

Resolver el problema del Steiner Tree con Simulated annealing

Felipe Urrutia Vargas, Camilo Carvajal Reyes

Departamento de Ingeniería Matemática,
Universidad de Chile

Simulación Estocástica: Teoría y Laboratorio

Contenidos

Steiner Tree &
Simulated
annealing

Introducción

Definición

Formulación

Simulated annealing

Algoritmo

Estados y
transiciones

Pseudo-algoritmo

Implementación y
variantes

Resultados

Data-test

Validación

Gridsearch

Discusión

Llegada al óptimo

Conclusiones

Bibliografía

1 Introducción

- Definición
- Formulación
- Simulated annealing

2 Algoritmo

- Estados y transiciones
- Pseudo-algoritmo
- Implementación y variantes

3 Resultados

- Data-test
- Validación
- Gridsearch

4 Discusión

- Llegada al óptimo
- Conclusiones

Contenidos

Steiner Tree &
Simulated
annealing

Introducción

Definición

Formulación

Simulated annealing

Algoritmo

Estados y
transiciones

Pseudo-algoritmo

Implementación y
variantes

Resultados

Data-test

Validación

Gridsearch

Discusión

Llegada al óptimo

Conclusiones

Bibliografía

1 Introducción

- Definición
- Formulación
- Simulated annealing

2 Algoritmo

- Estados y transiciones
- Pseudo-algoritmo
- Implementación y variantes

3 Resultados

- Data-test
- Validación
- Gridsearch

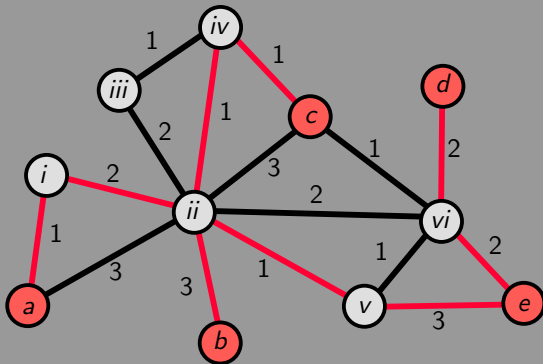
4 Discusión

- Llegada al óptimo
- Conclusiones

Introducción: Definición del problema

Definición (Steiner tree)

Para un grafo $G = (V, E)$, vertices terminales $S \subset V$ y pesos $w : E \rightarrow \mathbb{R}_+$, se desea encontrar un arbol T de peso minimo que contenga a lo menos los vertices en S , donde el peso del arbol T es la suma de los pesos de cada una de sus aristas.



Introducción: Formulación clásica

Steiner Tree & Simulated annealing

Introducción

Definición

Formulación

Simulated annealing

Algoritmo

Estados y transiciones

Pseudo-algoritmo

Implementación y variantes

Resultados

Data-test

Validación

Gridsearch

Discusión

Llegada al óptimo

Conclusiones

Bibliografía

Problema (Steiner tree)

$$(P) \quad \begin{cases} \text{minimizar} & w(T) = \sum \{w(e) : e \in E[T]\} \\ \text{s.a.} & T \text{ es árbol y } S \subseteq V[T] \end{cases}$$

Desafíos

- Conjunto factible

Métodos clásicos

- Programación lineal mixta

Introducción: Simulated annealing

Steiner Tree & Simulated annealing

Introducción

Definición

Formulación

Simulated annealing

Algoritmo

Estados y transiciones

Pseudo-algoritmo

Implementación y variantes

Resultados

Data-test

Validación

Gridsearch

Discusión

Llegada al óptimo

Conclusiones

Bibliografía

Técnica (Simulated annealing)

$$(A) \quad \begin{cases} \text{minimizar} & H(x) \\ \text{s.a.} & x \in \Lambda \end{cases}$$

Consideraciones

- $|\Lambda|$ es demasiado grande

Estados y transiciones

$$x, y \in \Lambda, \quad x \sim y \Leftrightarrow x \text{ es vecino de } y$$

Esquema

$$\pi_x \propto e^{-\beta H(x)}, \quad R(x, y) = e^{-\beta(H(y) - H(x))}$$

Contenidos

Steiner Tree & Simulated annealing

Introducción

Definición

Formulación

Simulated annealing

Algoritmo

Estados y transiciones

Pseudo-algoritmo

Implementación y variantes

Resultados

Data-test

Validación

Gridsearch

Discusión

Llegada al óptimo

Conclusiones

Bibliografía

1 Introducción

- Definición
- Formulación
- Simulated annealing

2 Algoritmo

- Estados y transiciones
- Pseudo-algoritmo
- Implementación y variantes

3 Resultados

- Data-test
- Validación
- Gridsearch

4 Discusión

- Llegada al óptimo
- Conclusiones

Algoritmo: Estados y transiciones

Steiner Tree & Simulated annealing

Introducción

Definición

Formulación

Simulated annealing

Algoritmo

Estados y transiciones

Pseudo-algoritmo

Implementación y variantes

Resultados

Data-test

Validación

Gridsearch

Discusión

Llegada al óptimo

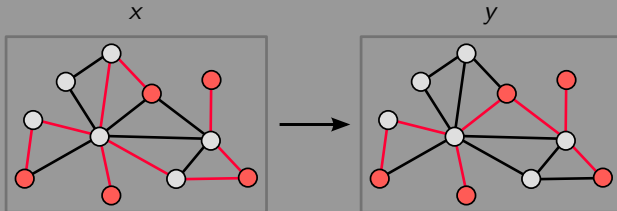
Conclusiones

Bibliografía

Estados

$$x \in \Lambda \Leftrightarrow x \text{ es arbol y } S \subseteq V[x]$$

Transiciones



Algoritmo: Pseudo-algoritmo

Steiner Tree &
Simulated
annealing

Introducción

Definición

Formulación

Simulated annealing

Algoritmo

Estados y
transiciones

Pseudo-algoritmo

Implementación y
variantes

Resultados

Data-test

Validación

Gridsearch

Discusión

Llegada al óptimo

Conclusiones

Bibliografía

Referencia



C. Schiemangk

Design, analysis and implementation of thermodynamically motivated simulation for optimization of subgraphs

Springer, Berlin, Heidelberg: 91, 851–820; 1986.

[DOI: 10.1007/BFb0043908](https://doi.org/10.1007/BFb0043908)

Algoritmo: Pseudo-algoritmo

Steiner Tree &
Simulated
annealing

Introducción

Definición

Formulación

Simulated annealing

Algoritmo

Estados y
transiciones

Pseudo-algoritmo

Implementación y
variantes

Resultados

Data-test

Validación

Gridsearch

Discusión

Llegada al óptimo

Conclusiones

Bibliografía

Elegir y remover una arista al azar

Algoritmo: Pseudo-algoritmo

Steiner Tree &
Simulated
annealing

Encontrar y agregar un camino conector

Introducción

Definición

Formulación

Simulated annealing

Algoritmo

Estados y
transiciones

Pseudo-algoritmo

Implementación y
variantes

Resultados

Data-test

Validación

Gridsearch

Discusión

Llegada al óptimo

Conclusiones

Bibliografía

Algoritmo: Pseudo-algoritmo

Steiner Tree &
Simulated
annealing

Podar ciclos y ramas

Introducción

Definición

Formulación

Simulated annealing

Algoritmo

Estados y
transiciones

Pseudo-algoritmo

Implementación y
variantes

Resultados

Data-test

Validación

Gridsearch

Discusión

Llegada al óptimo

Conclusiones

Bibliografía

Algoritmo: Implementación y variantes

Steiner Tree & Simulated annealing

Introducción

Definición

Formulación

Simulated annealing

Algoritmo

Estados y transiciones

Pseudo-algoritmo

Implementación y variantes

Resultados

Data-test

Validación

Gridsearch

Discusión

Llegada al óptimo

Conclusiones

Bibliografía

Encontrar un camino conector

- Cola, *Breadth-first search* (BFS)
- Pila, *Depth-first search* (DFS)
- Conjunto, Random
- ★ Variante greedy, elegir aristas según el peso

Elegir y remover más de una arista

- Eliminación de vertices no terminales de grado 2 (c/r al árbol factible)

Poda de ciclos y ramas

- Algoritmo Kruskal, encuentra el arbol de peso minimo
- Podar sub-ramas con hojas no terminales

Contenidos

Steiner Tree & Simulated annealing

Introducción

Definición

Formulación

Simulated annealing

Algoritmo

Estados y transiciones

Pseudo-algoritmo

Implementación y variantes

Resultados

Data-test

Validación

Gridsearch

Discusión

Llegada al óptimo

Conclusiones

Bibliografía

1 Introducción

- Definición
- Formulación
- Simulated annealing

2 Algoritmo

- Estados y transiciones
- Pseudo-algoritmo
- Implementación y variantes

3 Resultados

- Data-test
- Validación
- Gridsearch

4 Discusión

- Llegada al óptimo
- Conclusiones

Resultados: Data-test

Steiner Tree &
Simulated
annealing

Testset I080:

Grafos dispersos generados de manera aleatoria. Todos poseen 80 vértices.

Id	V	E	T	DC	tiempo	Opt
i080-001	80	120	6	P	s	1787
i080-011	80	350	6	P	s	1479
i080-021	80	3160	6	P	s	1175
i080-031	80	160	6	P	s	1570
i080-041	80	632	6	P	s	1276
i080-101	80	120	8	P	s	2608
i080-111	80	350	8	NP	s	2051
i080-121	80	3160	8	P	s	3158
i080-131	80	160	8	P	s	2284
i080-141	80	632	8	P	s	1788
i080-201	80	120	16	P	s	4760
i080-231	80	160	16	P	s	4354
i080-301	80	120	20	P	s	5519

Introducción

Definición

Formulación

Simulated annealing

Algoritmo

Estados y
transiciones

Pseudo-algoritmo

Implementación y
variantes

Resultados

Data-test

Validación

Gridsearch

Discusión

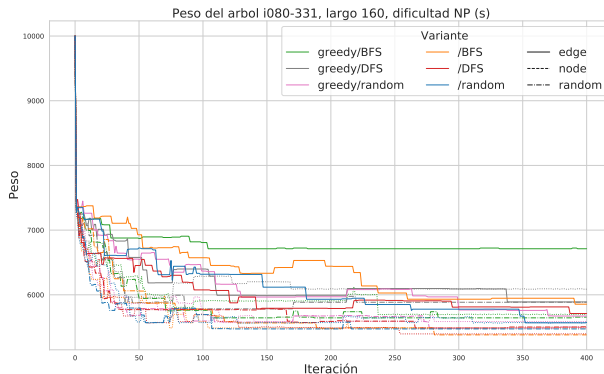
Llegada al óptimo

Conclusiones

Bibliografía

Resultados: Validacion

Evaluación preliminar: evolución del peso encontrado para distintas implementaciones y variantes



Steiner Tree &
Simulated
annealing

Introducción

Definición

Formulación

Simulated annealing

Algoritmo

Estados y
transiciones

Pseudo-algoritmo

Implementación y
variantes

Resultados

Data-test

Validación

Gridsearch

Discusión

Llegada al óptimo

Conclusiones

Bibliografía

Resultados: Gridsearch

Steiner Tree & Simulated annealing

Introducción

Definición

Formulación

Simulated annealing

Algoritmo

Estados y transiciones

Pseudo-algoritmo

Implementación y variantes

Resultados

Data-test

Validación

Gridsearch

Discusión

Llegada al óptimo

Conclusiones

Bibliografía

Metodología

Consideramos una sucesión β de la siguiente forma:

$$\beta_n = an^b, \quad \text{parametros } a > 0 \text{ y } b \geq 0$$

- a controla la “facilidad para aceptar” nuevos estados
En la práctica a se escala por la mediana de los pesos del grafo.
Para un grafo G esto es:

$$a = a_0 \cdot \left(\frac{1}{\text{mediana}(\{w(i) : i \in E(G)\})} \right)$$

- b controla la tasa de “enfriamiento”

Resultados: Gridsearch

Steiner Tree &
Simulated
annealing

Introducción

Definición

Formulación

Simulated annealing

Algoritmo

Estados y
transiciones

Pseudo-algoritmo

Implementación y
variantes

Resultados

Data-test

Validación

Gridsearch

Discusión

Llegada al óptimo

Conclusiones

Bibliografía

Metodología

Tomamos los siguientes valores para la función β

$$a_0 \in \{0.5, 0.875, 1.25, 1.625, 2.0\}$$

$$b \in \{0.0, 0.25, 0.5, 0.75, 1.0\}$$

Otras especificaciones:

- Uniformes:
 - Se utilizan 10 conjuntos de uniformes distintas
 - Las mismas 10 son usadas sistemáticamente para todas las simulaciones
- Implementaciones:
 - Eliminación de un nodo
 - Depth first search (DFS)
- Número de iteraciones: 3000 pasos

Resultados: Gridsearch

Se muestra el error (peso encontrado menos peso promedio) normalizado para la grilla de parámetros. Se itera sobre el conjunto de grafos considerados.

Steiner Tree &
Simulated
annealing

Introducción

Definición

Formulación

Simulated annealing

Algoritmo

Estados y
transiciones

Pseudo-algoritmo

Implementación y
variantes

Resultados

Data-test

Validación

Gridsearch

Discusión

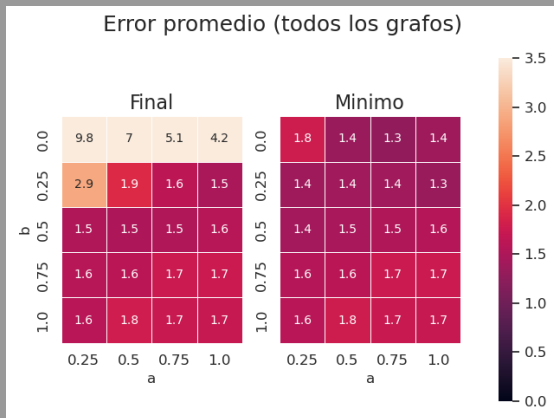
Llegada al óptimo

Conclusiones

Bibliografía

Resultados: Gridsearch

Tomando todos los grafos y todas las uniformes, este es el promedio de errores para la grilla



Steiner Tree &
Simulated
annealing

Introducción

Definición

Formulación

Simulated annealing

Algoritmo

Estados y
transiciones

Pseudo-algoritmo

Implementación y
variantes

Resultados

Data-test

Validación

Gridsearch

Discusión

Llegada al óptimo

Conclusiones

Bibliografía

Resultados: Resumen

Steiner Tree &
Simulated
annealing

A modo de comparación, se comparan los tiempos de llegada al óptimo con un algoritmo de programación lineal mixta

Introducción

Definición

Formulación

Simulated annealing

Algoritmo

Estados y
transiciones

Pseudo-algoritmo

Implementación y
variantes

Resultados

Data-test

Validación

Gridsearch

Discusión

Llegada al óptimo

Conclusiones

Bibliografía

Id	dens.	a	b	iter (N°)	tiempo (s)		
					min	total	PLM
001	0.038	0.75	1	75.25	0.601	4.925	0.725
021	1	1	0.25	253.5	7.007	20.55	6.659
031	0.051	0.5	0.25	48.6	0.393	4.534	0.167
041	0.2	1	0.75	40	0.486	10.232	1.239
101	0.038	0.5	0.25	111.9	1.57	8.672	0.191
111	0.111	0.75	0.5	30	0.331	5.773	16.074
121	1	0.25	0.5	215	6.508	21.243	199.644
131	0.051	0.75	0.5	15	0.156	6.72	0.352
141	0.2	0.25	0.5	136	2.543	12.072	38.082
201	0.038	1	0.5	116.3	2.007	12.643	2.713
231	0.051	0.25	0.25	367.5	8.238	13.311	735.292
301	0.038	0.75	1	102	1.861	8.405	110.059

Contenidos

Steiner Tree & Simulated annealing

Introducción

Definición

Formulación

Simulated annealing

Algoritmo

Estados y transiciones

Pseudo-algoritmo

Implementación y variantes

Resultados

Data-test

Validación

Gridsearch

Discusión

Llegada al óptimo

Conclusiones

Bibliografía

1 Introducción

- Definición
- Formulación
- Simulated annealing

2 Algoritmo

- Estados y transiciones
- Pseudo-algoritmo
- Implementación y variantes

3 Resultados

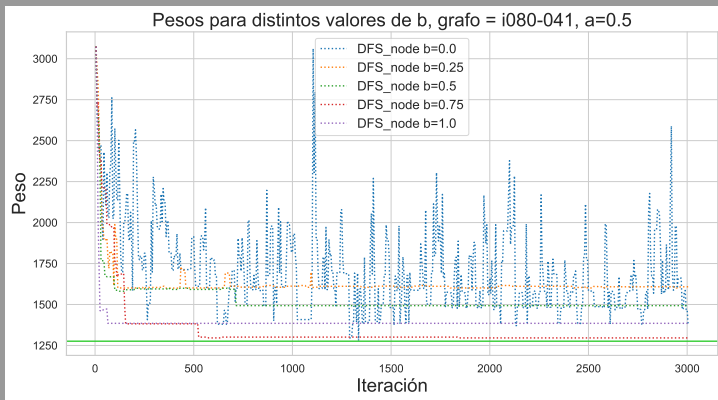
- Data-test
- Validación
- Gridsearch

4 Discusión

- Llegada al óptimo
- Conclusiones

Discusión: Llegada al óptimo

- Ciertas combinaciones de hiper-parámetros consiguen el valor optimal al explorar libremente los posibles estados.
- Por otro lado, hiper-parámetros más conservadores descienden a buenos mínimos locales



Conclusiones

Steiner Tree & Simulated annealing

Introducción

Definición

Formulación

Simulated annealing

Algoritmo

Estados y transiciones

Pseudo-algoritmo

Implementación y variantes

Resultados

Data-test

Validación

Gridsearch

Discusión

Llegada al óptimo

Conclusiones

Bibliografía

Aspectos positivos

- Se descubre una manera efectiva de usar annealing entre diversas opciones, en un contexto altamente no-convexo.
- El algoritmo ofrece, en muchos casos, ventajas de tiempo con respecto a algoritmos deterministas.

Aspectos a considerar

- No hay puntos de la grilla que funcionen bien para todos los grafos
- La elección de hiper-parámetros debe hacerse de manera contextualizada.

Bibliografía

Steiner Tree & Simulated annealing

Introducción

Definición

Formulación

Simulated annealing

Algoritmo

Estados y
transiciones

Pseudo-algoritmo

Implementación y
variantes

Resultados

Data-test

Validación

Gridsearch

Discusión

Llegada al óptimo

Conclusiones

Bibliografía



C. Schiemangk

Design, analysis and implementation of thermodynamically motivated simulation for optimization of subgraphs

Springer, Berlin, Heidelberg: 91, 851–820; 1986.

DOI: [10.1007/BFb0043908](https://doi.org/10.1007/BFb0043908)



C. Duin

Steiner Problems in Graphs

University of Amsterdam; 1993.

URL: <http://steinlib.zib.de>