

Backbones im Traveling Salesmen Problem

Dirk Richter

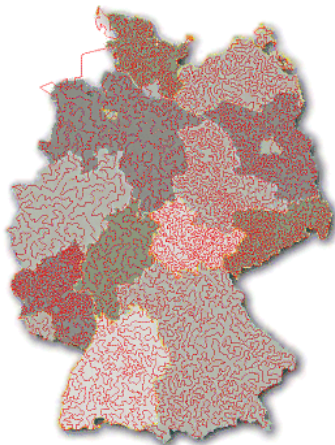
Oberseminar Optimierung
Vortrag am 24.06.2008

Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg
Naturwissenschaftliche Fakultät III, Institut für Informatik,
Lehrstuhl Softwaretechnik und Programmiersprachen,
<http://swt.informatik.uni-halle.de/>

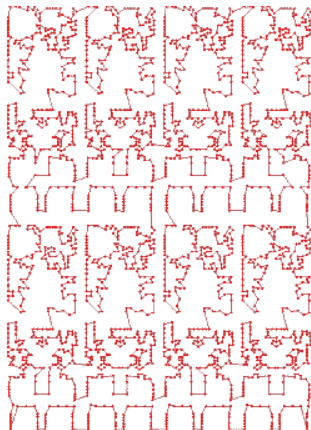
Inhaltsverzeichnis

- 1 Motivation
 - Mathe auf Tour
 - Vorstellung DFG-Projekt
 - aktuelle Rekorde
- 2 Überblick
 - Bedeutung von TSP für Praxis
 - Problemstellung TSP
 - LKH
- 3 Backbones
 - Pseudo-Backbone-Kontraktion
 - Toleranzen und Zusammenhänge
 - Minimale Kostenreduktion zum Kantenerzwingen

Motivation



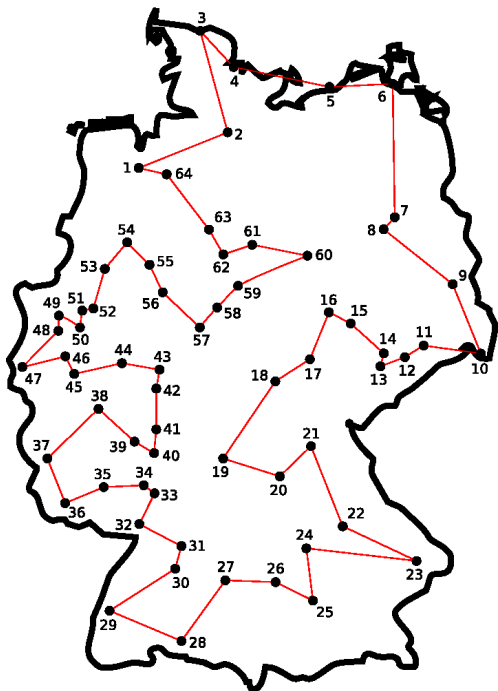
Kürzeste Tour durch 15112 Städte
Applegate, Bixby, Chvátal, Cook 2001



Leiterplatte mit 2392 Bohrungen
Padberg und Rinaldi 1987

Fachschaften bringen Mathe auf Tour(en)

- Jahr der Mathematik
- Konferenz der deutschsprachigen Mathematikfachschaften (KoMa)
- mathematischer Staffellauf mit Zirkel statt Staffelstab
- Graph, der alle deutschen Hochschulen mit mathematischen Fachbereichen miteinander verbindet
- günstigster Weg, der jede Stadt genau einmal besucht
- 79 Hochschulen in 64 Städten
- Approximation Wirklichkeit



DFG-Projekt

"Bessere Methoden zum Lösen des Handelsreisendenproblems"

Sep 03 beantragt+bewilligt durch Prof. Dr. Jop Sibeyn, Prof. Dr. Boris Goldengorin, Dr. Holger Blaar

Okt 04 Dr. Gerold Jäger hauptamtlicher wissenschaftlicher Mitarbeiter

Mrz 05 Prof. Dr. Jop Sibeyn seit Wanderung über Eismeer in Schweden vermisst

Jun 05 Prof. Dr. Paul Molitor Projektleitung

Apr 06 ich: Diplomarbeit "Toleranzen in LKH"

Jan 07 DFG: Verlängerung bis März 2009

DFG-Projekt: Ziele

- schneller TSP lösen
 - Einfluss von Toleranzen untersuchen (Heuristiken + BnB)
 - Überlegenheit nachweisen: Toleranzen vs. Gewichtsbasierente Auswahlverfahren
 - Verwendung: statt aufwendiger TSP-Toleranz verwandte Probleme mit **Polynomialzeit**
 - hierarchisches Vorgehen zum Lösen großer TSP-Instanzen
- World-TSP (knapp 2 Mio Städte auf Kugel)

Meilensteine im TSP - optimale Touren

Year	Research Team	Size	Name
1954	G. Dantzig, R. Fulkerson, and S. Johnson	49 cities	dantzig49
1971	M. Held and R.M. Karp	64 cities	64 random
1975	P.M. Camerini, L. Fratta, and F. Maffioli	67 cities	67 random
1977	M. Grötschel	120 cities	gr120
1980	H. Crowder and M.W. Padberg	318 cities	lin318
1987	M. Padberg and G. Rinaldi	532 cities	att532
1987	M. Grötschel and O. Holland	666 cities	gr666
1987	M. Padberg and G. Rinaldi	2,392 cities	pr2392
1994	D. Applegate, R. Bixby, V. Chvátal, W. Cook	7,397 cities	pla7397
1998	D. Applegate, R. Bixby, V. Chvátal, W. Cook	13,509 cities	usa13509
2001	D. Applegate, R. Bixby, V. Chvátal, W. Cook	15,112 cities	d15112
2004	D. Applegate, R. Bixby, V. Chvátal, W. Cook, and K. Helsgaun	24,978 cities	sw24978
2006	D. Applegate, R. Bixby, V. Chvátal, W. Cook, D. Espinoza, M. Goycoolea and K. Helsgaun	85,900 cities	pla85900

NatName	Gap	LowBound	Tour	Source of Tour
ar9152	0.012%	837,38	837,48	Hung Dinh Nguyen
bm33708	0.031%	959,01	959,29	Yuichi Nagata
ca4663	Optimal	1,290,319	1,290,319	Concorde
ch71009	0.024%	4,565,452	4,566,506	Yuichi Nagata
eg7146	0.021%	172,35	172,39	Keld Helsgaun
fi10639	0.028%	520,38	520,53	LKH + tmerge
gr9882	Optimal	300,9	300,9	LKH + tmerge
ho14473	0.093%	176,94	177,09	Yuichi Nagata
ei8246	0.021%	206,13	206,17	LKH
it16862	Optimal	557,32	557,32	LKH + tmerge
ja9847	Optimal	491,92	491,92	Keld Helsgaun
kz9976	0.047%	1,061,387	1,061,881	Keld Helsgaun
mo14185	0.031%	427,25	427,38	Keld Helsgaun
nu3496	Optimal	96,13	96,13	Concorde
mu1979	Optimal	86,89	86,89	Concorde
pm8079	0.023%	114,83	114,86	Yuichi Nagata
rw1621	Optimal	26,05	26,05	Concorde
sw24978	Optimal	855,6	855,6	Keld Helsgaun
tz6117	0.027%	394,61	394,72	LKH + tmerge
vm22775	0.030%	569,12	569,29	Keld Helsgaun
ym7663	0.030%	238,24	238,31	LKH + tmerge

9 Weltrekorde der Arbeitsgruppe

- BOA28924 (28.924 Städte, Tourlänge 79.623, 19.03.2008)
- PJH17845 (17.845 / 48.092 / 05.05.2008) *
- FHT47608 (47.608 / 125.120 / 20.03.2008) *
- XVB13584 (13.584 / 37.083 / 28.03.2008)
- FNC19402 (19.402 / 59.287 / 01.04.2008)
- IDO21215 (21.215 / 63.518 / 02.04.2008)
- PBA38478 (38.478 / 108.318 / 27.05.2008)
- XSC6880 (6.880 Städte, Mai 2006)
- FRH19289 (19.289, Oktober 2006) *

→ ersten 6 durch **Backbone-Kontraktion** gefunden

* inzwischen gebrochen

Motivation - Bedeutung für Praxis

- Besuch im Supermarkt: abarbeiten Einkaufszettel auf möglichst kurzem Weg und zurück zum Auto
- Post: Austragen von Zeitungen + zurück Postzentrum
- Geschäftsreise: Besuch aller Kunden + zurück Firmensitz
- Netzfahrplan: Abfahren von vorgegebenen Haltestellen
- Lagerlogistik: Einzelposten einer Bestellung im Lager zusammensuchen
- Tourenplanung: Einsatzfahrzeug fährt Depots ab
- Design von Mikrochips (Lötpunkte, Bohrlöcher)
- DNA-Sequenzierung (Bestimmung Informationsgehalt Restriktionsenzym)

formal betrachtet...

TSP

geg: $C \in \mathbb{R}^{n,n}$... Kostenmatrix. Kante (i, j) hat Kosten c_{ij}

ges: Tour $T = (i_1, \dots, i_n)$ mit $i_j \neq i_k$ und $i_j \in \{1, 2, \dots, n\}$, so dass
$$c(T) = \sum c_{i_k i_{k+1}} + c_{i_n i_1}$$
 minimal

- symmetrisch (STSP) : $\Leftrightarrow \forall i, j : c_{ij} = c_{ji}$
- andernfalls ATSP
- metrisch : $\Leftrightarrow \forall i, j, k : c_{ik} \leq c_{ij} + c_{jk}$ (Dreiecksungleichung)
- euklidisch : $\Leftrightarrow c_{ij}$ geometrischer Abstand
- euklidisch \Rightarrow metrisch und symmetrisch

HCP - Hamilton Cycle Problem

Existiert im ungerichteten Graphen $G = (V, E)$ eine Tour T ?

$g : ATSP \rightarrow STSP$ (Wdhl.)

Transformation nach Jonker & Volgenant

Setze $D = (d_{ij}) \in R^{2n, 2n}$, $M = \max(c_{ij}) + 1$

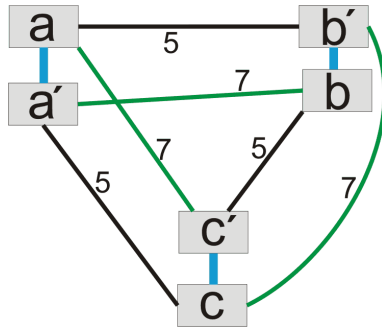
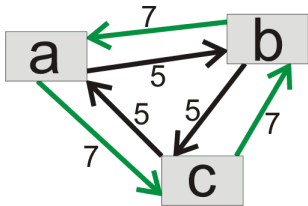
$$\forall i, j \in \{1, \dots, n\} : d_{n+i, j} := d_{j, n+i} := \begin{cases} c_{ij} & i \neq j \\ -M & i = j \end{cases}$$

Alle anderen $d_{ij} := M$

- Nachteil: Problemgröße verdoppelt
 - Anzahl der Matrixelemente vervierfacht!
- ⇒ effizientes Verfahren für STSP löst auch ATSP effizient

ATSP-Beispiel P

STSP(P)



$h : HCP \rightarrow STSP$

Transformation (Helsgaun)

Setze $D = (d_{ij}) \in R^{n,n}$ mit

$$\forall i, j : d_{ij} := \begin{cases} 0 & (i, j) \in E(G) \\ 1 & \text{sonst} \end{cases}$$

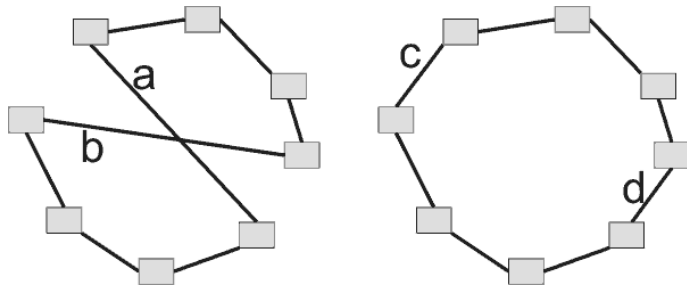
- G hamiltonsch $\Leftrightarrow c(STSP(D)) = 0$
 - HCP NP-vollständig
 - Was haben wir erreicht?
- \Rightarrow für TSP, ATSP, HCP genügt es **STSP** zu lösen (unser Ziel)

Dilemma: STSP NP-hart

- exakte Verfahren: exponentielle Laufzeit
- derzeit führend: Concorde (LP + Branch & Cut)
- große Instanzen: Berechnung optimaler Tour aufwendig
- Ausweg: Berechnung hoffentlich guter Näherungslösung
- approximative / heuristische Verfahren
- suboptimale bzw. lokal optimale Lösungen
- derzeit führend: LKH-Paket

Grundidee - LKH

- Helsgaun 2000 V1, 2007 V2
- basiert: k-Opt (Lin & Kernighan 1973)
- Suche auf stark ausgedünnten Graphen
- Kandidatensystem (Maximalgrad z.B. 5)
- viele verschiedene Kriterien (u.A. Toleranzen)



Backbones (Zhang, Looks)

 $G = (V, V \times V)$... vollständiger Graph $\mathcal{T}_c^{opt}(G)$... Menge der optimalen Touren für Kostenfunktion c

$$\mathcal{B} := \bigcap_{T \in \mathcal{T}_c^{opt}(G)} T$$

- $\mathcal{T}_c^{opt}(G) = \{T\}$ (optimale Tour T eindeutig) $\Rightarrow \mathcal{B} = T$
 - Zang+Looks: Ausdünnung von G mittels Backbone-Wahrsch.
 - Adaption in Diplomarbeit: erster Weltrekord
 - Identifikation Backbones schwer (NP-hart)
- Backbones schätzen

Pseudo-Backbones (Zhang, Looks)

$G = (V, V \times V)$... vollständiger Graph

$\mathcal{M}_c(G)$... Menge (**guter**) Touren für Kostenfunktion c

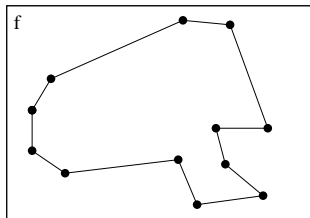
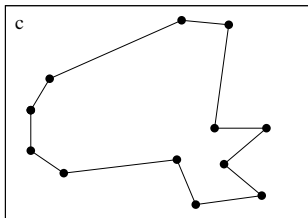
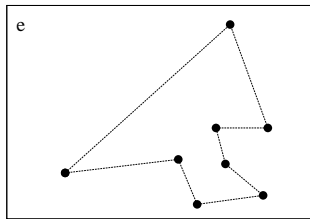
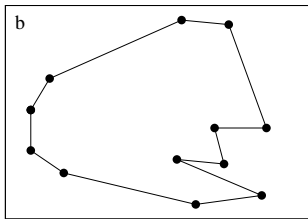
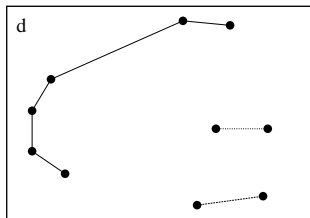
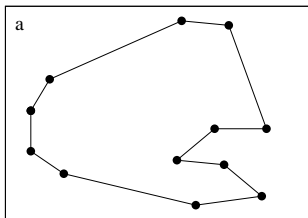
$$\mathcal{B}_P := \bigcap_{T \in \mathcal{M}_c(G)} T$$

- Approximation
 - Praxis: gute Touren viele Kanten gemeinsam
 - Wir: Reduktion durch "festhalten" von P-Backbone-Pfaden
- Vorsicht: Verlust Optimalität
- unwichtig, da Heuristik (LKH)

$G(V, V \times V, c)$... ungerichteter Graph mit Kantengewichten c

- 1 bestimme Menge Ω guter Touren (Starttouren)
- 2 bestimme Pseudo-Backbone-Kanten (Schnitt aller Starttouren)
→ $B := \bigcap \Omega, V_B = V \cap B, V_{rest} = V \setminus V_B$
- 3 bestimme maximale Pfade in B (P-Backbone-Pfade)
→ **Kontraktion** dieser Pfade zu je einer Kante (c -edge, V_C)
- 4 neue TSP-Instanz: $H(W, W \times W, c')$, mit
 $W := V_{rest} \cup V_C, \forall e : c'(e) := c(e)$
- 5 Tour für H + Nebenbedingung: alle c -edges enthalten (fixed)
- 6 Rücktransformation (c -edges → Pfade)

Optimalitätserhaltend \Leftrightarrow geschätzte P-Backbones echt



brd14051 zeigen:
In den 35 Touren gibt es 10767 Backbone-Kanten.
⇒ Problemreduktion 77%

Motivation - Toleranzen

- Beobachtung in Diplomarbeit: kurze Kanten nicht immer gut
- 1-Baum-Toleranz (Kandidatensystem): viel bessere Touren
- Zusammenhang: Backbones - Toleranzen
- wichtiges Forschungsfeld der Arbeitsgruppe
- theo. Aussagen + wichtige praktische Abschätzungen zu:
→ **Minimale Kostenreduktion zur Erwingung einer Menge von Kanten in TSP-Lösung**

Toleranzen im vollständigen Graphen $G = (V, E)$ Menge aller optimalen Touren unter Kosten c

$$\mathcal{T}_c := \{T_{opt} \mid T_{opt} \text{ ist Tour, } c(T_{opt}) = \min_{T \text{ ist Tour}} c(T)\}$$

Beobachtungen für $x \in E$:

- $c(x)$ hinreichend klein $\Rightarrow \exists T_{opt} \in \mathcal{T}_c : x \in T_{opt}$
- $c(x)$ noch kleiner $\Rightarrow x \in \bigcap \mathcal{T}_c \Rightarrow x$ Backbone
- $c(x)$ hinreichend groß $\Rightarrow \exists T_{opt} \in \mathcal{T}_c : x \notin T_{opt}$
- $c(x)$ noch größer $\Rightarrow x \notin \bigcup \mathcal{T}_c \Rightarrow x$ Anti-Backbone

Toleranzen im vollständigen Graphen $G = (V, E)$ Manipulation der Kostenfunktion c

Seien $x, y \in E$.

$$c_{\alpha,x}(y) := \begin{cases} c(x) + \alpha & \text{falls } x = y \\ c(y) & \text{sonst} \end{cases}$$

obere Toleranz o_T und untere Toleranz u_T

Seien $T \in \mathcal{T}_c$ optimale Tour, $x \in T$ und $y \notin T$.

$$o_T(x) := \sup\{\alpha \in \mathbb{R} \mid T \in \mathcal{T}_{c_{+\alpha,x}}\}$$
$$u_T(y) := \sup\{\alpha \in \mathbb{R} \mid T \in \mathcal{T}_{c_{-\alpha,y}}\}$$

Eigenschaften (vgl. Molitor, Jäger, Goldengorin)

Unabhängigkeit der Toleranzen von einer speziellen Lösung

Seien $x, y \in E$ und $\exists T_1, T_2 \in \mathcal{T}_c$ mit $x \in T_1$ und $y \notin T_2 \dots$

$$o_{T_1}(x) = o(x) = \sup\{\alpha \in \mathbb{R} \mid x \in \bigcup \mathcal{T}_{c+\alpha, x}\}$$

$$u_{T_2}(y) = u(y) = \sup\{\alpha \in \mathbb{R} \mid y \in \bigcup \mathcal{T}_{c-\alpha, y}\}$$

Folgerungen:

- Toleranzen einer optimalen Tour charakt. Gesamtproblem
→ nur eine Lösung aus \mathcal{T}_c nötig zur Berechnung

Resultat

Verbieten und Erzwingen von Kanten (Nebenbedingungen)

Seien $in, out \subseteq E$ mit $in \cap out = \emptyset$.

$$D \Big|_{in}^{out} := \{T \mid T \text{ ist Tour, } in \subseteq T, out \cap T = \emptyset\}$$

$$\mathcal{T}_c \Big|_{in}^{out} := \{T_{opt} \mid T_{opt} \in D \Big|_{in}^{out}, c(T_{opt}) = \min_{T \in D \Big|_{in}^{out}} c(T)\}$$

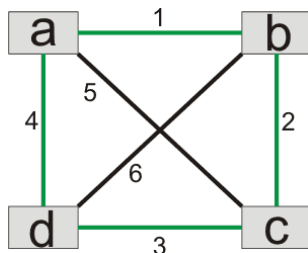
Berechnung von Toleranzen für ein TSP

Seien $T \in \mathcal{T}_c, x \in T, y \notin T, T_1 \in \mathcal{T}_c \Big|_{\emptyset}^x$ und $T_2 \in \mathcal{T}_c \Big|_{\emptyset}^y$.

$$o(x) = c(T_1) - c(T)$$

$$u(y) = c(T_2) - c(T)$$

Toleranzen Beispiel



$$T_{opt} = (a, b, c, d)$$

$$o(a, b) = o(d, c) = c(a, c, b, d) - c(T_{opt}) = 17 - 10 = 7$$

$$o(b, c) = o(a, d) = c(a, c, d, b) - c(T_{opt}) = 15 - 10 = 5$$

$$u(a, c) = u(b, d) = c(a, c, d, b) - c(T_{opt}) = 5$$

Zusammenhang Backbones - Toleranzen

Für Kante e gilt ...

- obere Toleranz $> 0 \Rightarrow$ Backbone
 - untere Toleranz $> 0 \Rightarrow$ Anti-Backbone (Fat)
 - obere Toleranz $= 0 \Rightarrow$ keine eindeutige optimale Tour
 - untere Toleranz $= 0 \Rightarrow$ keine eindeutige optimale Tour

 - natürlich: Toleranzen berechnen aufwendig
- polynomielle Ersatzprobleme ähnlicher Struktur
- Minimal aufspannender Baum (MST), Minimal Perfektes Matching (MPM)
 - Hoffnung: viele gemeinsame Kanten
 - Chrobak+Poljak: \exists gemeinsame Kanten STSP, MST, MPM

Pseudo-Backbone-Toleranzen

Pseudo-Backbone-Toleranzen

M ... Menge von Anfangstouren, $M' := \operatorname{argmin}_{p \in M} c(p)$... beste Anfangstouren, $T \in M'$, $k_1 \in T$, $k_2 \notin T$:

$$Otol_{PB}(k_1) := \min_{t \in M, k_1 \notin t} c(t) - c(T)$$

$$Utol_{PB}(k_2) := \min_{t \in M, k_2 \in t} c(t) - c(T)$$

- in Domarbeit untersucht: Backbone-Wahrsch. besser (Kand.)
- Experimente: bessere Touren als Ausdünnung durch Kosten

Untere Schranken

MST

Aufspannender Baum mit minimalen Kosten

minimaler 1-Baum

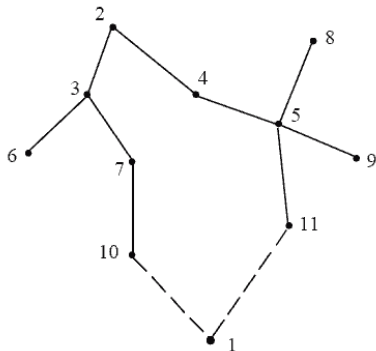
Sei $G = (V, E)$ ein Graph mit Kostenmatrix C , $v_1 \in V$ und M ein MST für den Graphen $G \setminus v_1$, dann ist M ergänzt um zwei kürzeste Kanten von v_1 ein minimaler 1-Baum.

Vorsicht...

1-Baum ist kein Baum!

→ MST und minimaler 1-Baum liefern untere Schranken für STSP
(in polynomieller Zeit berechenbar).

1-Baum Veranschaulichung



- Beobachtung: MST und 1-Baum viele Kanten mit optimaler Tour gemeinsam

Optimierungsproblem P : P_{opt} ...Menge optimaler Lösungen

k-Abhängigkeit

Optimierungsprobleme P, Q (Kantenauswahl in G) **k-abhängig**
: $\Leftrightarrow \forall X \in P_{opt} : \exists Y \in Q_{opt} : |X \cap Y| \geq k$

Theorem (Chrobak, Poljak)

- Knotenzahl gerade \Rightarrow TSP und MPM 2-abhängig
 - Knotenzahl gerade \Rightarrow MST und MPM 1-abhängig
 - TSP und MST 2-abhängig (immer)
- \rightarrow Abhängigkeiten i.A. scharf (3 Beispiele)
- \Rightarrow nur untere Schranke für alle praktischen Instanzen

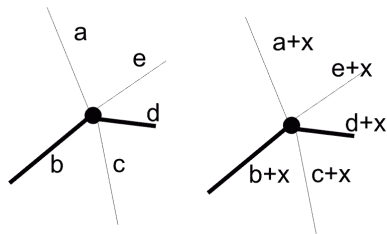
Fazit: jeder MST hat **mindestens 2** TSP-Kanten

Anwendung

- Schnitt aller MSTs == MST-Backbones
- Frage: Bedeutung $\text{MST-Backbones} \cap \text{TSP-Backbones}$?
- aussichtsreich: Backbone-Kontraktion nur mit MSTs statt guter Touren
- aktuelle Strategie auf World-TSP (2 Mio Knoten)
- MST: 10 Tage
- gute Tour: bisher keine
- erklärt Güte der Subgradienten optimierten 1-Baum-Toleranz

Held-Karp-Approximation (Subgradientenoptimierung)

- 1-Baum verbessern via Transformation der Kostenmatrix
- Addition von x ändert optimale Tour nicht (aber min. 1-Baum)



- Allgemein: $\phi : C \rightarrow D$ mit $d_{ij} = c_{ij} + \pi_i + \pi_j$
- setze $\pi := (\pi_1, \dots, \pi_n)$ und $\omega(\pi) := c(T_\pi) - 2 \sum \pi_i$ (Rücktr.)
- T_π min. 1-Baum für D , $\omega(\pi)$ untere Schranke für STSP
- $\omega(\pi) \rightarrow \max$ mittels Subgradientenverfahren (Numerik)

Eigenschaften und Zusammenhang STPT - 1-Baum

Lemma

Tour T optimal $\Leftrightarrow T$ ist min. 1-Baum mit $\forall v : \deg(v) = 2$
min. 1-Baum ist eine Tour $T \Rightarrow$ Tour T optimal

Lemma

STSP \Leftrightarrow finde min. 1-Baum mit $\forall e : \deg(e) = 2$

eigene Vermutung

viele MST/MPM-Backbones sind auch STSP-Backbones

α -Werte (1-Baum-Toleranz)

Sei T min. 1-Baum und T_{ij} min. 1-Baum mit $(i, j) \in T_{ij}$.

α -Werte

Setze $\alpha(i, j) := c(T_{ij}) - c(T)$.

- Kostenänderung min. 1-Baums bei Aufnahme von (i, j)

Lemma

- $\alpha(i, j) \geq 0$
- $(i, j) \in T \Rightarrow T_{ij} = T \Rightarrow \alpha(i, j) = 0$

- α -Werte in $O(n^2)$ berechenbar
- Experimente: bessere Touren als Ausdünnung durch Kosten

Minimale Kostenreduktion zum Kantenerzwingen

- Motivation: kontrahierte TSP-Backbone-Pfade fixieren
- denn: " $c(e) = -\infty$ " \rightarrow numerischer Überlauf
- c-edges in Lösung zwingen + Rücktransformation

Minimale Kostenreduktion c' (D. Richter, Feb 08)

T_{opt} ... optimale Tour, B ... zu erzwingende Kanten,

T_B ... optimale Tour unter Bedingung $B \subseteq T_B$

$$c'(k) := \begin{cases} c(k) & \text{falls } k \notin B \\ c(k) - (c(T_B) - c(T_{opt}) + 1) & \text{falls } k \in B \end{cases}$$

- Problem: **zwei** optimale Touren nötig
- **sichere** Approximation für Praxis: ersetze $c(T_{opt})$ durch obere Schranke (bisher beste bekannte Tour), ersetze $c(T_B)$ durch untere Schranke (subgradientenoptimierter 1-Baum)

Fragen?