Caractérisation des arêtes d'une solution optimale du TSP

Pierre Lemaire[1], Fayçal Touzout[2]

[1] Univ. Grenoble Alpes, CNRS, Grenoble INP, G-SCOP, 38000 Grenoble, France
pierre.lemaire@grenoble-inp.fr

[2] Univ. Gustave Eiffel, Univ. Lyon, ENTPE, Lyon, France
faycal.touzout@univ-eiffel.fr

Mots-clés : *Travelling Salesman Problem, apprentissage supervisé, interprétabilité*

1 Introduction

Le problème du voyageur de commerce (*Traveling Salesman Problem*, TSP) est un problème iconique de la recherche opérationnelle et de l'optimisation combinatoire. On assiste actuellement à différentes tentatives pour incorporer des éléments issus des sciences de données pour sa résolution efficace. Ces travaux s'inscrivent dans cette dynamique.

Plus précisément, nous nous intéressons à la caractérisation des arêtes d'une solution optimale : d'une part nous estimons la probabilité qu'une arête fasse partie d'une solution optimale ; mais aussi, d'autre part, nous déterminons les propriétés qui permettent d'établir une telle probabilité (longueur de l'arête, appartenance à un arbre de poids minimum, *etc.*). Nous illustrons et discutons ces résultats et leur usage dans le cadre du TSP euclidien.

2 État de l'art

L'incorporation de techniques d'apprentissage pour l'analyse ou la résolution de problèmes combinatoires est une explorée depuis longtemps ; Bengio et al. (2021)[1] proposent un panorama récent. Dans le cas du TSP, l'un des problèmes les plus traités, un état de l'art a été établi par Mele et al., (2021) [2]. Il apparaît que la majorité des travaux s'intéressent aux approches d'apprentissage par renforcement (e.g. [3]) et que les travaux qui utilisent des approches d'apprentissage supervisé caractérisent des solutions complètes et non une arête du graphe (e.g. [4]). À notre connaissance, seuls Sun et al. (2021) [5] essayent de prédire la probabilité qu'une arête fasse partie d'une solution optimale en utilisant des approches d'apprentissage supervisé ; leur but est de réduire les arêtes du graphe en apprenant sur quatre caractéristiques calculées à partir des données du graphe (e.g. la longueur normalisée par rapport aux aux arêtes avoisinantes) et deux mesures statistiques calculées à partir de solutions faisables du TSP. L'approche est validée en comparant les performances du solveur Concorde et la formulation de Miller–Tucker–Zemlin sur le graphe résultant.

3 Modèle d'apprentissage

Nous proposons un nouveau modèle d'apprentissage pour identifier les arêtes optimales.

La première étape est le choix des caractéristiques prises en compte pour qualifier une arête. Nous avons considéré une quinzaine de caractéristiques comme : la longueur (éventuellement normalisée par rapport à l'ensemble du graphe ou le voisinage) ; l'appartenance à des solutions de type «plus-proche-voisin», arbre ou couplage de poids minimum ; ou les valeurs des variables dans des modélisations linéaires simplifiées. L'appartenance d'une arête à une solution optimale est calculée grâce à une résolution avec Concorde [7].

La deuxième étape est la construction d'un modèle d'apprentissage automatique supervisé. Pour garantir l'interprétabilité, nous avons opté pour une régression logistique avec sélection de variables afin d'avoir un ensemble limité mais suffisant de caractéristiques (méthodes `step` et `glm` de `R` [8]) .

Pour construire le modèle, nous avons généré des graphes aléatoires construits avec la norme euclidienne sur des points du plan tirés de manière uniforme dans un carré de taille 100. Nous avons généré 160 graphes ayant de 10 à 160 sommets.

4 Résultats

Le modèle d'apprentissage nous permet d'estimer l'«optimalité» d'une arête (c'est-à-dire la probabilité qu'elle appartienne à une solution optimale). L'interprétation de ce modèle nous indique ainsi l'importance des caractéristiques. Ainsi, le poids d'une arête est essentiel, mais doit être pris en compte dans sa version normalisée et selon le rang ; de plus, il faut corriger selon le voisinage. L'appartenance à une solution de type «plus-proche-voisin» ou au couplage de poids minimum sont des marqueurs très forts en faveur de l'optimalité d'une arête ; l'appartenance à un arbre de poids minimum est aussi favorable, mais de manière beaucoup moins marquée.

Utilisé de manière directe, le modèle d'apprentissage a un taux de succès de 99% (à comparer aux 98% d'arêtes non optimales), identifie 72% des arêtes optimales et ne se trompe que sur 0,3% des arêtes non optimales. De manière plus significative, si on sélectionne les arêtes par probabilité d'être optimale, un nombre restreint d'arêtes permet de conserver toutes les arêtes optimales. Cela permet une réduction drastique des graphes et de l'espace de recherche d'une solution optimale. Des résultats préliminaires sur des graphes de taille plus grande (de 200 à 750 sommets) indiquent qu'une telle pré-sélection peut permettre de réduire de manière conséquente les temps de calcul (pour une résolution par Concorde, par exemple, et encore plus significative pour des formulations telles que Miller-Tucker-Zemlin et Dantzig-Fulkerson-Johnson) sans dégrader la qualité de la solution. Une adaptation de l'heuristique «plus-proche-voisin» en utilisant les probabilités des arêtes plutôt que la longueur ainsi qu'une adaptation de l'algorithme de Prims adapté au TSP sont testées. Les résultats préliminaires montrent une légère augmentation du nombre d'arêtes optimales dans les solutions, mais une moyenne des coûts des solutions relativement équivalente.

5 Conclusions et perspectives

Les travaux présentés montrent la possibilité et la pertinence de caractériser si une arête appartient à une solution optimale d'un TSP. Parmi les suites à donner, citons : l'extension de la caractérisation à des graphes plus variés (plus grands, TSP-lib, *etc.*) ; l'utilisation efficace pour la résolution. Il serait également intéressant d'intégrer les réflexions proposées par François et al. (2019)[6] sur une nouvelle métrique mesurant le «ratio de décisions optimales» afin de mieux qualifier les performances des méthodes proposées.

Références

[1] Bengio, Y., Lodi, A., & Prouvost, A. (2021). Machine learning for combinatorial optimization : A methodological tour d'horizon. European Journal of Operational Research, 290(2), 405–421.

[2] Mele, U. J., Gambardella, L. M., & Montemanni, R. (2021). Machine Learning Approaches for the Traveling Salesman Problem : A Survey. ACM International Conference Proceeding Series, 182–186.

[3] Vitali, T., Mele, U. J., Gambardella, L. M., & Montemanni, R. (2022). Machine Learning Constructives and Local Searches for the Travelling Salesman Problem. 59–65.

[4] Joshi, C. K., Cappart, Q., Rousseau, L. M., & Laurent, T. (2022). Learning the travelling salesperson problem requires rethinking generalization. Constraints, 27(1–2), 70–98.

[5] Sun, Y., Ernst, A., Li, X., & Weiner, J. (2021). Generalization of machine learning for problem reduction : a case study on travelling salesman problems. OR Spectrum, 43(3), 607–633.

[6] François, A., Cappart, Q., Rousseau, L.-M. (2019). How to Evaluate Machine Learning Approaches for Combinatorial Optimization : Application to the Travelling Salesman Problem.

[7] The Concorde TSP Solver, https ://www.math.uwaterloo.ca/tsp/index.html.

[8] R Core Team (2020). https ://www.R-project.org/