Aufgabe 1: Weniger krumme Touren

Teilnahme-ID: 65336

Bearbeiter/-in dieser Aufgabe:
Vor- und Nachname

16. April 2023

Inhaltsverzeichnis

1 Lösungsidee

1.1 Annäherung einer optimalen Lösung

Das Problem wird mit Hilfe des Simulated Annealing [Kirkpatrick et al., 1983] gelößt.

procedure SIMULATED ANNEALING(Startlösung S, Temperatur T_0, Abkühlkoeffizient α, Minimale Temperatur T_{min})
  $S_{Beste} \leftarrow S$
  $C_{Beste} \leftarrow C(S)$
  $T \leftarrow T_0$
  while $T > T_{min}$ **do**
    $S_{Neu} \leftarrow$ Nachbarlösung von S
    $C_{Neu} \leftarrow C(S_{Neu})$
    if $C_{Neu} < C_{Beste}$ **then**
      $C_{Beste} \leftarrow C_{Neu}$
      $S_{Beste} \leftarrow S_{Neu}$
    end if
    $r \leftarrow$ Zufallszahl aus $[0, 1]$
    if $r < \exp(\frac{C(S)-C_{Neu}}{T})$ **then**
      $S \leftarrow S_{Neu}$
    end if
    $T \leftarrow \alpha T$
  end while
  return S_{Beste}
end procedure

Die grundlegende Idee des Algorithmus ist, das Problem als ein sich abkühlendes thermodynamisches System zu modellieren, wobei die Kosten für eine Lösung der Energie des Systems entspricht. Die Wahrscheinlichkeit, in einen anderen Zustand überzugehen, ist dann abhängig von der Energiedifferenz. Die

auch von der Temperatur abhängige Wahrscheinlichkeit ist von der Boltzmann-Verteilung inspiriert. Das thermodynamische System befindet sich nach dem Abkühlen in einem energiearmen Zustand, genauso sollte der Algorithmus eine möglichst kostengüstige Lösung finden. Mit $T \to 0$ handelt es sich bei dieser Methode um einen einfachen Bergsteigeralgorithmus, der immer eine kostengüstigere benachbarte Lösung auswählt. Dieser kann leicht in lokalen Minima stecken bleiben, also bei Lösungen, die keine besseren Nachbarn haben, aber nicht das globale Minimum sind. Um das zu vermeiden kann Simulated Annealing durch die temperatur- und kostendifferenzabhängige Übergangswahrscheinlichkeit anfangs lokale Minima überwinden.
Gültige Lösungen sind hier alle möglichen Permutationen von N Landeplätzen. Die Beschränkung, dass eine Lösung keine Spitzen Winkel beinhalten darf, wird über die Kostenfunktion $C(S)$ kodiert. Die Kostenfunktion setzt sich zusammen aus der Länge des von S gebildeten Pfades und einer Gebühr $g \in \mathbb{R}$ für jeden spitzen Winkel. g ist eine obere Schranke der Länge eines Pfades, wodurch für jeden Pfad S' mit weniger spitzen Winkeln als S gilt $C(S) > C(S')$. Diese obere Schranke erschließt sich aus der Überlegung, dass eine mögliche Lösung mindestens $N-1$ Kanten haben muss. Dieser Pfad kann höchstens die Kosten der teuersten $N-1$ Kanten haben.
Um Nachbarn einer Lösung zu finden, habe ich die für das klassische TSP bekannten Mutationsoperatoren **Insert**, **Displace**, **Reverse-Displace** [Larranaga et al., 1999] und einen eigenen, auf dem 3-Opt-Verfahren basierenden Mutationsoperator, den ich **3-Opt** nenne, verwendet. Es wird zufällig einer der Operatoren angewendet. Die Operatoren basieren auf der Darstellung eines Pfades als Permutation von $(1, 2, \ldots, N)$. In dieser Darstellung gibt das k-te Element der Permutation an, welcher Landeplatz als k-tes besucht wird.

Insert wählt einen zufälligen Landeplatz der Permutation aus und setzt ihn an eine zufällige neue Stelle. Wenn wir zum Beispiel die Permutation $(1, 2, 3, 4, 5, 6)$ haben und der dritte Landeplatz ausgewählt wird, könnte die erzeugte Permutation $(1, 2, 4, 5, 3, 6)$ sein, wenn die vorletzte als neue Position ausgewählt wurde.

Displace wählt ein zufälliges Segment der Permutation aus und setzt es an eine zufällige neue Stelle. Wenn von der Permutation $(1, 2, 3, 4, 5, 6)$ das Segment $(2, 3, 4)$ ausgewählt wird, könnte das Ergebnis $(1, 5, 2, 3, 4, 6)$ sein, wenn wieder die vorletzte Stelle ausgewählt wurde.

Reverse-Displace wählt ein zufälliges Segment der Permutation aus und setzt es in umgekehrter Reihenfolge an eine zufällige neue Stelle. Beim Beispiel aus **Displace** wäre das Ergebnis dann $(1, 5, 4, 3, 2, 6)$.

3-Opt teilt den Pfad an zufälligen Stellen in vier Segmente auf. Diese werden in einer zufälligen neuen Reihenfolge zusammengesetzt, wobei sie mit Wahrscheinlichkeit 0.5 umgekehrt werden. Der Operator ähnelt der 3-Opt-Heuristik, welche 3 Kanten einer Lösung löscht und die Segmente in einer Reihenfolge zusammensetzt, welche die Gesamtkosten minimiert, denn er ersetzt auch 3 Kanten durch neue. Wenn von der Lösung $(1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9)$ die Segmente $(1, 2)$, $(3, 4)$, $(5, 6)$ und $(7, 8, 9)$ ausgewählt werden, könnte das Ergebnis $(4, 3, 5, 6, 9, 8, 7, 1, 2)$ sein.

Für die Starttemperatur T_0 ist es sinnvoll, einen Wert zu nehmen, der Anfangs für alle Lösungen eine höhe Übergangswahrscheinlichkeit erlaubt. Es ist sinnvoll, ein Vielfaches von g zu verwenden, damit Anfangs mehrere spitze Winkel dazukommen können. **Displace**, **Reverse-Displace** und **3-Opt** tauschen drei Kanten aus und fügen dadurch maximal sechs neue spitze Winkel hinzu. Deshalb sollte die Temperatur anfangs mindestens $7g$ betragen. Durch Ausprobieren hat sich eine Starttemperatur von $16g$, eine Mindesttemperatur von 0.001 und ein Abkühlkoeffizient von 0.999999 durchgesetzt. Weiterhin war es sinnvoll, die Suche abzubrechen, wenn für 1000000 Iterationen keine neue beste Lösung gefunden wurde. Der Algorithmus lässt sich so modifizieren, dass er möglichst schnell eine Lösung ohne spitze Winkel findet. Dafür wird einerseits ein weiteres Abbruchkriterium eingeführt, dass sofort abbricht, wenn eine Lösung ohne spitze Winkel gefunden wurde. Andererseits wird zuerst ein recht kleiner Abkühlkoeffizient von beispielsweise 0.5 verwendet, wodurch potenziell weniger Iterationen notwendig sind um eine gute Lösung zu finden. Wenn das nicht ausreicht, wird der Abkühlkoeffizient erhöht und der Algorithmus erneut ausgeführt. Das wird so lange wiederholt, bis eine sinnvolle Lösung gefunden wurde, oder eine grenze der Iterationen erreicht wurde.

1.2 Erweiterung: Optimale Lösung

Es ist $\mathcal{NP}$-schwer, das weniger krumme Touren-Problem (WKT) optimal zu lösen. Um das zu zeigen, wird eine Reduktion vom eulerschen Pfad-Problem des Handlungsreisenden (E-PTSP) skizziert, welches $\mathcal{NP}$-schwer ist [Papadimitriou, 1977]. E-PTSP lautet folgendermaßen: Es dei $P \subset \mathbb{R}^2$ eine endliche Menge.

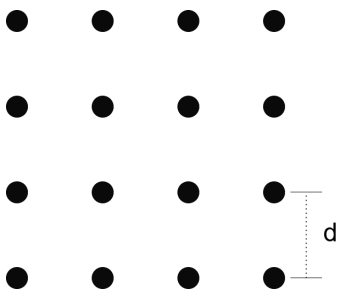

Abbildung 1: Die 16-Struktur.

Dann wird eine Reihenfolge von P gesucht, bei der die Strecke zwischen aufeinanderfolgenden Punkten minimal ist.
E-PTSP kann nun auf WKT reduziert werden, in dem jeder der Punkte P durch eine 16-Struktur an dessen Position ersetzt wird (Siehe Abbildung 1).
Diese Transformation heißt im folgenden $T_d : \mathfrak{P}(\mathbb{R}) \to \mathfrak{P}(\mathbb{R})$ mit $d \in \mathbb{R}$, wobei $\mathfrak{P}$ für die Potenzmenge steht.

Lemma 1. *Es sei P eine Instanz von E-PTSP und $P' = T_d(P)$ mit d so dass sich die 16-Strukturen nicht überschneiden. Dann entspricht eine Permutation der 16-Strukturen von P' einer Lösung von P'.*

Beweis. Die erste 16-Struktur der Permutation kann in einer der Reihenfolgen in Abbildung 2 abgeflogen werden, so dass die beiden zuletzt angeflogenen Punkte in Richtung der nächsten 16-Struktur in der Permutation zeigen. Alle 16-Strukturen der Permutation bis auf die letzte liegen dann zwischen zwei anderen 16-Strukturen. Abbildung 2 zeigt, dass diese dei 16-Strukturen nacheinander angeflogen werden könne, egal wie sie zuenander liegen. Die letzte 16-Struktur kann dann in einer beliebigen Reihenfolge angeflogen werden. □

Lemma 2. *Es sei P eine Instanz von E-PTSP. $P' = T_d(P)$ kann in eine mögliche Lösung von P umgewandelt werden, wenn die Punkte jeder 16-Struktur jeweils unmittelbar nacheinander angeflogen werden.*

Beweis. Jeder Punkt in P' darf genau einmal besucht werden. Wenn die Punkte einer 16-Struktur unmittelbar nacheinander angeflogen werden, kann diese Struktur danach nicht mehr angeflogen werden. Dadurch wird in einer solchen Lösung jede 16-Struktur nur einmal angeflogen. Die Lösung stellt also eine Permutation der 16-Strukturen dar. Da jede 16-Struktur einen entsprechenden Punkt in P hat, kann die Permutation der 16-Strukturen so in eine Permutation von P umgewandelt werden. □

Nun sei $\lim_{d \to 0}$. Die Abstände zwischen Punkten gleicher 16-Strukturen nähert sich dann 0 an, während die Abstände zwischen Punkten unterschiedlicher 16-Strukturen den Abständen der entsprechenden Punkte in der E-PTSP-Instanz annähern. Die Länge eines Pfades, der die Punkte einer 16-Struktur unmittelbar nacheinander besucht, nähert sich dann der Länge des entsprechenen Pfad in der E-PTSP-Instanz an. Es muss jetzt noch gezeigt werden, dass eine optimale Lösung die Punkte einer Struktur unmittelbar nacheinander besucht und deshalb in eine Lösung des entsprechenden E-PTSP umgewandelt werden kann. Nach dem Beweis von Lemma 1 ist das äquivalent mit der Aussage, dass eine optimale Lösung jede 16-Struktur nur einmal besucht.

Lemma 3. *Es sei P eine Instanz von E-PTSP und $P' = T_d(P)$.*
1. Wenn eine mögliche Lösung L 16-Strukturen mehrmals besucht, gibt es eine bessere oder gleichgute Lösung L', die sie nur einmal besucht.
2. L' kann in polynomieller Zeit gefunden werden.

Beweis. 1. Wir betrachten die Reihenfolge, in der L die 16-Strukturen besucht. L besucht $n \geq 2$ 16-Strukturen, bevor es eine 16-Struktur besucht, die es schon besucht hat. Wenn $n = |P|$ besucht L keine 16-Strukturen mehrmals. Andernfalls besucht L danach eine 16-Struktur, die es schon besucht hat. Diese 16-Struktur können wir überspringen, wodurch wir eine neue Verkettung von 16-Strukturen erhalten, in der n um 1 größer ist. Nach der Dreiecksungleichung ist diese Verkettung kürzer als die davor. Wir erhalten so lange neue Verkettungen, bis $n = |P|$ und keine Struktur mehrmals besucht wird. Es handelt sich dann um eine Permutation der 16-Strukturen.

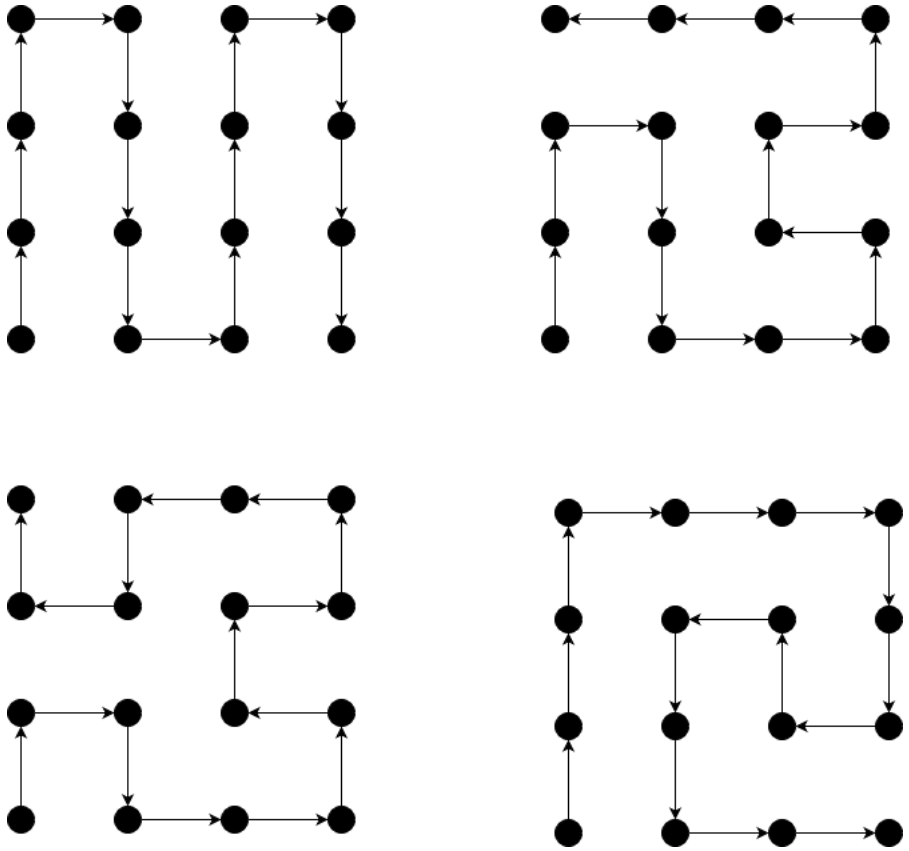

Abbildung 2: Ein von unten in die 16-Struktur kommendes Flugzeug kann in alle Richtungen weiter fliegen. Für andere Herkunftsrichtungen müssen die Pfade entsprechend gedreht werden.

2. L' wird gefunden, in dem die Verkettung von 16-Strukturen L durchgegangen wird und jede 16-Struktur, die schon einmal darin vorkam gelöscht wird. Es wird also jede der $n = |L|$ in L vorkommenden 16-Strukturen mit allen Vorangegangenen verglichen. Da es maximal n vorangegangene 16-Strukturen gibt, haben wir $\mathcal{O}(n^2)$ Vergleiche, es ist unter der Annahme von konstanter Vergleichszeit $t \in \mathcal{O}(n^2)$. □

Eine optimale Lösung kann deshalb immer in eine Lösung für E-PTSP umgewandelt werden. Diese hat mit $\lim_{d \to 0}$ die gleichen Kosten wie die entsprechende Lösung für WKT. Zuletzt muss noch gezeigt werden, dass jede Lösung für E-PTSP auch eine entsprechende Lösung in WKT hat, wodurch eine optimale Lösung in WKT auch in E-PTSP optimal ist.

Lemma 4. *Es sei P eine Instanz von E-PTSP und $P' = T_d(P)$. Jede Lösung von P ist auch eine Lösung von P'.*

Beweis. Eine Lösung für P ist eine Permutation der Punkte von P. Da jeder Punkt von P eine entsprechende 16-Struktur in P' hat, kann über diese Zuordnung die Permutation von P in eine Permutation der 16-Strukturen in P' umgewandelt werden. □

Demnach ist

$$\text{WKT} \geq_{\mathcal{P}} \text{E-PTSP}$$

Unter der Annahme $\mathcal{P} \neq \mathcal{NP}$ gibt es deshalb keinen Algorithmus, der WKT in polynomieller Zeit optimal lößt.

Zur optimalen Lösung von WKT wird dieses als Integer-Programming-Problem formuliert. Integer Programming bezeichnet einen linearen Term mit ganzzahligen Variablen, der unter Einhaltung linearer Ungleichung maximiert werden soll. Integer Programming ist $\mathcal{NP}$-schwer [Karp, 1972], weshalb dafür nur Algorithmen exponentieller Laufzeit bekannt sind.
Es sei also I eine Instanz von WKT mit den Punkten $P \subset \mathbb{R}^2$. Die Landeplätze sind $L = \{1, 2, \ldots, |P|\}$ Die Variable $x_{i,j} \in \{0, 1\}$ it $i, j \in L; i < j$ kodiert, ob die Route die Punkte P_i und P_j direkt nacheinander

anfliegt, wobei nicht festgelegt ist, welcher zuerst angeflogen wird. Man sagt auch: Die Lösung enthält eine Kante zwischen P_i und P_j. Die Variable $y_i \in \{0,1\}$ mit $i \in L$ kodiert, ob der Pfad bei P_i anfängt oder endet. Das Integer-Programming-Problem lautet dann:

$$\text{minimiere} \sum_{i=1}^{|P|} \sum_{j=1, j>i}^{|P|} c_{i,j} x_{i,j} \text{ mit} \tag{1}$$

$$\sum_{j=i+1}^{|P|} x_{i,j} + \sum_{k=1}^{i-1} x_{k,i} + y_i = 2 \qquad \text{Für alle } i \in \{1, 2, \ldots, |P|\} \tag{2}$$

$$\sum_{i=1}^{|P|} y_i = 2 \tag{3}$$

$$x_{\min(i,j),\max(i,j)} + x_{\min(j,k),\max(j,k)} \leq 1 \qquad \text{Für alle } i,j,k \in L; i \neq j; j \neq k; i \neq k; P_i, P_j, P_k \text{ bilden spitzen Winkel} \tag{4}$$

$$\sum_{i \in Q} \sum_{j \in Q; j!=i} x_{\min(i,j),\max(i,j)} \leq |Q| - 1 \quad \text{Für alle } Q \subset L; |Q| \geq 2 \tag{5}$$

(6)

Der zu minimierende Term (1) bedeutet, dass die Gesamtlänge des Pfades möglichst kurz sein soll. (2) sorgt dafür, dass auf jeder Landeplatz zwei Landeplätze hat, die direkt vor und nach ihm im Pfad angeflogen werden, oder genau einen, wenn der Landeplatz an einem Ende des Pfades liegt. (3) sorgt dafür, dass es nur 2 solcher Endlandeplätze gibt. (4) verhindert, dass es im Pfad spitze Winkel gibt. Wenn zwei Kanten einen Spitzen Winkel bilden, dann darf maximal eine dieser Kanten in der Lösung sein. (5) sorgt dafür, dass die Lösung nur ein Pfad ist, und nicht ein Pfad und Kreise durch die restlichen Knoten. Es handelt sich um die in [Dantzig et al., 1954] entwickelte Subtour-Elimination-Bedingung.
Weil (5) exponentiell viele Ungleichungen beinhaltet, muss es als Lazy Constraint formuliert werden, die Ungleichungen werden also im Laufe des Lösungsprozesses hinzugefügt. Wenn es eine potentielle Lösung gibt, werden die Ungleichungen so ergänzt, dass die Lösung ungültig wird. Dafür wird zuerst mit einer einfachen Depth-First-Search ein Kreis in der Lösung gesucht und für die Knoten des Kreises die Ungleichung ergänzt. Danach wird geprüft, ob die Lösung aus mehreren, nicht verbundenen Komponenten besteht. Wenn ja, wird für jede der Komponenten eine entsprechende Ungleichung hinzugefügt. Wenn die Lösung aus nur einer Komponente besteht, dann ist sie entweder gültig oder nicht ganzzahlig. Im ersten Fall ist die Lösung entweder optimal oder eine obere Schranke für die optimale Lösung, im zweiten Fall müssen Ungleichungen ergänzt werden, welche die nicht-ganzzahlige Lösung ausschließen ("Separation"). Dafür wird mit dem Stoer-Wagner-Algorithmus[Stoer and Wagner, 1997] ein mimimaler Schnitt in der Lösung gesucht, also die Kanten mit minimaler Summe, so dass die Lösung ohne diese kanten zwei Komponenten hat. Für diese Komponenten werden dann die entsprechenden Ungleichungen hinzugefügt, falls sie von der Lösung verletzt werden.
Dieses Integer-Programming-Problem kann mit dem Branch-and-Cut-Algorithmus[Padberg and Rinaldi, 1991] gelößt werden. Als Startlösung verwende ich dabei das Ergebnis des Simulated Annealing. Mit dem Branch-and-Cut-Algorithmus können auch Annäherungslösungen gefunden werden. Dafür wird die Suche abgebrochen, wenn die Differenz zwischen oberer und unterer Schranke in einem definierten Toleranzbereich liegt. Eine so ermittelte Lösung ist nicht garantiert optimal, liegt aber garantiert innerhalb des Toleranzbereiches zur optimalen Lösung.

2 Umsetzung

Den Simulated-Annealing-Algorithmus habe ich in Java implementiert. Wenn das Programm ausgeführt wird, muss der Pfad zur Eingabedatei mit den Koordinaten der Landeplätze angegeben werden. Dann wird eine Lösung gesucht, wobei der Fortschritt ausgegeben wird. Die Lösung wird zusammen mit den Kosten ausgegeben. Die Lösung wird als Permutation der Indices der Landeplätze in der Eingabedatei ausgegeben, beginnend bei 0. Die beiden Versionen `SimulatedAnnealing.java` und `SimulatedAnnealingFeasible.java` unterscheiden sich darin, dass letzteres den Algorithmus zum Finden einer beliebig teuren möglichen Lösung implementiert. Ersteres speichert die Lösung zusätzlich in der Datei `<Eingabedatei>.solution`, damit das Ergebnis auch von der Integer-Programming-Lösung verwendet werden kann.
Die Integer-Programming-Lösung habe ich in Python implementiert. Dabei habe ich die Bibliothek

`python-mip` verwendet, welche Mixed-Integer-Programme mit dem CBC-Löser löst. Für die Graph-Algorithmen, also die Suche nach Zyklen und den Stoer-Wagner-Algorithmus, habe ich die Bibliothek `networkx` verwendet. Um eine Startlösung für den CBC-Löser zu finden, wird die Java-Implementierung des Simulated-Annealing-Algorithmus aufgerufen. Wenn das Programm ausgeführt wird, muss auch hier der Pfad zur Lösung angegeben werden. Danach muss angegeben werden, um wieviel Prozent die Lösung maximal von der optimalen Lösung abweichen darf. Nach der Eingabe wird der Löser gestartet und gibt seinen Fortschritt aus. Wenn der Löser fertig ist, wird auch hier eine Permutation der Lösung ausgegeben.

3 Beispiele

Es handelt sich um die Beispiele von der BwInf-Webseite. Die Dateien sind im Ordner `beispiele` zu finden.

3.1 Simulated Annealing: Beliebige gültige Lösung

Eingabe: `wenigerkrumm1.txt`
Ausgabe:

4 Quellcode

Literatur

[Dantzig et al., 1954] Dantzig, G., Fulkerson, R., and Johnson, S. (1954). Solution of a large-scale traveling-salesman problem. *Journal of the Operations Research Society of America*, 2(4):393–410.

[Karp, 1972] Karp, R. M. (1972). Reducibility among combinatorial problems. *Complexity of Computer Computations*, pages 85–103.

[Kirkpatrick et al., 1983] Kirkpatrick, S., Gelatt, C. D., and Vecchi, M. P. (1983). Optimization by simulated annealing. *Science*, 220(4598):671–680.

[Larranaga et al., 1999] Larranaga, P., Kuijpers, C. M. H., Murga, R. H., Inza, I., and Dizdarevic, S. (1999). Genetic algorithms for the travelling salesman problem: A review of representations and operators. *Artificial intelligence review*, 13:129–170.

[Padberg and Rinaldi, 1991] Padberg, M. and Rinaldi, G. (1991). A branch-and-cut algorithm for the resolution of large-scale symmetric traveling salesman problems. *SIAM review*, 33(1):60–100.

[Papadimitriou, 1977] Papadimitriou, C. H. (1977). The euclidean travelling salesman problem is np-complete. *Theoretical Computer Science*, 4(3):237–244.

[Stoer and Wagner, 1997] Stoer, M. and Wagner, F. (1997). A simple min-cut algorithm. *Journal of the ACM (JACM)*, 44(4):585–591.