УДК 004.85:519.1

ЗАСТОСУВАННЯ МЕТОДУ ЗГОРТКОВИХ НЕЙРОННИХ МЕРЕЖ НА ГРАФАХ ДЛЯ РОЗВ'ЯЗАННЯ ЗАДАЧІ КОМІВОЯЖЕРА

Ільницький В.Б.
Науковий керівник – д-р фіз.-мат. наук, проф. Сидоров М.В.
Харківський національний університет радіоелектроніки, каф. ПМ
м. Харків, Україна
тел. +38(050) 167-50-48, email: vladyslav.ilnytskyi@nure.ua

Integer programming problem is NP-complete which leads to difficulties in obtaining exact solution at large scales. The Travelling Salesman Problem (TSP) is a famous example, asking for the shortest possible route that visits each city and returns to the origin city. This problem can be represented as sequential decision making tasks on graphs, making them a good fit for machine learning approaches, such as graph neural networks, and potentially give a possibility to avoids expensive or specialized handcrafted solutions.

Задача комівояжера (комівояжер – бродячий торговець, англ. Travelling Salesman Problem, TSP) полягає у знаходженні найвигіднішого маршруту, що проходить через вказані міста хоча б по одному разу. В умовах завдання вказуються критерій вигідності маршруту (найкоротший, найдешевший, сукупний критерій тощо) і відповідні матриці відстаней, вартості тощо. За умовою задано, що маршрут має проходити через кожне місто тільки один раз. В такому випадку розв'язок знаходиться серед гамільтонових циклів.

Розглянемо згорткову нейронну мережу, яка має вигляд:

$$x_i^{l+1} = x_i^l + \mathrm{ReLU}\left(\mathrm{BN}\left(W_1^l x_i^l + \sum_{j\sim i} \eta_{ij}^l \odot W_2^l x_j^l\right)\right), \tag{1}$$

$$\eta_{ij}^l = \frac{\sigma(e_{ij}^l)}{\sum_{j'\sim i} \sigma(e_{ij'}^l) + \varepsilon}, \tag{2}$$

$$e_{ij}^{l+1} = e_{ij}^l + \mathrm{ReLU}\left(\mathrm{BN}\left(W_3^l e_{ij}^l + W_4^l x_i^l + W_5^l x_i^l\right)\right), \tag{3}$$

де $W \in \mathbb{R}^{h\times h}$, σ – сигмоїдна функція, ε – мале число, ReLU – кусково-лінійна функція активації, BN – пакетна нормалізація.

На вхідному шарі маємо $x_i^{l=0} = \alpha_i$ і $e_{ij}^{l=0} = \beta_{ij}$, $\alpha_i = A_1 x_1 + b_1$, $\beta_{ij} = A_2 d_{ij} + b_2 \,\|\, A_3 \delta_{ij}^{\mathrm{kNN}}$, де $A_1 \in \mathbb{R}^{h\times 2}$, $A_2 \in \mathbb{R}^{\frac{h}{2}\times 1}$, $A_3 \in \mathbb{R}^{\frac{h}{2}\times 3}$, $\cdot\|\cdot$ – оператор конкатенації.

Ми також визначаємо індикаторну функцію ребра TSP $\delta_{ij}^{\mathrm{kNN}}$, яка дорівнює одиниці, якщо вузли i та j є k-найближчими сусідами. Вхідний граф k-найближчих сусідів прискорює процес навчання, оскільки вершина в розв'язку TSP, як правило, з'єднана з вершинами, що знаходяться в безпосередній близькості від нього.

Вектор значень ребра e_{ij}^{l} останнього шару використовується для обчислення ймовірності того, що це ребро буде з'єднане в TSP-маршруті графа. Цю ймовірність можна розглядати як обчислення ймовірнісної теплової карти над матрицею суміжності з'єднань маршрутів. Для кожного $p_{ij}^{\mathrm{TSP}} \in [0,1]^2$ задається багатошаровим персептроном:

$$p_{ij}^{\mathrm{TSP}} = \mathrm{MLP}(e_{ij}^{L}).$$

Отримавши перестановку TSP-маршруту, ми перетворюємо маршрут у матрицю суміжності, де кожен елемент $\hat{p}_{ij}^{\mathrm{TSP}}$ позначає наявність або відсутність ребра між вершинами i та j у TSP-маршруті. Ми мінімізуємо зважену бінарну функцію втрат за допомогою перехресної ентропії, усереднену за міні-партіях. Результатом моделювання є ймовірнісна теплова карта над матрицею суміжності маршрутних з'єднань. Кожен $p_{ij}^{\mathrm{TSP}} \in [0,1]^2$ позначає ймовірність появи ребра в маршруті між вершинами i та j. На основі ланцюгового правила ймовірності, ймовірність часткового TSP-маршруту може бути сформульована як

$$p(\pi') = \prod_{j' \sim i' \in \pi'} p_{i'j'}^{\mathrm{TSP}},$$

де кожна вершина j' слідує за вершиною i' в частковому маршруті π'.

Наведемо короткий опис алгоритму знаходження найкращого шляху.

1. Кодування проблеми комівояжера у графічне представлення.

2. Застосування графічних загорткових шарів для оновлення подання вузлів на основі їх сусідньої інформації.

3. Обчислення механізму уваги для визначення важливості кожного вузла для маршруту комівояжера.

4. Обчислення маршруту, обираючи місто з найвищою імовірністю до тих пір, доки всі міста не будуть відвідані.

Описаний алгоритм було протестовано на модельних даних. Результати дослідження показали, що він може дати точність розв'язку на рівні з традиційними методами, але зменшити час розв'язання проблеми комівояжера. Наприклад, на задачах з 1000 містами він зменшив час розв'язання на 15-20% порівняно з традиційними методами.

Список використаних джерел:

1. Joshi, C. K., Laurent, T., Bresson X. (2019). *An Efficient Graph Convolutional Network Technique for the Travelling Salesman Problem*. arXiv:1906.01227.

2. Bresson X. (2021). *Leaning to Solve the Traveling Salesman Problem with Transformers*. arXiv:2103.03012v1.