

# Routeplanning middels ‘stochastische koeling’

MODELLENPRACTICUM 2008

‘Stochastische koeling’ of ‘Simulated annealing’ is een combinatorisch optimalisatie-algoritme dat redelijke resultaten geeft in ingewikkelde situaties. We illustreren het algoritme aan de hand van een routeplanningsprobleem, bekend als ‘de handelsreiziger’.

## DE HANDELSREIZIGER

Een handelsreiziger moet met zijn waren een aantal steden langs, zeg de steden 1 tot en met  $n$ . Zelf woont hij in stad 1; hij wil daar beginnen en daarheen ook weer terugkeren. Hij is in het bezit van een afstandentabel, waarin voor ieder tweetal steden  $i$  en  $j$  de lengte  $D(i, j)$  van de kortste weg van  $i$  naar  $j$  staat. (We veronderstellen hier voor de eenvoud dat  $D(i, j) = D(j, i)$  voor alle  $i, j$ .) Hij wil weten in welke volgorde hij de steden moet bezoeken om zo weinig kilometers af te hoeven leggen.

### 1. MODELLERING

We stellen een route rond de  $n$  steden voor als een permutatie  $\omega \in S_n$ , dat wil zeggen een bijectie  $\omega : \{1, 2, \dots, n\} \rightarrow \{1, 2, \dots, n\}$  met de eigenschap dat  $\omega$  slechts één cykel heeft. Zij  $\Omega_n$  de verzameling van al zulke cyclische permutaties:

$$\Omega_n := \{ \omega \in S_n \mid \omega^n = \text{id} \text{ en } \omega^k(i) \neq i \text{ (} 1 \leq i \leq n, 1 \leq k < n \text{)} \}.$$

De af te leggen afstand behorende bij de route  $\omega$  is

$$V(\omega) := \sum_{i=1}^n D(i, \omega(i)).$$

Ons wiskundige probleem luidt nu:

*Gegeven de  $n \times n$ -matrix  $D$  van positieve getallen, zoek  $\omega \in \Omega_n$  zó dat de functie  $V$  in  $\omega$  zijn minimum aanneemt.*

Dit is een moeilijk probleem. Alle mogelijkheden nalopen wordt bij grote  $n$  ondoenlijk: zeg dat de handelsreiziger 30 steden moet bezoeken. Er zijn dan

$$29! \approx 10^{31}$$

cykels te bedenken, waarvan hij de lengte zou moeten berekenen.

Kan het niet handiger? Jawel, maar naar men vermoedt niet *wezenlijk*, als je tenminste met zekerheid voor elke mogelijke combinatie van steden de kortste route wilt kunnen vinden.

*Het is onbekend of er een algoritme bestaat dat het minimum vindt in niet meer dan  $c \cdot n^p$  stappen ( $c, p \in \mathbb{N}$  willekeurig, maar vast).*

Als je in staat zou zijn zo'n algoritme te vinden of te bewijzen dat het niet bestaat, dan zou dit een doorbraak in de theoretische informatica betekenen die je eeuwige roem zou bezorgen.

Laten we er dus voorlopig van uitgaan dat we zo'n algoritme niet kunnen vinden. Blijft over: zéér veel rekentijd spenderen, of tevreden zijn met een bijna-minimum. Over die laatste mogelijkheid hebben we het hier.

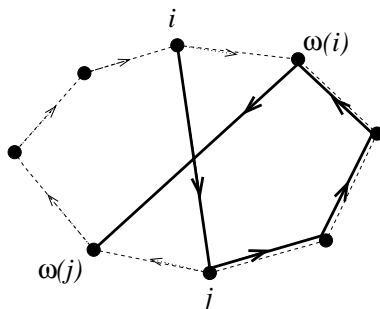
## 2. MINIMA ZOEKEN DOOR RONDWANDELEN

Vergelijk de functie  $V : \Omega_n \rightarrow [0, \infty)$  met een berglandschap: je start ergens op een plek  $\omega \in \Omega_n$  op hoogte  $V(\omega)$ , en je zoekt het dal, zeg  $\omega_0$ , dat op hoogte  $V(\omega_0)$  ligt. Het lijkt op het eerste gezicht verstandig, vanuit  $\omega$  stapjes te gaan zetten in benedenwaartse richting.

Je kunt dit doen met behulp van een computer. Zo'n machine moet liefst een eenvoudig algoritme hebben, dat hij vaak mag herhalen. Daar is hij goed in. We beginnen met het eenvoudigste:

## 3. 'THE GREEDY ALGORITHM'

We beginnen met de beschrijving van een 'hebberig' algoritme: een wandeling die alleen maar stapjes naar beneden doet om zo snel mogelijk in een minimum aan te komen. Start met een willekeurige cykel  $\omega \in \Omega_n$ . Pak twee niet-aangrenzende zijden van de cykel. Dat wil zeggen: kies  $i, j \in \{1, 2, \dots, n\}$  zó dat  $i \neq j$ ,  $i \neq \omega(j)$  en  $j \neq \omega(i)$ . Zij  $l \geq 2$  zó dat  $\omega^l(i) = j$ . De gekozen zijden zijn dan  $i \rightarrow \omega(i)$  en  $j \rightarrow \omega(j)$ . Verbind nu  $i$  met  $j$  en  $\omega(i)$  met  $\omega(j)$ , en keer op de lus die loopt van  $\omega(i)$  naar  $j$  de pijlen om:  $\nu : i \mapsto j \mapsto \omega^{l-1}(i) \mapsto \omega^{l-2}(i) \mapsto \dots \mapsto \omega(i) \mapsto \omega(j) \mapsto \omega^2(j) \mapsto \dots \mapsto i$ .



Zo krijg je een nieuwe cykel  $\nu$ . Het is gemakkelijk na te gaan of deze langer of korter is, want

$$V(\nu) - V(\omega) = D(i, j) + D(\omega(i), \omega(j)) - D(i, \omega(i)) - D(j, \omega(j)).$$

Is  $\nu$  korter, stap dan over op  $\nu$ , is hij langer, behoud dan  $\omega$ .

Kies vervolgens weer twee willekeurige niet-aangrenzende zijden van  $\omega$ , etcetera.

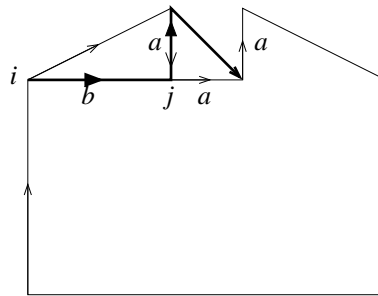
DEFINITIE. We noemen  $\sigma$  en  $\tau$  in  $\Omega_n$  *buren* (notatie:  $\sigma \sim \tau$ ) als zij  $n - 2$  zijden gemeen hebben. Dus  $\nu$  hierboven beschreven is een buur van  $\omega$ .

**Bewering 1.** *Stappend van buur naar buur kun je elke cykel vanuit elke andere bereiken.*

Dit bewijzen we hier niet. Probeer het voor jezelf na te gaan.

**Bewering 2.** *Desondanks bereikt het ‘hebberige’ algoritme niet altijd het minimum. Soms blijft het in een lokaal minimum steken.*

VOORBEELD.



Alle buren van de dunlijnige route hebben een grotere lengte, in het bijzonder, als  $a < b$ :

$$b + a + a\sqrt{2} > \sqrt{a^2 + b^2} + a + a.$$

(Ga na!)

#### 4. VERBETERING VAN HET ALGORITME: ‘TEMPERATUUR’

Wie het dal wil bereiken moet dus niet steeds maar naar beneden lopen, maar af en toe ook eens omhoog stappen. Hoe reglementeren we dit? Met stochastiek!

We zitten in  $\omega$ , en kiezen een willekeurige buur  $\nu$  uit. Als  $V(\nu) \leq V(\omega)$ , dan stappen we naar  $\nu$  toe. Maar als  $V(\nu) > V(\omega)$ , dan accepteren we deze verslechtering met een kans die exponentieel van het lengteverschil afhangt. We krijgen zo de volgende  $(n - 1)! \times (n - 1)!$ -matrix van overgangskansen

$$P(\omega, \nu) := \begin{cases} \frac{1}{B} & \text{als } \nu \sim \omega \text{ en } V(\nu) \leq V(\omega); \\ \frac{1}{B} e^{\frac{V(\omega) - V(\nu)}{T}} & \text{als } \nu \sim \omega \text{ en } V(\nu) > V(\omega); \\ \sum_{\{\mu \mid V(\mu) > V(\omega)\}} \frac{1}{B} \left(1 - e^{\frac{V(\omega) - V(\mu)}{T}}\right) & \text{als } \nu = \omega; \\ 0 & \text{anders.} \end{cases}$$

Hierbij is  $B = \frac{1}{2}n(n-3)$  het aantal buren van elke cykel, en  $T$  een positieve constante, die we de *temperatuur* van het algoritme noemen.

De overgangsmatrixmatrix  $P$  definieert een Markovketen waarvan de toestanden cyclen zijn.

**Stelling 3.** *De kansverdeling*

$$\pi(\omega) = \pi_T(\omega) := \frac{1}{Z_T} \cdot e^{-V(\omega)/T},$$

(met  $Z_T := \sum_{\omega \in \Omega_n} \exp(-V(\omega)/T)$ ) is een evenwichtsverdeling voor deze Markovketen.

*Bewijs.* Je gaat gemakkelijk na dat voor alle  $\omega$  en  $\nu$  geldt:  $\pi(\omega)P(\omega, \nu) = \pi(\nu)P(\nu, \omega)$ . Hieruit volgt dat

$$\sum_{\omega \in \Omega_n} \pi(\omega)P(\omega, \nu) = \sum_{\omega \in \Omega_n} \pi(\nu)P(\nu, \omega) = \pi(\nu).$$

Dus  $\pi$  is een evenwichtstoestand. □

## 5. EEN RECEPT UIT DE SMEDERIJ

In de statistische mechanica kent men de zogenaamde Boltzmann-verdeling, gegeven door

$$\pi_T(\omega) = \frac{1}{Z_T} e^{-E(\omega)/kT}.$$

$k$  is de constante van Boltzmann,  $E(\omega)$  is de *energie* van toestand  $\omega$ , en  $T$  de *temperatuur* van de verdeling. De punten  $\omega$  stellen configuraties van een fysisch systeem voor, bijvoorbeeld een stuk ijzer. Het is in de fysica bekend dat door afkoeling een systeem in zijn grondtoestand kan worden gebracht. Inderdaad is de verdeling  $\lim_{T \downarrow 0} \pi_T$  geconcentreerd op het minimum van de energiefunctie  $E$  (gesteld dat dit minimum eenduidig is). Dit *koelen* van het systeem moet niet te snel gebeuren: in de smederij weet men dat ijzer dat te snel afkoelt bros wordt: het vindt een *lokaal* maar geen *globaal* minimum! Locale minima zijn onregelmatige, hier en daar onderbroken kristalstructuren. Snel koelen is te ‘hebberig’!

Laten we deze gedachte eens vertalen naar de Handelsreiziger. We krijgen dan het volgende recept. Kies eerst een hoge temperatuur, zeg in de orde van de afstanden tussen de steden. Loop daarmee enige tijd rond door de ruimte van cyclen. Dit levert een evenwichtsverdeling  $\pi_T$ , die nog weinig reliëf vertoont. Verlaag nu de temperatuur, en wacht opnieuw op evenwicht. Etcetera.

**Stelling 4.** *De verdeling  $\pi_T$  is de enige evenwichtsverdeling van de Markovketen bij temperatuur  $T$ . Bovendien nadert de kansverdeling over de cyclen, onafhankelijk van de gekozen begincykel, uiteindelijk tot  $\pi_T$ .*

*Bewijs.* Uit Bepaling 1 volgt dat de Markovketen irreducibel is, en uit het feit dat voor veel cykels  $\omega$  geldt dat  $P(\omega, \omega) > 0$ , volgt dat hij niet periodiek is. De Hoofdstelling voor Markovketens (“Streven naar Evenwicht”) zegt nu dat  $\pi_T$  de enige evenwichtsverdeling is, en dat de kansverdeling  $\vartheta \circ P^k$  voor elke beginverdeling  $\vartheta$  nadert tot  $\pi_T$  als  $k$  nadert tot oneindig.  $\square$

Zij  $M \subset \Omega$  de verzameling van cykels met minimale lengte. (Meestal zal  $M$  maar één element hebben: de kortste route.)

**Gevolg 5.**  $\lim_{T \downarrow 0} \lim_{k \rightarrow \infty} \mathbb{P}[\text{cykel ligt na } k \text{ stappen in } M] = 1.$

Alleen in deze volgorde van de limieten! (Welke kans stelt de omgekeerde limiet voor, denk je?)

Bedenk echter wel dat bij lagere temperaturen in het algemeen steeds hogere  $k$ -waarden nodig zijn!

*Bewijs.* We moeten nog aantonen dat

$$\lim_{T \downarrow 0} \sum_{\omega \in M} \pi_T(\omega) = 1.$$

Welnu, er geldt

$$\pi_T(\omega) = \frac{e^{-V(\omega)/T}}{\sum_{\nu \in \Omega_n} e^{-V(\nu)/T}} = \left( \sum_{\nu \in \Omega_n} e^{(V(\omega) - V(\nu))/T} \right)^{-1}.$$

Als  $\omega \notin M$ , dan is  $\lim_{T \downarrow 0} \pi_T(\omega) = 0$ , immers, voor elke  $\mu \in M$  geldt dan:

$$\frac{1}{\pi_T(\omega)} = \sum_{\nu \in \Omega_n} e^{(V(\omega) - V(\nu))/T} \geq e^{(V(\omega) - V(\mu))/T} \xrightarrow{T \rightarrow 0} \infty.$$

Voor  $\omega \in M$  geldt daarentegen:

$$\lim_{T \downarrow 0} \frac{1}{\pi_T(\omega)} = \lim_{T \downarrow 0} \sum_{\nu \in \Omega_n} e^{(V(\omega) - V(\nu))/T} = \sum_{\nu \in M} 1 = \#(M),$$

Dus dan is  $\lim_{T \downarrow 0} \pi_T(\omega) = 1/\#(M)$ , en we zien dat de limietverdeling gelijke kansen toekent aan elke minimale cykel  $\omega \in M$ .  $\square$