέλιξης με σταθερή μάσκα.
* Δεν υπάρχει έννοια "γειτονικού pixel προς τα πάνω ή κάτω".
* Η διάταξη των γειτόνων είναι ασύμμετρη και αταξινόμητη.

Αυτό οδηγεί στην ανάγκη για νέα, γενικευμένη έννοια συνέλιξης.

3.2.2 Συνέλιξη σε Μη Ευκλείδειες Δομές

Η συνέλιξη σε γράφους παύει πλέον να ορίζεται ως σταθερή γραμμική πράξη μιας μάσκας σε δεδομένα πλέγματος, αλλά να αποτελεί μια αλγεβρική διαδικασία συσσώρευσης πληροφορίας από την γειτονία κάθε κόμβου. Ο βασικός στόχος παραμένει ο ίδιος. Να κατασκευάσουμε πλούσιες, πολυεπίπεδες αναπαραστάσεις των κόμβων και των ακμών (embeddings), ενσωματώνοντας την δομή και τα χαρακτηριστικά των γειτόνων τους.

Αυτό επιτυγχάνεται με την **μηχανική διάδοση μηνυμάτων(message passing)**, που στην ουσία, κάθε κόμβος συλλέγει πληροφορία από την γειτονιά του, την ενσωματώνει στην αναπαράστασή του και τη μεταδίδει ξανά στους γείτονές του σε επόμενο επίπεδο. Σε κάθε επίπεδο **ℓ** του δικτύου, ο στόχος είναι να υπολογιστεί μια νέα αναπαράσταση (embedding) για κάθε κόμβο **v**, η οποία εξαρτάται:

* από την τρέχουσα αναπαράσταση του κόμβου v,
* από τις αναπαραστάσεις των γειτόνων του u ∈ N(v),
* και από πιθανές πληροφορίες που φέρουν οι ακμές (features**)** eᵤᵥ.

Η διαδικασία αυτή είναι **α**ναδρομική: οι αναπαραστάσεις του επιπέδου **ℓ** χτίζονται με βάση τις αναπαραστάσεις του επιπέδου ℓ−1. Ο γενικός μαθηματικός τύπος που περιγράφει την ενημέρωση των αναπαραστάσεων των κορυφών σε γράφους είναι:

Όπου:

* η αναπαράσταση(embedding) του κόμβου u στο επίπεδο
* είναι συνάρτηση ενημέρωσης,
* συνάρτησησυσσώρευσης (aggregation function),
* είναι η συνάρτηση δημιουργίαςμηνυμάτων
* .

Η εξίσωση που παρουσιάστηκε περιγράφει τη θεμελιώδη πράξη συνελικτικής επεξεργασίας σε γράφους και αποτελεί την καρδιά της διαδικασίας δημιουργίας αναπαραστάσεων(embeddings).Όπως αναφέρθηκε και προηγουμένων η διαδικασία αυτή είναι αναδρομική: η αναπαράσταση κάθε κόμβου ​ στο επίπεδο εξαρτάται από την αναπαράστασή του στο προηγούμενο επίπεδο καθώς και από τις αναπαραστάσεις των γειτόνων του. Αυτό σημαίνει ότι, μέσω της διαδοχικής εφαρμογής του ίδιου κανόνα ανά επίπεδο, οι αναπαραστάσεις

(embeddings) "βαθαίνουν", ενσωματώνοντας πληροφορία από όλο και ευρύτερες περιοχές του γράφου.

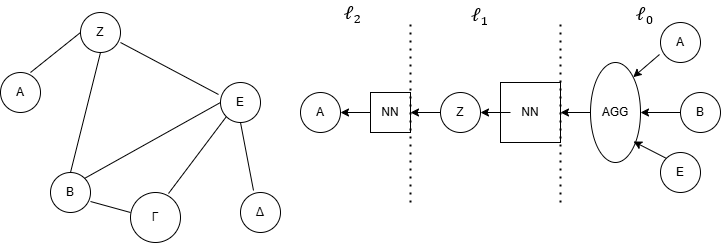
Κρίσιμος παράγοντας στη γενίκευση της συνέλιξης είναι τα προ-απαιτούμενά της συνάρτησης **AGG** (Aggregation), η οποία είναι υπεύθυνη για τη συσσώρευση πληροφορίας από τη γειτονιά του κόμβου . Εφόσον οι γείτονες ενός κόμβου σε γράφο δεν έχουν εγγενή διάταξη, οποιαδήποτε λειτουργία συσσώρευσης πρέπει να είναι **α**ντιμεταθετική (*permutation-invariant*), δηλαδή να μην εξαρτάται από τη σειρά με την οποία προσκομίζονται οι πληροφορίες των γειτόνων.

Αυτός ο περιορισμός είναι απαραίτητος προκειμένου η διαδικασία να είναι συνεπής ως προς το πρόβλημα του ισομορφισμού: δύο κόμβοι σε ισόμορφoυς γράφους με ίδιες τοπικές δομές (ανεξαρτήτως αρίθμησης ή διάταξης γειτόνων) πρέπει να καταλήγουν σε ίδιες αναπαραστάσεις. Εάν η έξοδος της συνάρτησης συσσώρευσης(AGG) εξαρτάται από τη σειρά των εισόδων, τότε θα μπορούσε να καταστραφεί αυτή η ισότητα και η μοντελοποίηση να είναι ευαίσθητη σε μεταθέσεις.

Για τον λόγο αυτό, οι πιο συχνά χρησιμοποιούμενες συναρτήσεις AGG είναι οι εξής:

* Πρόσθεση
* Μέσο όρος
* Μέγιστο-Ελάχιστο

Όλες οι παραπάνω ικανοποιούν την απαίτηση της αντιμεταθετικότητας, εξασφαλίζοντας ότι η τελική αναπαράσταση εξαρτάται μόνο από το *ποιοι* είναι οι γείτονες και *τι χαρακτηριστικά φέρουν*, αλλά όχι από το *πώς είναι διατεταγμένοι*. Για την καλύτερη κατανόηση της εξίσωσης που περιεγράφηκε προηγουμένως, παρατίθεται στο Σχήμα 3.3 ο υπολογιστικός γράφος της κορυφής A, ο οποίος αποτυπώνει σχηματικά τη διαδικασία συλλογής και συνδυασμού πληροφορίας από τη γειτονιά της.



**Σχήμα 3.3 Υπολογιστικός γράφος για την αναπαράσταση της κορυφής Α**

3.2.3 Δίκτυα Μηχανισμών Προσοχής

Αφού παρουσιάστηκε η γενική αρχιτεκτονική των συνελικτικών νευρωνικών δικτύων σε γράφους (GCNs), αξίζει να εξεταστεί μια ιδιαίτερα αποδοτική και δημοφιλής παραλλαγή τους: οι Μηχανισμοί Προσοχής σε Γράφους (Graph Attention Networks, GAT). Η βασική καινοτομία των GAT έγκειται στην ενσωμάτωση μηχανισμών προσοχής (attention mechanisms), οι οποίοι επιτρέπουν στο δίκτυο να μαθαίνει δυναμικά τη σημαντικότητα κάθε γείτονα για την αναπαράσταση ενός κόμβου.

Με τον τρόπο αυτό, αντί να συμμετέχουν όλοι οι γείτονες ισότιμα — όπως συμβαίνει, για παράδειγμα, με τον μέσο όρο ή το απλό άθροισμα στα παραδοσιακά GCNs — το μοντέλο αποδίδει προσαρμοσμένες βαρύτητες στις πληροφορίες που προέρχονται από κάθε γείτονα, ανάλογα με τη σχετική σημασία τους για τον κόμβο-στόχο (Velicković et al., 2018).

Ανακεφαλαιώνοντας, η γενική εξίσωση για την ανανέωση της αναπαράστασης ενός κόμβου u στο επίπεδο ℓ έχει τη μορφή:

Στο πλαίσιο των Νευρωνικών Δικτύων Γράφων, αυτή η γενική μορφή εξειδικεύεται ως εξής:

Όπου:

* είναι η αναπαράσταση(embedding) του κόμβου u στο επίπεδο ,
* ​ είναι η αναπαράσταση(embedding) του γείτονα στο προηγούμενο επίπεδο ℓ−1,
* είναι πίνακας γραμμικού μετασχηματισμού (shared weight matrix), κοινός για όλους τους κόμβους στο επίπεδο ,
* ​ είναι ο συντελεστής προσοχής, που εκφράζει τη σχετική σημασία του κόμβου για την ενημέρωση του κόμβου ,
* είναι μια μη-γραμμική συνάρτηση ενεργοποίησης, όπως LeakyReLU.

Επομένως, στην ορολογία της γενικής εξίσωσης:

* Η συνάρτηση υλοποιείται ως
* Ο τελεστής γίνεται ένα σταθμισμένο άθροισμα πάνω στους γείτονες,
* Και η αντιστοιχεί στην συνάρτηση ενεργοποίηση(activation function).

Οι **συντελεστές προσοχής** ​ προκύπτουν ως εξής:

Στην παραπάνω σχέση παρατηρούμε ότι οι συντελεστές σημαντικότητας βασίζονται στην συνένωση των μετασχηματισμένων αναπαραστάσεων των γειτονικών μεταξύ τους κόμβων u και v.

Το διάνυσμα **a** και ο πίνακας **W** είναι παράμετροι που μαθαίνονται κατά την εκπαίδευση. Με αυτό τον τρόπο, το GAT επιτρέπει στο δίκτυο να εστιάζει σε “σημαντικούς” γείτονες, αντί να αντιμετωπίζει όλους τους κόμβους της τοπικής γειτονιάς με ίση βαρύτητα.

Αξίζει όμως να σημειωθεί ότι, παρόλο που στις παραπάνω εξισώσεις για τη δημιουργία των αναπαραστάσεων (embeddings) μέσω των Δικτύων Μηχανισμών Προσοχής (GATs) οι ακμές δεν φαίνεται να παίζουν άμεσα ρόλο —καθώς η συνάρτηση δημιουργίας μηνύματος εξειδικεύεται μόνο ως συνάρτηση των κόμβων— στην πράξη, αυτό δεν αποτελεί περιορισμό. Η υλοποίηση των μηχανισμών προσοχής σε σύγχρονες βιβλιοθήκες όπως το PyTorch Geometric επιτρέπει την ενσωμάτωση των ιδιοτήτων των ακμών (edge attributes) τόσο στον υπολογισμό των συντελεστών προσοχής όσο και στη φάση δημιουργίας των μηνυμάτων.

Αυτό το χαρακτηριστικό είναι εξαιρετικά σημαντικό όταν εξετάζουμε προβλήματα όπως το Traveling Salesman Problem (TSP), στα οποία οι ακμές του γράφου φέρουν κρίσιμη σημασιολογική πληροφορία. Συγκεκριμένα, στην περίπτωση του TSP, οι ακμές αντιστοιχούν σε ευκλείδειες αποστάσεις μεταξύ κόμβων (πόλεων), και αυτή η πληροφορία είναι θεμελιώδης για την εκτίμηση της βέλτιστης διαδρομής. Μέσω της κατάλληλης τροποποίησης της συνάρτησης προσοχής ή της συνάρτησης δημιουργίας μηνύματος, οι αποστάσεις αυτές μπορούν να ενσωματωθούν στην αναπαράσταση, προσφέροντας στο GNN πρόσβαση σε σημαντική γνώση για την τοπολογία του προβλήματος. Στην πράξη, η συνάρτηση προσοχής μπορεί να τροποποιηθεί ώστε να εξαρτάται από τα χαρακτηριστικά των ακμών, δηλαδή:

όπου το διάνυσμα με τις ιδιότητες κάθε ακμής .

Συνοψίζοντας, τα Γραφονευρωνικά Δίκτυα ενισχύουν το βασικό μοντέλο των GNNs με μηχανισμούς προσοχής, επιτρέποντας στο δίκτυο να επικεντρώνεται σε πιο σημαντικούς γείτονες κατά την παραγωγή των αναπαραστάσεων. Αν και οι αρχικές εξισώσεις επικεντρώνονται κυρίως στις αναπαραστάσεις(embeddings) των κόμβων, στην πράξη οι GAT μπορούν να αξιοποιήσουν και χαρακτηριστικά των ακμών, κάτι που αποδεικνύεται κρίσιμο σε προβλήματα όπως το Traveling Salesman Problem (TSP), όπου η πληροφορία των αποστάσεων ενσωματώνεται μέσω των ακμών.

Πριν όμως περάσουμε στην πρακτική εφαρμογή των GAT για την εκτίμηση της βέλτιστης λύσης του TSP, είναι χρήσιμο να παρουσιαστούν οι διαφορετικοί τρόποι με τους οποίους τα GNNs μπορούν να χρησιμοποιηθούν στο πλαίσιο της μηχανικής μάθησης σε γράφους. Οι έννοιες της εποπτευόμενης και ημι-εποπτευόμενης μάθησης, καθώς και της επαγωγικής (inductive) και μεταγωγικής (transductive) προσέγγισης, είναι ουσιώδεις για την κατανόηση των επιλογών κατά τον σχεδιασμό ενός μοντέλου βασισμένου σε γράφους.

3.3 Κατηγορίες Εκπαίδευσης Νευρωνικών Δικτύων Γράφων

Κατά την εφαρμογή Νευρωνικών Δικτύων Γράφων(GNNs), υπάρχουν **διαφορετικοί τρόποι εκπαίδευσης**, οι οποίοι εξαρτώνται τόσο από τη **διαθεσιμότητα τιμών στις μεταβλητές στόχους(ετικέτες)** στον γράφο όσο και από τη **φύση της γενίκευσης** που επιδιώκουμε να επιτύχουμε. Η πρώτη διάκριση αφορά το **αν οι κόμβοι ή ακμές του γράφου συνοδεύονται ή όχι από ετικέτες,** οδηγώντας σε σενάρια επιβλεπόμενης ή ημι-επιβλεπόμενης μάθησης. Η δεύτερη διάκριση σχετίζεται με το **αν θέλουμε να κάνουμε προβλέψεις σε νέους, άγνωστους γράφους ή εντός του γράφου εκπαίδευσης**, κάτι που διαφοροποιεί την **επαγωγική (inductive)** από τη **μεταγωγική (transductive)** μάθηση.

Στις υποενότητες που ακολουθούν, θα εξετάσουμε αναλυτικά κάθε μία από αυτές τις διακρίσεις, με έμφαση στο πώς συνδέονται με την αρχιτεκτονική και τις δυνατότητες των GNNs και ειδικότερα των Νευρωνικών Δικτύων Γράφων με μηχανισμούς προσοχής (GATs).

3.3.1 Επιτηρούμενη και Ημι-επιτηρούμενη Μάθηση σε Γράφους

Στην εφαρμογή νευρωνικών δικτύων σε γράφους, ο τρόπος με τον οποίο εκπαιδεύεται ένα μοντέλο εξαρτάται σε μεγάλο βαθμό από το πόσες πληροφορίες είναι διαθέσιμες για την μεταβλητή που επιθυμούμε να προβλέψουμε, καθώς και από τον τύπο της πρόβλεψης που επιδιώκουμε. Στο πλαίσιο αυτό, διακρίνονται δύο βασικές μορφές μάθησης: η επιτηρούμενη (supervised) και η ημι-επιτηρούμενη (semi-supervised).

Με τον όρο "διαθέσιμη ετικέτα" εννοούμε ότι, κατά την εκπαίδευση, γνωρίζουμε ήδη την τιμή της μεταβλητής που θέλουμε να εκτιμήσουμε. Αυτό μπορεί να αφορά ένα χαρακτηριστικό κόμβου, μια ιδιότητα ακμής ή ακόμα και μια τιμή που σχετίζεται με ολόκληρο τον γράφο.

Αντίστοιχα, τα προβλήματα μάθησης σε γράφους μπορούν να αφορούν την πρόβλεψη είτε διακριτών κατηγοριών είτε συνεχών ποσοτήτων και ταξινομούνται συνήθως σε τρεις βασικές κατηγορίες, ανάλογα με το επίπεδο του γράφου στο οποίο εστιάζει το πρόβλημα:

* Σε επίπεδο κόμβων: επιδιώκεται η πρόβλεψη μιας ιδιότητας κάθε κόμβου, όπως η κατηγορία στην οποία ανήκει ή κάποια ποσοτική τιμή (π.χ. πιθανότητα ή βαθμολογία).
* Σε επίπεδο ακμών: στόχος είναι να προβλεφθεί είτε η ύπαρξη ή ο τύπος της σχέσης μεταξύ δύο κόμβων (σε προβλήματα κατηγοριοποίησης), είτε κάποιο συνεχές χαρακτηριστικό της (όπως το βάρος, η απόσταση ή το κόστος μετάβασης).
* Σε επίπεδο γράφων: πρόκειται για την εκτίμηση μιας ιδιότητας που χαρακτηρίζει ολόκληρο τον γράφο, είτε πρόκειται για διακριτή (όπως η κατηγορία ενός μορίου) είτε για συνεχή τιμή (π.χ. η συνολική ενεργειακή σταθερότητα).

Στην επιτηρούμενη μάθηση, όλες οι τιμές της μεταβλητής στόχου είναι γνωστές κατά την εκπαίδευση. Το μοντέλο εκπαιδεύεται ώστε να ελαχιστοποιήσει το σφάλμα μεταξύ των πραγματικών και των προβλεπόμενων τιμών, χρησιμοποιώντας συνήθως μια συνάρτηση κόστους όπως η "διεντροπία"(cross entropy) στην περίπτωση προβλημάτων κατηγοριοποίησης. Η αξιολόγηση γίνεται σε σύνολα δεδομένων που δεν χρησιμοποιήθηκαν στην εκπαίδευση, ώστε να εκτιμηθεί η ικανότητα γενίκευσης του μοντέλου.

Ένα παράδειγμα επιτηρούμενης μάθησης αφορά έναν γράφο άρθρων, όπου κάθε κόμβος αντιστοιχεί σε μία δημοσίευση και οι ακμές δηλώνουν παραπομπές. Αν γνωρίζουμε για όλα τα άρθρα το επιστημονικό πεδίο στο οποίο ανήκουν, μπορούμε να εκπαιδεύσουμε ένα GNN ώστε να προβλέπει την κατηγορία νέων άρθρων με βάση τις συνδέσεις τους.

Αντίθετα, στην ημι-επιτηρούμενη μάθηση μόνο ένα μέρος των κόμβων (ή ακμών ή γράφων) φέρει τιμές για τη μεταβλητή-στόχο. Το μοντέλο βασίζεται σε αυτές τις περιορισμένες πληροφορίες και ταυτόχρονα αξιοποιεί τη δομή του γράφου, ώστε να διαχύσει τη διαθέσιμη γνώση και να παράγει προβλέψεις για τα μη επισημασμένα στοιχεία. Η συνάρτηση κόστους υπολογίζεται μόνο για τα δείγματα με γνωστή τιμή στόχου, ενώ η γενίκευση επιτυγχάνεται κυρίως μέσω της τοπικής πληροφορίας και της γειτονικότητας.

Ένα παράδειγμα ημι-επιτηρούμενης μάθησης προερχόμενο από τον ακαδημαϊκό χώρο: σε έναν γράφο φοιτητών και μαθημάτων, όπου οι ακμές υποδεικνύουν εγγραφή σε κάποιο μάθημα, μπορεί να επιδιώκεται η πρόβλεψη του τελικού βαθμού. Αν γνωρίζουμε τους βαθμούς μόνο για ένα υποσύνολο φοιτητών, μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε ημι-επιτηρούμενη μάθηση ώστε να εκτιμήσουμε τους βαθμούς των υπολοίπων.

Σε κάθε περίπτωση, η μορφή μάθησης που επιλέγεται πρέπει να λαμβάνει υπόψη τόσο τη διαθεσιμότητα δεδομένων όσο και τη φύση του προβλήματος. Επιπλέον, η αξιολόγηση της προγνωστικής ικανότητας του μοντέλου γίνεται πάντα σε δεδομένα που δεν έχουν χρησιμοποιηθεί στην εκπαίδευση, ώστε να διασφαλίζεται ότι το μοντέλο μαθαίνει ουσιώδεις συσχετίσεις και όχι απλώς να απομνημονεύει περιπτώσεις.

3.3.2 Επαγωγική και Μεταγωγική Μάθηση σε Γράφους

Μια άλλη διάκριση της μηχανικής μάθησης σε δομές γράφων μπορεί να γίνει ανάλογα με τον τρόπο διάρθρωσης των δεδομένων και το είδος της γενίκευσης που επιδιώκεται από το μοντέλο. Δύο βασικές στρατηγικές σε αυτό το πλαίσιο είναι η επαγωγική (inductive) και η μεταγωγική (transductive) μάθηση.

Στην επαγωγική μάθηση, κάθε παρατήρηση αντιστοιχεί σε έναν ανεξάρτητο γράφο. Το μοντέλο εκπαιδεύεται σε ένα σύνολο τέτοιων γραφών και επιδιώκει να μάθει γενικούς κανόνες που μπορούν να εφαρμοστούν σε άγνωστους γράφους κατά την διαδικάσια εκπαίδευσης. Η γενίκευση εδώ συντελείται από το ειδικό στο γενικό: από συγκεκριμένες, γνωστές περιπτώσεις επιχειρείται η εξαγωγή ενός γενικού κανόνα. Ένα αντιπροσωπευτικό παράδειγμα είναι ένα σύστημα ανάλυσης μοριακών δομών, το οποίο εκπαιδεύεται πάνω σε ένα πλήθος από διαφορετικά μόρια (θεωρούμενα ως γράφοι) ώστε να προβλέπει την τοξικότητα ή άλλες φυσικοχημικές ιδιότητες για νέα, άγνωστα μόρια.

Αντίθετα, στη μεταγωγική μάθηση, το πρόβλημα διατυπώνεται πάνω σε έναν ενιαίο γράφο, ο οποίος περιλαμβάνει τόσο τα δεδομένα εκπαίδευσης όσο και εκείνα για τα οποία θέλουμε να πραγματοποιήσουμε προβλέψεις. Σκοπός είναι η διάδοση πληροφορίας **εντός του ίδιου γραφήματος**, δηλαδή η γενίκευση επιτελείται **από το ειδικό στο ειδικό**. Τυπικό παράδειγμα αποτελεί ένα κοινωνικό δίκτυο όπου, γνωρίζοντας τις προτιμήσεις ή ιδιότητες ενός υποσυνόλου χρηστών (κόμβων), επιδιώκουμε να εκτιμήσουμε τις αντίστοιχες ιδιότητες για τους υπόλοιπους χρήστες, αξιοποιώντας τη δομή των μεταξύ τους σχέσεων.

Ένας εμπειρικός κανόνας είναι ότι η επαγωγική μάθηση συναντάται συχνότερα σε **ε**πιτηρούμενα σενάρια, όπου η τιμή της μεταβλητής-στόχου (όπως κατηγορία, αριθμητική τιμή ή κάποιο χαρακτηριστικό) είναι γνωστή για όλα τα δείγματα του εκπαιδευτικού συνόλου. Αντίθετα, η μεταγωγική μάθηση εφαρμόζεται συνήθως σε ημι-επιτηρούμενα περιβάλλοντα, στα οποία η πληροφορία-στόχος είναι διαθέσιμη μόνο για ένα υποσύνολο των κόμβων ή ακμών, και το μοντέλο καλείται να εκμεταλλευτεί τη δομή του γράφου ώστε να τη μεταφέρει στο υπόλοιπο δίκτυο.

Αξίζει να υπογραμμιστεί ότι, παρόλο που στην επαγωγική προσέγγιση είναι συνηθισμένο το εκπαιδευτικό σύνολο να αποτελείται από πολλαπλούς, διακριτούς γράφους ως παρατηρήσεις, αυτό δεν συνιστά αυστηρό ή εγγενή περιορισμό. Σε ορισμένα σενάρια, ακόμη και ένας ενιαίος γράφος μπορεί να διαμεριστεί σε κατάλληλα υποσύνολα, διαμορφώνοντας έτσι ένα επαγωγικό πλαίσιο. Συνεπώς, ο διαχωρισμός μεταξύ επαγωγικής και μεταγωγικής μάθησης βασίζεται κυρίως στον στόχο γενίκευσης του μοντέλου, και όχι αποκλειστικά στη δομή των δεδομένων.

3.4 Μοντελοποίηση του Προβλήματος του Πλανόδιου Πωλητή με Νευρωνικό Δίκτυο

Η ενότητα αυτή επικεντρώνεται στη μοντελοποίηση του Προβλήματος του Πλανόδιου Πωλητή (Traveling Salesman Problem - TSP) με όρους θεωρίας γραφημάτων, ως βάση για την υλοποίηση ενός νευρωνικού δικτύου το οποίο επιχειρεί να εκτιμήσει βέλτιστες λύσεις. Αρχικά, περιγράφεται η αναπαράσταση του προβλήματος ως γράφος με συγκεκριμένα χαρακτηριστικά και περιορισμούς. Στη συνέχεια, παρουσιάζεται η επιλογή του τύπου του γραφήματος και των δεδομένων που τροφοδοτούν το νευρωνικό δίκτυο.

**3.4.1 Αναπαράσταση του Συμμετρικού TSP ως Μη Κατευθυνόμενος Γράφος**

Στη συγκεκριμένη εργασία μοντελοποιείται η συμμετρική εκδοχή του TSP, όπου η απόσταση μεταξύ δύο πόλεων είναι ίδια και στις δύο κατευθύνσεις. Το πρόβλημα περιγράφεται ως εξής:

* Θεωρούμε έναν μη κατευθυνόμενο πλήρες γράφο όπου:

το σύνολο των κορυφών, αντιστοιχεί στα σημεία (πόλεις) που πρέπει να επισκεφθούμε,

το σύνολο όλων των ακμών μεταξύ των κορυφών, καθώς το γράφημα είναι πλήρες.

* Κάθε κορυφή διαθέτει ως χαρακτηριστικό τις δυσδιάστατες συντεταγμένες στο επίπεδο, που αντιστοιχούν στη γεωγραφική θέση της πόλης.
* Το βάρος κάθε ακμής υπολογίζεται ως η ευκλείδεια απόσταση μεταξύ των αντίστοιχων κορυφών:
* Η λύση του προβλήματος είναι ένας Hamiltonian κύκλος, δηλαδή ένας κύκλος που επισκέπτεται κάθε κορυφή ακριβώς μία φορά και επιστρέφει στην αρχική, με στόχο τη ελαχιστοποίηση του συνολικού βάρους του κύκλου:

όπου το σύνολο όλων των Hamiltonian κύκλων στον γράφο .

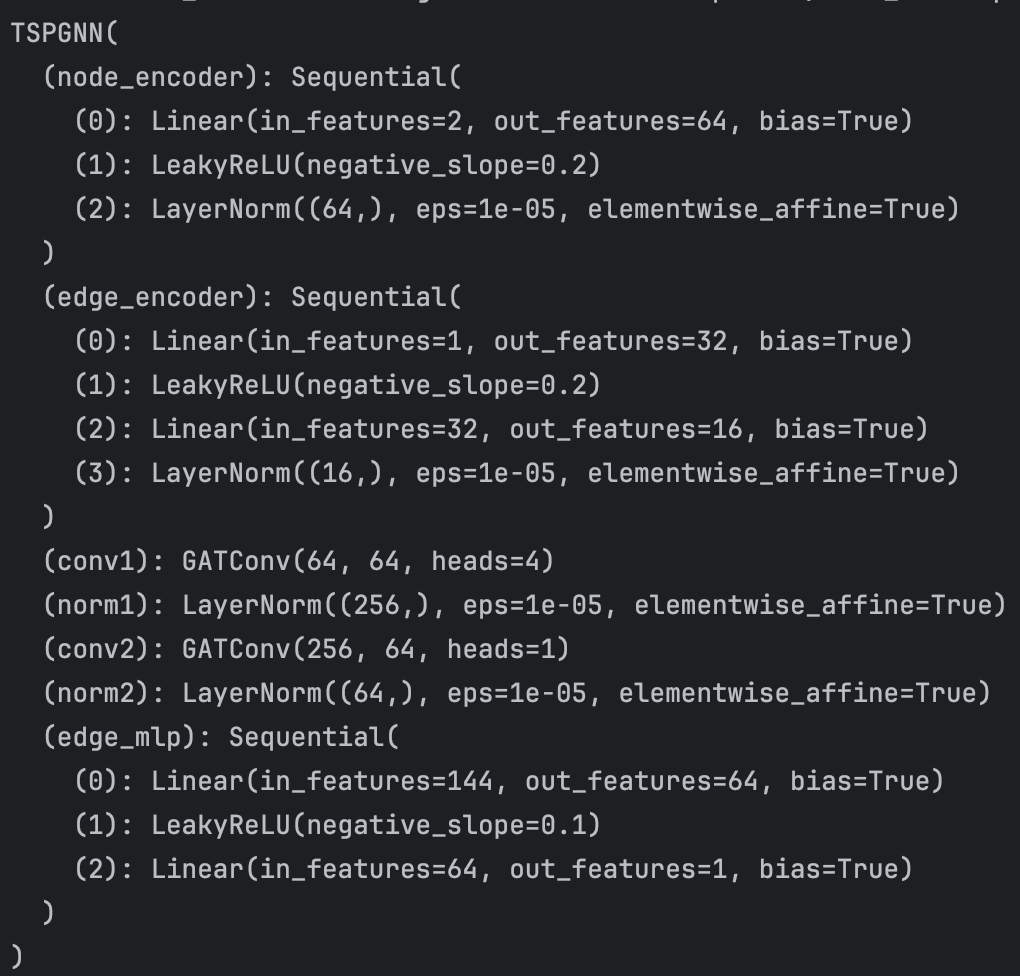
3.4.2 Νευρωνικό Δίκτυο για την Εκτίμηση της Λύσης του TSP

Για την προσέγγιση του προβλήματος του Πλανόδιου Πωλητή (TSP), σχεδιάστηκε και υλοποιήθηκε ένα Νευρωνικό Δίκτυο Γράφου(Graph Neural Network – GNN), με στόχο να προβλέψει ποιες ακμές από έναν πλήρως συνδεδεμένο γράφο είναι πιθανό να συμμετέχουν στη βέλτιστη λύση. Η βασική ιδέα είναι ότι, μέσω της κατάλληλης επεξεργασίας της σχετικής θέσης των κορυφών και την αξιοποίηση όλων των αποστάσεων μεταξύ τους, το μοντέλο μπορεί να μάθει να εκτιμά τη σημασία κάθε ακμής ως προς τη διαδρομή ελάχιστου κόστους που επισκέπτεται κάθε κορυφή ακριβώς μία φορά.

*Δομή του Νευρωνικού Δικτύου*

Η αρχιτεκτονική του δικτύου αποτελείται από τέσσερις βασικές ενότητες:

1. Κωδικοποιητής Κόμβων (Node Encoder):  
   Κάθε κόμβος στον γράφο αντιστοιχεί σε ένα γεωμετρικό σημείο στο επίπεδο, με τις συντεταγμένες του να παρέχουν πληροφορία για τη θέση του. Ο κωδικοποιητής κόμβων (node encoder) προβάλλει αυτές τις δισδιάστατες συντεταγμένες σε ένα πιο εκφραστικό, πολυδιάστατο διανυσματικό χώρο.
2. Κωδικοποιητής Ακμών (Edge Encoder):  
   Για κάθε ακμή, χρησιμοποιείται ως είσοδος η ευκλείδια απόσταση μεταξύ των δύο άκρων της. Ο **κωδικοποιητής ακμών** λειτουργεί ανάλογα με τον κωδικοποιητή κόμβων: μετατρέπει το μονοδιάστατο χαρακτηριστικό της απόστασης σε μια πλουσιότερη διανυσματική αναπαράσταση.
3. Στρώσεις Μηχανισμού Προσοχής σε Γράφους (Graph Attention Layers):  
   Ο πυρήνας του μοντέλου είναι δύο διαδοχικές στρώσεις τύπου Νευρωνικών Δικτύων Γράφων με μηχανισμούς προσοχής (GAT). Αυτές οι στρώσεις επιτρέπουν στο κάθε κόμβο να ενημερώνει τα χαρακτηριστικά του με βάση τα χαρακτηριστικά των γειτονικών του κόμβων και των ακμών που τους συνδέουν, δίνοντας μεγαλύτερη "προσοχή" (βάρος) σε εκείνους που φαίνεται να είναι πιο σημαντικοί.
4. Μονάδα Πρόβλεψης Ακμών (Edge Prediction Module): Στο τελικό στάδιο, για κάθε ακμή του γράφου συνενώνονται τα χαρακτηριστικά των δύο ακριανών κόμβων της μαζί με το ενισχυμένο χαρακτηριστικό της ίδιας της ακμής. Αυτά εισάγονται σε έναν νέο πολυεπίπεδο αντιληπτικό μηχανισμό (MLP -Multi-Layer Perceptron), ο οποίος επιστρέφει έναν αριθμό στο διάστημα [0, 1] που αντιπροσωπεύει την πιθανότητα η συγκεκριμένη ακμή να συμμετέχει στη βέλτιστη διαδρομή.



**Σχήμα 3.4 Αναπαράσταση Αρχιτεκτονικής Νευρωνικού Δικτύου στην python**

*Επεξεργασία της εξόδου του Νευρωνικού Δικτύου*

Η ροή δεδομένων έχει ως εξής:

1. Δίνεται ως είσοδος ένας πλήρες γράφος.
2. Το νευρωνικό δίκτυο υπολογίζει μια πιθανότητα για κάθε ακμή να ανήκει στη βέλτιστη λύση του TSP.
3. Οι πιθανότητες αυτές, ωστόσο, δεν εγγυώνται την παραγωγή ενός έγκυρου κύκλου Hamilton, δηλαδή μιας διαδρομής που επισκέπτεται όλους τους κόμβους ακριβώς μία φορά και επιστρέφει στο αρχικό σημείο.

Για να μετατραπούν οι ανεξάρτητες προβλέψεις του μοντέλου σε μια πλήρη και έγκυρη διαδρομή, χρησιμοποιείται ένας ευρετικός αλγόριθμος εξερεύνησης πιθανών κύκλων Hamilton(beam search).

*Beam Search: Δημιουργία Κύκλου Hamilton*

Ο beam search είναι ένας ευρετικός αλγόριθμος εξερεύνησης χώρου καταστάσεων. Ξεκινώντας από έναν αρχικό κόμβο, κατασκευάζει επαναληπτικά μερικές διαδρομές (beams), κάθε φορά προσθέτοντας έναν νέο μη επισκέψιμο κόμβο με βάση την πιθανότητα μετάβασης από τον τρέχοντα. Σε κάθε βήμα κρατάει μόνο τις καλύτερες διαδρομές (π.χ. τις 5 πιο υποσχόμενες), ώστε να περιορίσει τον υπολογιστικό φόρτο. Η διαδικασία συνεχίζεται έως ότου προκύψουν πλήρεις διαδρομές που περιλαμβάνουν όλους τους κόμβους. Τέλος, η διαδρομή με τη μεγαλύτερη συνολική πιθανότητα επιλέγεται ως η εκτιμώμενη λύση.

Ουσιαστικά, ο αλγόριθμος beam search λειτουργεί σαν ένας έξυπνος «οδηγός» που χρησιμοποιεί τις πιθανότητες του μοντέλου για να εντοπίσει βήμα προς βήμα έναν κύκλο Hamilton, χωρίς να εξετάσει εξαντλητικά όλες τις δυνατές διαδρομές.

4. Μεθοδολογία, Πειραματισμός και Αξιολόγηση

Στο παρόν κεφάλαιο παρουσιάζεται αναλυτικά η μεθοδολογία που ακολουθήθηκε για την ανάπτυξη, την εκπαίδευση και την αξιολόγηση του υβριδικού μοντέλου επίλυσης – εκτίμησης του προβλήματος του Πλανόδιου Πωλητή (Traveling Salesman Problem – TSP). Αρχικά, περιγράφεται η διαδικασία παραγωγής βέλτιστων λύσεων μέσω ενός ακέραιου γραμμικού μοντέλου βασισμένου στη διατύπωση DFJ, το οποίο υλοποιήθηκε με τη χρήση του solver linprog της βιβλιοθήκης SciPy.

Στη συνέχεια, αναλύεται η διαδικασία δημιουργίας του συνόλου εκπαίδευσης, καθώς και οι αρχές σχεδιασμού της κατανομής των δεδομένων, προκειμένου να διασφαλιστεί η ποικιλομορφία του δείγματος και η ικανότητα γενίκευσης του μοντέλου. Ακολούθως, παρουσιάζεται η διαδικασία εκπαίδευσης του Νευρωνικού Δικτύου Γράφου (Graph Neural Network – GNN), συνοδευόμενη από μια σύντομη αναφορά στα συμπεράσματα που προέκυψαν από τον πειραματισμό με διαφορετικές υπερπαραμέτρους.

Έμφαση δίνεται στην τελική φάση πρόβλεψης, όπου το νευρωνικό δίκτυο εκτιμά πιθανότητες για κάθε ακμή του γραφήματος, και στην τεχνική κατασκευής κύκλων Hamilton μέσω αλγορίθμου beam search. Τέλος, ακολουθεί σχολιασμός των αποτελεσμάτων και σύντομη περιγραφή της υλοποίησης σε Python, συνοδευόμενη από παραπομπή στο δημόσιο αποθετήριο του έργου στο GitHub.

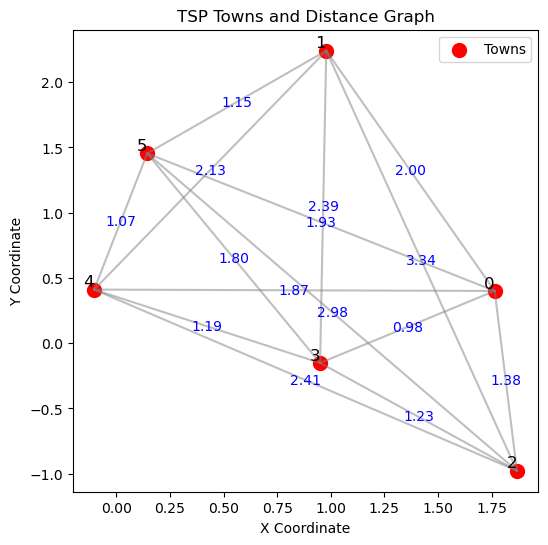
4.1 Δημιουργία Βέλτιστων Λύσεων με Ακέραιο Γραμμικό Προγραμματισμό

Η παραγωγή των βέλτιστων λύσεων για τα προβλήματα εκπαίδευσης βασίστηκε στην μαθηματική διατύπωση DFJ (Dantzig-Fulkerson-Johnson), η οποία έχει αναλυθεί στην ενότητα 2.1.2. Η υλοποίηση πραγματοποιήθηκε με τη βοήθεια της συνάρτησης linprog από τη βιβλιοθήκη **SciPy**, αξιοποιώντας την προεπιλεγμένη μέθοδο branch-and-bound για την αποκατάσταση ακεραιότητας, ρυθμίζοντας την παράμετρο integrality=1 στη συνάρτηση linprog.

Για την αποφυγή ανεπιθύμητων λύσεων με πολλαπλούς υποκύκλους (subtours), εφαρμόστηκε η τεχνική **branch - and - cut**, η οποία ενισχύει δυναμικά το μοντέλο με **περιορισμούς αποκοπής**(subtour elimination constraints) κάθε φορά που εντοπίζεται μη αποδεκτή λύση. Οι περιορισμοί αυτοί δεν είναι σταθερά προκαθορισμένοι, αλλά προστίθενται κατά την πορεία της επίλυσης, με στόχο την κατασκευή ενός έγκυρου κύκλου Hamilton.

Για την παρουσίαση της μεθοδολογίας, εξετάζεται ένα απλό παράδειγμα με **6 πόλεις**, στο οποίο παρουσιάζονται:

* Το γράφημα με τις ακμές και τις αντίστοιχες αποστάσεις (Σχήμα 4.1),
* Η τελική βέλτιστη διαδρομή και η αντίστοιχη ακολουθία επισκέψεων,
* Η μήτρα ισοτικών περιορισμών (equality constraints), η οποία διασφαλίζει πως κάθε κόμβος συμμετέχει ακριβώς σε δύο μεταβάσεις (μία εισερχόμενη και μία εξερχόμενη ακμή),
* Η μήτρα ανισοτικών περιορισμών (inequality constraints), η οποία προστέθηκε δυναμικά κατά την επίλυση για την εξάλειψη υποκύκλων,
* Απόσπασμα Python κώδικα που δημιουργεί και επιλύει το μοντέλο.

****

**Σχήμα 4.1 Πόλεις και ζεύγη**

Παράδειγμα επίλυσης με 6 πόλεις

| **Κορυφή 1** | **Κορυφή 2** | **Απόσταση** |
| --- | --- | --- |
| 0 | 1 | 2.00 |
| 0 | 2 | 1.38 |
| 0 | 3 | 0.98 |
| 0 | 4 | 1.87 |
| 0 | 5 | 1.93 |
| 1 | 2 | 3.34 |
| 1 | 3 | 2.39 |
| 1 | 4 | 2.13 |
| 1 | 5 | 1.15 |
| 2 | 3 | 1.23 |
| 2 | 4 | 2.41 |
| 2 | 5 | 2.98 |
| 3 | 4 | 1.19 |
| 3 | 5 | 1.80 |
| 4 | 5 | 1.07 |

**Πίνακας 4.1: Μετασχηματισμένα δεδομένα εισόδου TSP με 6 σημεία**

\*\* Οι αποστάσεις είναι συμμετρικές: και δεν εμφανίζονται διπλότυπα.)

*Ισοτικοί Περιορισμοί (Equality Constraints)*

Η παρακάτω μήτρα (6 x 15) εξασφαλίζει ότι κάθε πόλη συμμετέχει σε ακριβώς δύο ακμές (μία εξερχόμενη και μία εισερχόμενη). Οι στήλες αντιστοιχούν στις μεταβλητές xij​, που υποδηλώνουν εάν η ακμή μεταξύ των πόλεων *i* και *j* περιλαμβάνεται στη λύση.

| Πόλη\ Μετάβαση |  |  |  |  |  |  |  | ... |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 0 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 0 | 0 | ... | 0 |
| 1 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 1 | ... | 0 |
| 2 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | ... | 0 |
| 3 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 1 | ... | 1 |
| 4 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | ... | 1 |
| 5 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | ... | 1 |

**Πίνακας 4.2: Ισοτικοί περιορισμοί TSP του παραδείγματος του πίνακα 4.1**

*Ανισοτικοί Περιορισμοί (Inequality Constraints)*

Κατά την επίλυση, ο επιλυτής εντόπισε μια αρχική λύση που περιλάμβανε **δύο υποκύκλους**, γεγονός που ενεργοποίησε τη δυναμική προσθήκη τεμνόντων επιπέδων (cutting planes). Συγκεκριμένα, προστέθηκαν οι εξής δύο ανισοτικοί περιορισμοί:

| Περιορισμός | x01 | x02 | x03 | x04 | x05 | x12 | x13 | x14 | x15 | x23 | x24 |  | x34 | x35 | x45 |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 1 | 0 | 1 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 2 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 |

**Πίνακας 4.3: Δυναμικά εισηγμένοι ανισοτικοί περιορισμοί TSP του παραδείγματος του πίνακα 4.1**

Επεξήγηση:

* Κάθε γραμμή υποδηλώνει έναν περιορισμό της μορφής:

όπου οι μηδενικές τιμές σημαίνουν ότι η αντίστοιχη ακμή **δεν** συμμετέχει στον υποκύκλο, ενώ οι μονάδες υποδεικνύουν συμμετοχή της ακμής στον κύκλο που πρέπει να αποκοπεί.

Ερμηνεύοντας τον πίνακα που δίνετε πιο πάνω συμπεραίνουμε ότι οι κύκλοι που αφαιρέθηκαν από το σύνολο των εφικτών λύσεων όπως ορίζεται από τους υπόλοιπους περιορισμούς είναι :

0 – 2 – 3 – 0 ή 0 – 3 – 2 - 0

1 - 4 – 5 – 1 ή 1 – 5 – 4 – 1

\*Λόγω συμμετρίας μπορούμε να διαβάσουμε την ακολουθία κορυφών από τα δεξιά προς τα αριστερά.

Για τη δημιουργία του παραδείγματος χρησιμοποιήθηκε ο παρακάτω κώδικας στην γλώσσα προγραμματισμού python:



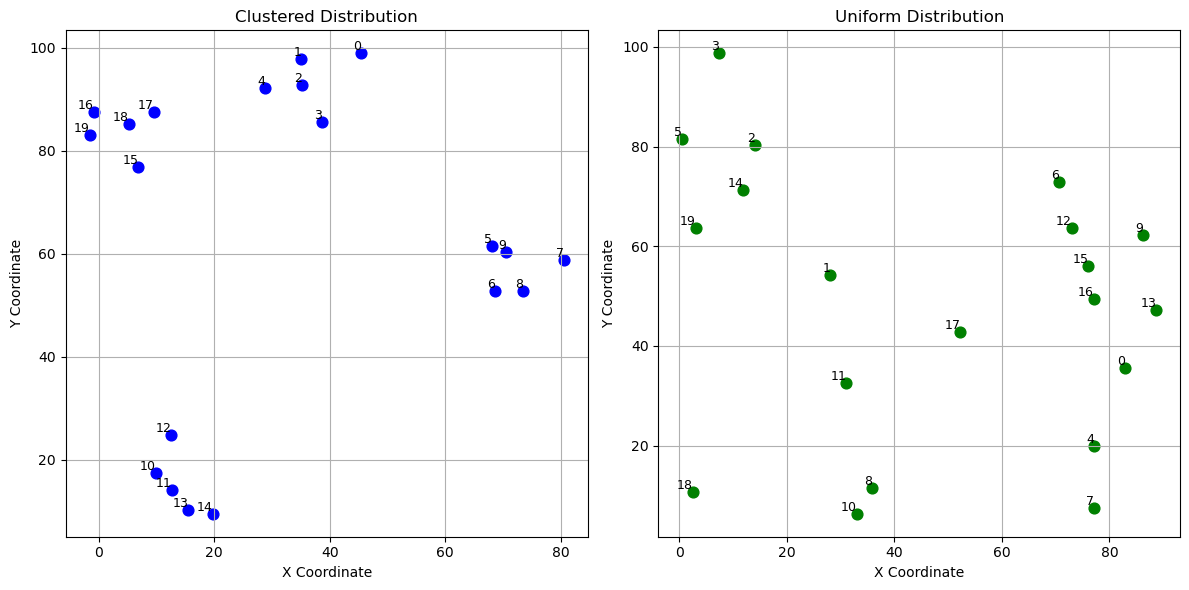
**Σχήμα 4.2: Απόσπασμα κώδικα python για το TSP του παραδείγματος του πίνακα 4.1**

4.2 Παραγωγή συνόλων δεδομένων

Η διαδικασία παραγωγής δεδομένων εκπαίδευσης αποτελεί κρίσιμο βήμα για την επιτυχία υλοποίησης του νευρωνικού δικτύου. Συνολικά παράχθηκαν 30.000 παραδείγματα του προβλήματος TSP, για διαφορετικές κατανομές γεωγραφικής τοποθέτησης των πόλεων:

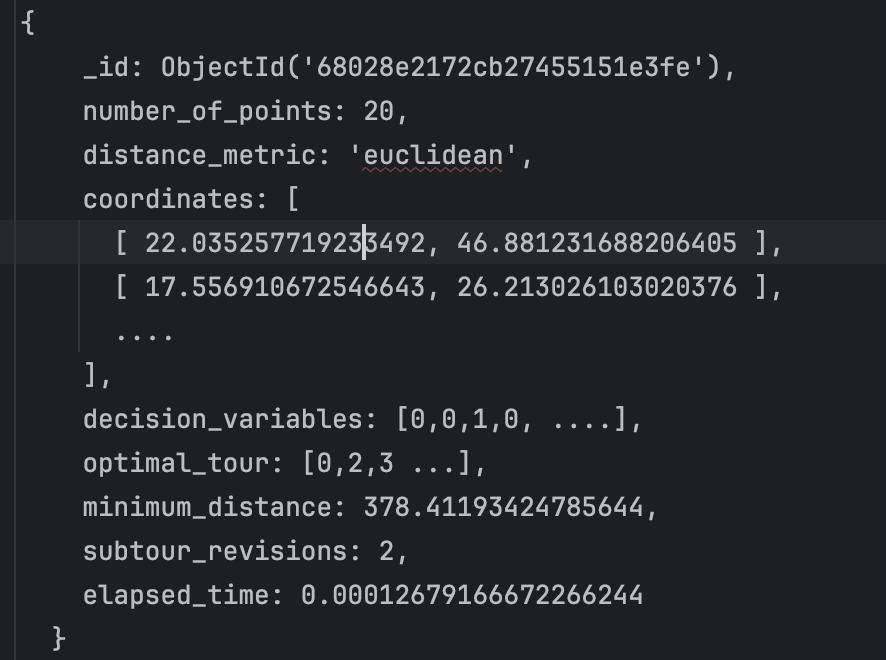
* 15.000 παραδείγματαδημιουργήθηκαν με βάση την ομοιόμορφη (uniform)κατανομή σε δισδιάστατο χώρο.
* 15.000 παραδείγματα αφορούσαν συστάδες πόλεων (clustered distribution), με αριθμό συστάδων από 2 έως 5. Η προσέγγιση αυτή προσομοιώνει σενάρια όπου οι πόλεις ομαδοποιούνται γύρω από φυσικά εμπόδια, όπως βουνά ή θάλασσες.
* Για κάθε κατανομή, δημιουργήθηκαν 5.000 παραδείγματα με αριθμό κόμβων 20, 35 και 50 αντίστοιχα.

Ο σκοπός της διαφοροποίησης αυτής ήταν να διασφαλιστεί η ποικιλομορφία στο σύνολο εκπαίδευσής και αξιολόγησης,, ενισχύοντας την ικανότητα γενίκευσης του μοντέλου και περιορίζοντας τον κίνδυνο μεροληψίας προς συγκεκριμένες τοπολογικές δομές.



**Σχήμα 4.3 ομοιόμορφης - συσταδοποιημένης κατανομής**

Κάθε παράδειγμα επιλύθηκε χρησιμοποιώντας τον ILP solver που περιεγράφηκε στην προηγούμενη ενότητα, και τα αποτελέσματα αποθηκεύτηκαν σε συλλογή MongoDB. Η επιλογή αυτή επέτρεψε την αποδοτική αποθήκευση, ανάκτηση και διαχείριση των δεδομένων.



**Σχήμα 4.4: Ενδεικτική εγγραφή λυμένου προβλήματος TSP σε συλλογή MongoDB**

Το σύνολο χωρίστηκε σε τρία υποσύνολα:

* Εκπαίδευση: 70% των δειγμάτων
* Επαλήθευση (validation): 10% των δειγμάτων κατά τη διάρκεια εκπαίδευσης
* Αξιολόγηση (test set): 20% των δειγμάτων, πλήρως άγνωστο στο μοντέλο κατά την εκπαίδευση

4.3 Εκπαίδευση Νευρωνικού Δικτύου και Παραμετροποίηση

Η εκπαίδευση του νευρωνικού δικτύου πραγματοποιείται πάνω σε σύνολο δεδομένων όπου η μεταβλητή στόχος είναι γνωστή κατά τη φάση εκπαίδευσης (labeled data). Τα δεδομένα αυτά ανακτώνται από τη βάση δεδομένων MongoDB, και στην Εικόνα 4.4 παρουσιάζεται μια τυπική εγγραφή από τη συλλογή, η οποία περιλαμβάνει τα απαραίτητα χαρακτηριστικά του γράφου εισόδου — όπως οι Ευκλείδειες αποστάσεις μεταξύ κόμβων — καθώς και τη βέλτιστη λύση που έχει προκύψει μέσω του επιλυτή που περιεγράφηκε στην Ενότητα 4.1.

Αξίζει να διευκρινιστεί ότι, καθώς το πρόβλημα διατυπώνεται ως δυαδική κατηγοριοποίηση ακμών, η μεταβλητή στόχος είναι μια ακολουθία από 0 και 1, η οποία υποδηλώνει αν κάθε ακμή ανήκει ή όχι στη βέλτιστη διαδρομή. Οι τιμές αυτές αντιστοιχούν στο πεδίο **"decision variables"** της εικόνας 4.4.

Η έξοδος του μοντέλου δεν αποτελεί μια απόλυτη επιλογή ακμών, αλλά μια **πιθανότητα** για κάθε ακμή να ανήκει στη βέλτιστη λύση. Για τη δημιουργία μιας τελικής, αποδεκτής λύσης του TSP, εφαρμόζεται ο αλγόριθμος beam search πάνω στις προβλεπόμενες πιθανότητες.

Ο στόχος του παραπάνω αλγορίθμου είναι η κατασκευή έγκυρων και κοντά στο βέλτιστο λύσεων χωρίς την εξάντληση όλων των αποδεκτών λύσεων.

Η διαδικασία εκπαίδευσης περιλαμβάνει τα εξής βασικά στάδια:

1. Ανάκτηση και απεικόνιση δεδομένων**:** Τα δεδομένα φορτώνονται από τη MongoDB (όπως φαίνεται στην εικόνα 4.4) και διαμορφώνονται καταλλήλως για είσοδο στο δίκτυο.
2. Προ-επεξεργασία δεδομένων: Κατασκευή των εισόδων του μοντέλου με βάση τα χαρακτηριστικά ακμών (όπως οι Ευκλείδειες αποστάσεις), καθώς και διαχωρισμός του συνόλου σε σύνολα εκπαίδευσης, επαλήθευσης και αξιολόγησης.
3. Ρύθμιση παραμέτρων για την εκπαίδευση: Χρήση του συνόλου επαλήθευσης για βελτιστοποίηση παραμέτρων εκπαίδευσης όπως ο ρυθμός εκμάθησης, η επιλογή του βελτιστοποιητή και της συνάρτησης κόστους καθώς και το βάρος της θετικής κατηγορίας.
4. Εκπαίδευση: Βελτιστοποίηση των παραμέτρων του νευρωνικού δικτύου ώστε να ελαχιστοποιείται η απόκλιση μεταξύ των προβλεπόμενων πιθανοτήτων και των πραγματικών τιμών της μεταβλητής στόχου, χρησιμοποιώντας κατάλληλη συνάρτηση απωλειών (loss function).

Σε αυτό το σημείο, είναι κρίσιμο να αναγνωριστεί μια σημαντική ιδιαιτερότητα του προβλήματος: η έντονη ανισορροπία στη μεταβλητή στόχο. Καθώς ο γράφος εισόδου είναι πλήρως συνεκτικός, περιέχει συνολικά    ακμές για n κόμβους. Ωστόσο, η βέλτιστη λύση περιλαμβάνει ακριβώς n ακμές (μία για κάθε μετάβαση του κύκλου Hamilton), με αποτέλεσμα οι θετικές περιπτώσεις να είναι αριθμητικά πολύ λιγότερες από τις **αρνητικές**. Συγκεκριμένα, το πλήθος των αρνητικών ακμών είναι , που αυξάνεται τετραγωνικά σε σχέση με το n.

Αυτή η ανισορροπία επηρεάζει άμεσα την αξιολόγηση της απόδοσης του μοντέλου. Ένα σύστημα μπορεί να εμφανίζει υψηλή ακρίβεια (accuracy) προβλέποντας σχεδόν όλες τις ακμές ως αρνητικές, όμως ένα τέτοιο μοντέλο αποτυγχάνει να αναγνωρίσει τις λίγες αλλά κρίσιμες θετικές περιπτώσεις. Για τον λόγο αυτό, χρησιμοποιήθηκαν μετρικές αξιολόγησης που αποτυπώνουν την ποιότητα του μοντέλου υπό συνθήκες ανισορροπίας.

Στο πλαίσιο αυτής της εργασίας, ηPR-AUC σε συνδυασμό με την Ανάκληση (Εμβαδόν Καμπύλης Precision-Recall**)** θεωρήθηκαν πιο αντιπροσωπευτικά μέτρα απόδοσης από την απλή ακρίβεια. Το εμβαδόν της καμπύλης PR - AUC αποτυπώνει τη συνολική απόδοση του μοντέλου ως προς την ισορροπία μεταξύ ακρίβειας (precision**)** και ανάκλησης (recall) για διαφορετικές  τιμές  κα-τωφλιού ταξινόμησης. Το κατώφλι ταξινόμησης είναι μια αριθμητική τιμή (συνήθως μεταξύ 0 και 1) που καθορίζει πότε μια προβλεπόμενη πιθανότητα χαρακτηρίζεται ως θετική: αν η πιθανότητα μιας ακμής να ανήκει στη βέλτιστη λύση ξεπερνά αυτό το όριο, τότε η ακμή προβλέπεται ως θετική, διαφορετικά ως αρνητική.

Μεταβάλλοντας το κατώφλι, μεταβάλλονται και οι τιμές precision και recall. Η καμπύλη Precision-Recallκαταγράφει αυτή τη μεταβολή και το PR-AUC είναι το εμβαδόν κάτω από την καμπύλη, με τιμές μεταξύ 0 και 1. Όσο μεγαλύτερο το PR-AUC, τόσο καλύτερη η ικανότητα του μοντέλου να εντοπίζει τις θετικές ακμές με λίγα ψευδώς θετικά. Σε αντίθεση με την ROC-AUC, η οποία λαμβάνει υπόψη και τις αρνητικές περιπτώσεις, η PR-AUC εστιάζει αποκλειστικά στην απόδοση του μοντέλου στην αναγνώριση της θετικής κατηγορίας — γεγονός που την καθιστά ιδανική για προβλήματα έντονης ανισορροπίας, όπως το TSP.

*Πειραματικά αποτελέσματα*

Παρακάτω παρουσιάζονται τα αποτελέσματα δύο διαφορετικών πειραμάτων εκπαίδευσης με την ίδια αρχιτεκτονική αλλά διαφορετικές συναρτήσεις κόστους. Παρακάτω παρουσιάζονται τα αποτελέσματα δύο διαφορετικών πειραμάτων εκπαίδευσης με την ίδια αρχιτεκτονική αλλά διαφορετικές συναρτήσεις κόστους. Η πρώτη περίπτωση χρησιμοποιεί τη **Focal Loss**(υλοποιημένη στο αρχείο tsp\_hybrid\_solver/gnn/gat.py), η οποία δοκιμάστηκε κυρίως για την αντιμετώπιση της ανισορροπίας μεταξύ θετικών και αρνητικών ακμών. Στο υποκείμενο πρόβλημα TSP, η αναλογία θετικών προς αρνητικές ακμές μειώνεται δραστικά καθώς αυξάνεται ο αριθμός των σημείων. Η Focal Loss δίνει προοδευτικά μεγαλύτερη βαρύτητα στα σπάνια θετικά δείγματα, προσπαθώντας να βελτιώσει την εκμάθηση των κρίσιμων ακμών. Παρά τη θεωρητική της δυνατότητα, πειραματικά απέδωσε χειρότερα αποτελέσματα.

Η δεύτερη περίπτωση χρησιμοποιεί την **BCEWithLogitsLoss** της βιβλιοθήκης PyTorch με σταθερό βάρος στις ακμές της βέλτιστης διαδρομής και, στην πράξη, απέδωσε καλύτερα αποτελέσματα όσον αφορά την ανάκληση (Recall) και την PR-AUC, που έχουν καθοριστική σημασία για το πρόβλημα του TSP.

| **Δείκτης Απόδοσης** | **Σύνολο Εκπαίδευσης** | **Σύνολο Επαλήθευσης** |
| --- | --- | --- |
| Απώλεια (Τιμή Συνάρτηση Κόστους) | 0.0078 | 0.0083 |
| Ακρίβεια (Precision) | 69.94% | 76.40% |
| Ανάκληση (Recall) | 36.49% | **24.44%** |
| ROC-AUC | 0.9384 | 0.9299 |
| PR-AUC | 0.5789 | 0.5487 |

**Πίνακας 4.4: Μέτρα απόδοσης με συνάρτηση κόστους FocalLoss**

| **Δείκτης Απόδοσης** | **Σύνολο Εκπαίδευσης** | **Σύνολο Επαλήθευσης** |
| --- | --- | --- |
| Απώλεια (Τιμή Συνάρτηση Κόστους) | 0.3376 | 0.3277 |
| Ακρίβεια (Precision) | 36.06% | 45.21% |
| Ανάκληση (Recall) | 69.21% | **62.26%** |
| ROC-AUC | 0.9249 | 0.9330 |
| PR-AUC | 0.4911 | 0.5507 |

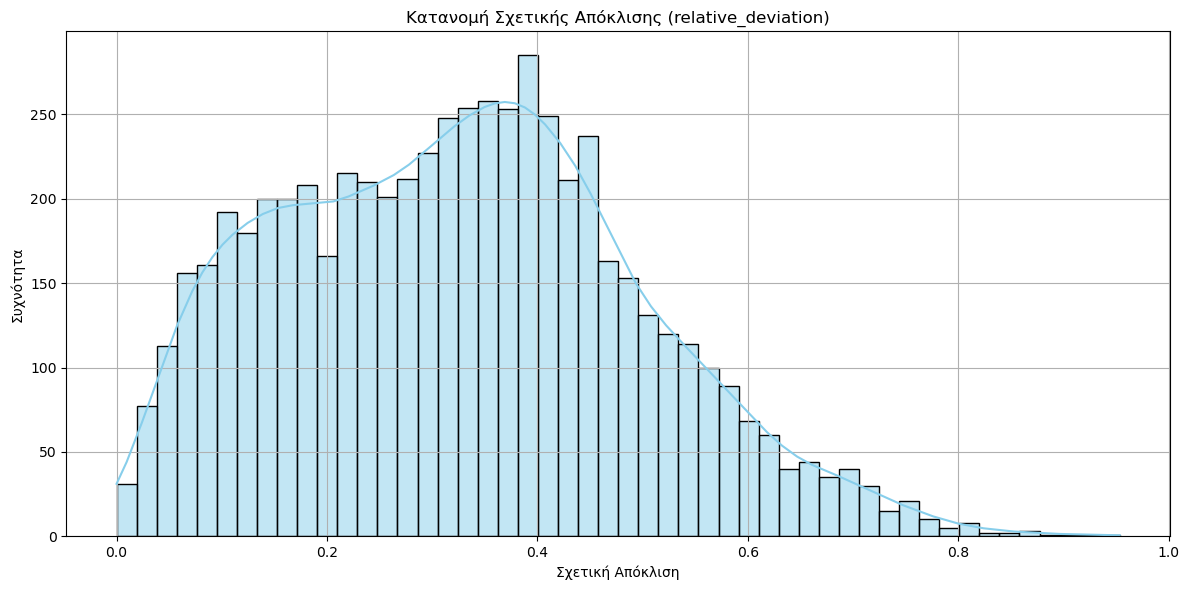
**Πίνακας 4.5: Μέτρα απόδοσης με συνάρτηση κόστους BCEWithLogitsLoss**

Υπό το πρίσμα των παραπάνω, όπου η **ανάκληση**και η **PR-AUC** έχουν καθοριστική σημασία για το πρόβλημα του TSP, επιλέχθηκε τελικά η συνάρτηση κόστους BCEWithLogitsLoss. Αξίζει να σημειωθεί ότι αλλαγές σε άλλες υπερπαραμέτρους — όπως ο ρυθμός μάθησης, ο βελτιστοποιητής ή το μέγεθος παρτίδας — δεν παρουσίασαν σημαντική διαφοροποίηση στα αποτελέσματα. Τέλος, λαμβάνοντας υπόψη την περιορισμένη δυνατότητα πειραματισμού τόσο με την αρχιτεκτονική του μοντέλου όσο και με τις παραμέτρους εκπαίδευσης, τα αποτελέσματα κρίνονται ενθαρρυντικά και δικαιολογούν τη συνέχιση της παρούσας προσέγγισης για την επίλυση του TSP.

4.4 Αξιολόγηση απόδοσης στο σύνολο ελέγχου

Μετά την ολοκλήρωση της διαδικασίας εκπαίδευσης, το μοντέλο αξιολογήθηκε σε ένα ανεξάρτητο σύνολο ελέγχου (*test set*), το οποίο περιλαμβάνει προβλήματα του TSP με διαφορετικό αριθμό κορυφών. Η απόδοση μετρήθηκε ως προς τη σχετική απόκλιση (*relative deviation*), η οποία ορίζεται ως το ποσοστό διαφοράς μεταξύ της προβλεπόμενης διαδρομής (προερχόμενης από τον συνδυασμό του νευρωνικού μοντέλου και του αλγορίθμου *beam search*) και της πραγματικά βέλτιστης λύσης που υπολογίστηκε μέσω ακέραιου γραμμικού προγραμματισμού. Χαμηλότερες τιμές σχετικής απόκλισης υποδηλώνουν πιο ακριβείς προβλέψεις.

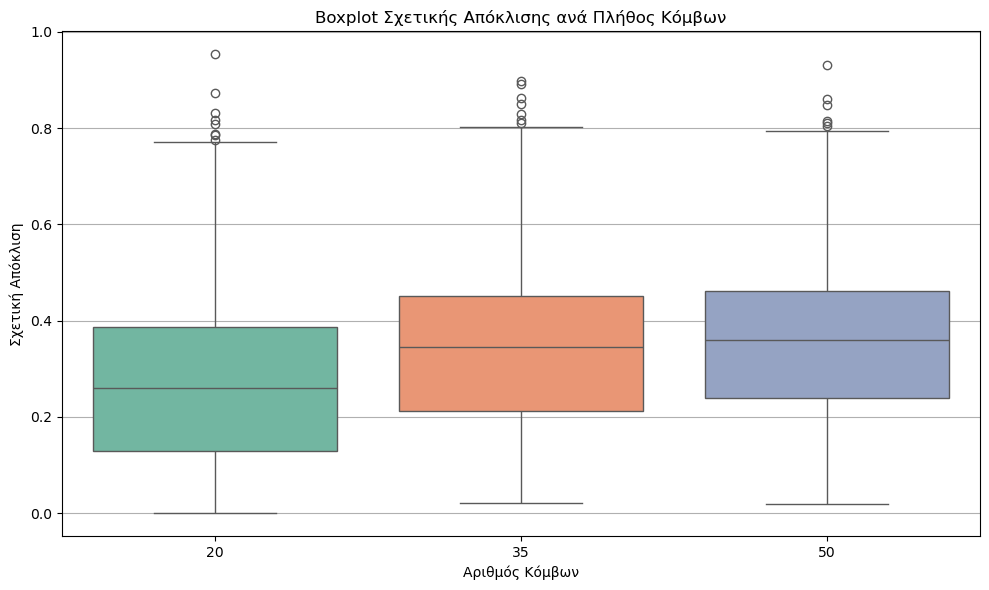
Η μέση σχετική απόκλιση στο σύνολο ελέγχου ανήλθε στο 32.49%, κάτι που καταδεικνύει ότι το μοντέλο καταφέρνει να προσεγγίσει τη βέλτιστη λύση, αλλά εξακολουθεί να υπάρχει σημαντικό περιθώριο βελτίωσης. Η **ελάχιστη** τιμή της απόκλισης ήταν 0.00%, γεγονός που δείχνει πως σε κάποιες περιπτώσεις το μοντέλο βρήκε την απολύτως βέλτιστη λύση. Ωστόσο, η **μέγιστη** απόκλιση έφτασε στο 95.30%, κάτι που φανερώνει αδυναμία γενίκευσης σε ορισμένα προβλήματα. Τα παραπάνω αποτελέσματα απεικονίζονται διαγραμματικά στο σχήμα 4.4



**Σχήμα 4.5: Κατανομή Σχετικής Απόκλισης Προβλεπόμενης-Βέλτιστης Διαδρομής**

Αναλύοντας τα αποτελέσματα ανά αριθμό κόμβων:

* Για γραφήματα με 20 κόμβους, η μέση απόκλιση ήταν 27.20%
* Για γραφήματα με 35 κόμβους, η μέση απόκλιση αυξάνεται στο 34.15%
* Για γραφήματα με 50 κόμβους, φτάνει το 36.10%



**Σχήμα 4.6: Κατανομές Σχετικής Απόκλισης ανά αριθμό κόμβων**

Η αύξηση της σχετικής απόκλισης με τον αριθμό κόμβων είναι αναμενόμενη, καθώς το πρόβλημα του TSP γίνεται εκθετικά πιο πολύπλοκο. Παράλληλα, από την **κατανομή των τιμών** που απεικονίζεται στο παρακάτω διάγραμμα, παρατηρείται μεγάλη διακύμανση στις τιμές απόκλισης, υποδεικνύοντας ότι το μοντέλο αποδίδει καλά σε ορισμένα παραδείγματα, αλλά αποτυγχάνει σε άλλα.

Η γενική εικόνα δείχνει αρκετά υποσχόμενη προσέγγιση, αλλά χρειάζεται περαιτέρω βελτιώσεις. Πιθανές κατευθύνσεις θα μπορούσαν να περιλαμβάνουν:

* Επέκταση του εύρους των δεδομένων εκπαίδευσης
* Δοκιμή διαφορετικών αρχιτεκτονικών GNN
* Αντικατάσταση ή βελτίωση του αλγορίθμου beam search

4.5 Συμπεράσματα

Η παρούσα εργασία παρουσίασε μια υβριδική προσέγγιση επίλυσης του προβλήματος του Πλανόδιου Πωλητή (TSP), συνδυάζοντας ένα νευρωνικό δίκτυο γραφήματος με μια ευρετική μέθοδο αναζήτησης. Το δίκτυο εκπαιδεύτηκε ώστε να εκτιμά ποιες συνδέσεις μεταξύ πόλεων είναι πιθανότερο να ανήκουν στη βέλτιστη διαδρομή, ενώ η διαδικασία αναζήτησης χρησιμοποιήθηκε για να συνθέσει μια έγκυρη και όσο το δυνατόν πιο καλή λύση βασισμένη σε αυτές τις εκτιμήσεις.

Επιπλέον, η εργασία αυτή συνοδεύεται και από την υλοποίηση ενός επιλύτη βασισμένου στον Ακέραιο Γραμμικό Προγραμματισμό (ILP), μέσω του οποίου υπολογίστηκαν οι πραγματικά βέλτιστες λύσεις. Παρότι οι ILP-solver προσφέρουν ακρίβεια, καθίστανται αναποτελεσματικοί ή και αδύνατο να εφαρμοστούν σε προβλήματα μεγάλου μεγέθους λόγω του εκθετικού χρόνου επίλυσης. Ο απώτερος στόχος αυτής της μελέτης είναι να αναπτυχθεί μια μεθοδολογία εκτίμησης που να μπορεί να λειτουργεί σε τέτοιες περιπτώσεις, προσφέροντας λύσεις σε προβλήματα όπου οι παραδοσιακοί επιλυτές αποτυγχάνουν λόγω υπολογιστικής πολυπλοκότητας.

Τα πειραματικά αποτελέσματα ανέδειξαν ένα υποσχόμενο μοντέλο εκτίμησης της βέλτιστης λύσης, με μέση σχετική απόκλιση στο 33.66% ενώ σε κάποιες σπάνιες περιπτώσεις την εντόπισε ακριβώς. Πρέπει επίσης να σημειωθεί ότι η ακριβής πρόβλεψη της βέλτιστης διαδρομής είναι εξαιρετικά δύσκολη και σε καμία περίπτωση δεν μπορεί να θεωρηθεί τυχαίο καθώς ο χώρος των εφικτών λύσεων μεγεθύνετε παραγοντικά σε σχέση με τον αριθμό των κορυφών. Ωστόσο, υπήρξε σημαντική διακύμανση στις προβλέψεις, ενώ η απόδοση μειωνόταν σταθερά με την αύξηση του αριθμού κόμβων. Αυτό ήταν αναμενόμενο, αλλά ταυτόχρονα υποδεικνύει ότι απαιτείται περαιτέρω ενίσχυση της ικανότητας γενίκευσης του μοντέλου.

Τέλος, λόγω περιορισμένων υπολογιστικών πόρων, τα σύνολα εκπαίδευσης και ελέγχου περιορίστηκαν σε γράφους από 20 έως 50 κορυφές. Παρά τον περιορισμό αυτό, τα αποτελέσματα δείχνουν υποσχόμενα και ίσως με καλύτερη αρχιτεκτονική και επαρκείς πόρους, ένα νευρωνικό δίκτυο που εκπαιδεύεται σε μικρά γραφήματα ίσως δυνητικά να μπορεί να γενικεύσει και σε μεγαλύτερα, ανοίγοντας το δρόμο για πρακτικές εφαρμογές σε μεγάλης κλίμακας προβλήματα δρομολόγησης. Να σημειωθεί επίσης ότι για να διατηρηθεί ο χρόνος υπολογισμού σε αποδεκτά επίπεδα, περιορίστηκε

* το πλήθος των πιθανών διαδρομών που εξετάζονται κατά τη διάρκεια της αναζήτησης beam search
* o πειραματισμός με διαφορετικές παραλλαγές του νευρωνικού δικτύου και με τις παραμέτρους εκπαίδευσης.

Μελλοντικές Κατευθύνσεις

Η εργασία αυτή θέτει τις βάσεις για περαιτέρω ερευνητική διερεύνηση και εξέλιξη. Πιθανές κατευθύνσεις για μελλοντική εργασία περιλαμβάνουν:

* Δοκιμή διαφορετικών παραλλαγών νευρωνικών δικτύων: Η χρήση εναλλακτικών μοντέλων μπορεί να οδηγήσει σε καλύτερη κατανόηση της δομής του προβλήματος και σε ακριβέστερες εκτιμήσεις.
* Καλύτερη παραμετροποίηση και ρύθμιση της εκπαίδευσης: Πιο στοχευμένη επιλογή υπερπαραμέτρων (learning rate, batch size κ.ά.) μπορεί να ενισχύσει σημαντικά την απόδοση του μοντέλου.
* Πλουσιότερο και μεγαλύτερο σύνολο δεδομένων: Η εκπαίδευση σε μεγαλύτερο όγκο δεδομένων και η ενσωμάτωση πιο πολύπλοκων παραδειγμάτων (με περισσότερες πόλεις ή διαφορετικές κατανομές) αναμένεται να βελτιώσει την ικανότητα γενίκευσης.
* Εναλλακτική μετα-επεξεργασία των προβλέψεων: Η έξοδος του νευρωνικού δικτύου μπορεί να αξιοποιηθεί με άλλους τρόπους για την κατασκευή διαδρομών, πέραν του beam search, ίσως με τη χρήση διαφορετικών ευρετικών αλγορίθμων.
* Βελτίωση ή αντικατάσταση του beam search: Ο επανασχεδιασμός της διαδικασίας αναζήτησης ή η προσαρμογή του σε δυναμικά χαρακτηριστικά του προβλήματος μπορεί να οδηγήσει σε πιο ποιοτικές και σταθερές λύσεις.

Ολόκληρη η υλοποίηση του κώδικα της παρούσας εργασίας είναι διαθέσιμη στο GitHub:  
https://github.com/I-Mougios/tsp-ilp-gnn-thesis

**Βιβλιογραφικές Αναφορές**

Algorithm-Wiki (2024). *Dantzig-Fulkerson-Johnson (DFJ) formulation (Minimum TSP: The Traveling-Salesman Problem)*. MIT CSAIL. Διαθέσιμο στο: https://algorithm-wiki.csail.mit.edu/wiki/Dantzig-Fulkerson-Johnson\_%28DFJ%29\_formulation\_%28Minimum\_TSP\_The\_Traveling-Salesman\_Problem%29 (πρόσβαση: 19 Αυγούστου 2025).

Miller, C. E., Tucker, A. W., & Zemlin, R. A. (1960). *Integer programming formulation of traveling salesman problems*. Journal of the ACM, 7(4), 326–329. https://doi.org/10.1145/321043.321046

Dantzig, G. B., Fulkerson, D. R., & Johnson, S. M. (1954). *Solution of a large-scale traveling-salesman problem*. Journal of the Operations Research Society of America, 2(4), 393–410. https://doi.org/10.1287/opre.2.4.393

Huang, L., Chen, X., Huo, W., Wang, J., Zhang, F., Bai, B., & Shi, L. (2021). *Branch and Bound in Mixed Integer Linear Programming Problems: A Survey of Techniques and Trends*. arXiv:2111.06257.

Department of Computer Science, University of Copenhagen. Retrieved from [https://web.archive.org/web/20150923214803/http://www.diku.dk/OLD/undervisning/2003e/datV-optimer/JensClausenNoter.pdf](https://web.archive.org/web/20150923214803/http:/www.diku.dk/OLD/undervisning/2003e/datV-optimer/JensClausenNoter.pdf)

G. Kobeaga, M. Merino, J. A. Lozano (2020). *On Solving Cycle Problems with Branch-and‑Cut: Extending Shrinking and Exact Subcycle Elimination Separation Algorithms*. arXiv:2004.14574

Balcan, M.-F., Dick, T., Sandholm, T., & Vitercik, E. (2022). *Cutting Planes via Machine Learning*. arXiv:2204.07312.

Paul, M., Barzilay, R., & Jaakkola, T. (2020). *Combinatorial Optimization with Graph Convolutional Networks and Guided Tree Search*. arXiv:2004.14574.

Wu, Z., Pan, S., Chen, F., Long, G., Zhang, C., & Yu, P. S. (2019). A Comprehensive Survey on Graph Neural Networks. *arXiv:1812.08434*.

Zhou, J., Cui, G., Hu, S., Zhang, Z., Yang, C., Liu, Z., Wang, L., Li, C., & Sun, M. (2018). Graph Neural Networks: A Review of Methods and Applications. arXiv:1812.08434.

Velicković, P., Cucurull, G., Casanova, A., Romero, A., Liò, P., & Bengio, Y. (2018). *Graph Attention Networks* (ICLR). arXiv preprint arXiv:1710.10903.