

求解 TSP 的改进模拟退火算法^①

徐小平, 朱秋秋

(西安理工大学 理学院, 西安 710054)

摘要: 利用模拟退火算法给出了求解旅行商问题的一种新方法. 在模拟退火算法的基本原理基础上, 针对解变换只交换两个城市而容易落入局部最优解的缺点, 提出了在解变换产生新解的过程中, 采用逆转操作的改进方法. 这使得迭代过程突破局部最优圈, 然后跳到另一个搜索空间. 这样能够使其更具多样性, 改善了模拟退火算法的局部搜索能力. 并将其应用于求解旅行商问题, 显著改善了它局部寻优的能力. 在几个公共测试数据集上的结果表明, 算法稳定可行, 在求解组合优化问题方面, 具有良好的性能.

关键词: 旅行商问题; 模拟退火算法; 接受准则; 逆转操作

Improved Simulated Annealing Algorithm of Solving TSP

XU Xiao-Ping, ZHU Qiu-Qiu

(School of Sciences, Xi'an University of Technology, Xi'an 710054, China)

Abstract: A new method of solving traveling salesman problem is given by using simulated annealing algorithm. Based on the basic principle of simulated annealing algorithm, in view of the faults easily falling into local optimal solution when transformation only exchange two of the cities, puts forward an improved method by using reverse operation in the process of creating new solution. This makes the iterative process breakthrough circle of local optimum and jumps to another search space, which makes it more diversified and improves the local search ability of simulated annealing algorithm. And it is applied to solve TSP, which improves its ability of local search. The experiment results on several public test data show that the proposed approach is stable and feasible. Moreover, it has good performance in solving combinatorial optimization problems.

Key words: TSP; Simulated annealing algorithm; Acceptable rule; Reverse operation

旅行商问题又译为旅行推销员问题、货郎担问题, 简称 TSP 问题. 它是最基本的线路问题, 也是著名的 NP 完全难题和典型的组合优化问题^[1,2]. 该问题是单一旅行者由起点出发, 不重复地走完其余地点并回到原出发点, 在所有可能的路径中求出路径长度最短的一条. 它最早是由 Dantzing 和 Ramser 于 1959 年以车辆线路问题的方式被提出的, 很快就引起运筹学、应用数学、组合数学、图论与网络分析、物流科学、计算机应用等学科的专家与运输计划制定者和管理者的极大重视, 成为运筹学与组合优化领域的前沿和研究热点^[3]. 现实生活中有很多问题可以归结为旅行商问

题, 比如邮路问题、装配线上的螺帽问题和产品的生产安排问题等^[4]. 然而, 目前还没有有效的算法解此问题^[5,6], 因而对 TSP 求解方法的研究具有重要的实际价值和理论意义.

因模拟退火算法独特的优化机制及其对问题信息依赖较少, 且通用性、灵活性较强^[7]. 在处理全局优化和离散变量优化等困难问题中, 模拟退火算法具有传统算法无可比拟的优势. 目前, 它已在换热网络^[8], 机械故障诊断^[9], 自身的分形和相变^[10]等领域中具有广泛的应用.

本文首先对基本模拟退火算法的过程进行了描述

^① 基金项目: 国家自然科学基金(61273127); 陕西省自然科学基金基础研究计划(2014JM8325); 陕西省教育厅科研计划(14JK1538)

收稿时间: 2015-03-25; 收到修改稿时间: 2015-05-28

和分析. 然后, 针对基本模拟退火算法只交换两个城市产生新解, 容易陷入局部极值的缺点, 在解变换产生新解的过程当中, 使用逆转操作. 先随机选择两个城市, 再交换这两个城市之间的所有城市, 使之间的城市成逆序排列, 从而得到一种改进方法. 接着, 将其应用于求解 TSP. 最后, 仿真实验结果表明, 本文所给方法在避免陷入局部极小值、提高解的空间的搜索能力和扩大搜索范围方面具有明显的优越性.

1 基本模拟退火算法

1.1 算法的思想

基本模拟退火算法思想最早是由 N. Metropolis 等人于 1953 年提出的^[11, 12]. 1983 年, Kirkpatrick 等成功地将退火思想引入组合优化领域^[13], 提出了一种解决大规模组合优化问题的有效近似模拟退火. 模拟退火是局部搜索算法的扩展, 从理论上讲, 它是一个全局最优算法^[14]. 它是基于迭代求解策略的一种随机寻优算法, 源于对固体退火过程的模拟^[15], 采用 Metropolis 准则, 并用一组称为冷却进度表的参数控制算法进程, 使算法在多项式时间里给出一个近似最优解.

1.2 物理退火与模拟退火

模拟退火算法模拟物理学中的晶体退火过程, 分为升温过程和降温过程. 升温时, 固体内部的分子随温度升高变得无序, 其内能增大. 而当降温时, 固体内部的分子慢慢变的有序, 在每个温度都达到平衡, 最后在常温时达到内能最小.

将模拟退火算法对组合优化问题的求解与物理退火对应起来, 其关系如表 1 所示.

表 1 模拟退火与物理退火

模拟退火	物理退火
解	状态
目标函数	能量函数
最优解	最低能量的状态
设定初始高温	加温过程
Metropolis 准则的搜索	等温过程
温度参数的下降	冷却过程

1.3 接受准则—Metropolis 准则

Metropolis 等在 1953 年提出了重要性采样法, 其基本思想是对固体在恒定温度下达到热平衡的过程采样时着重选择那些具有重要贡献的状态, 可较快达到较好的结果. 函数优化的 Metropolis 接受准则如下:

用固体退火模拟组合优化问题, 将内能 E 模拟为目标函数值 f , 温度 T 演化成控制参数 t , 随机得到解组合优化问题的模拟退火算法: 由初始解 i 和控制参数初值 t 开始, 对当前解重复“产生新解 → 计算目标函数差 → 接受或舍弃”的迭代, 并逐步衰减 t 值, 算法终止时的当前解即为所得近似最优解, 这是基于蒙特卡洛迭代求解法的一种启发式随机搜索过程.

由解 i 过渡到解 j 的接受概率用以下的 Metropolis 准则确定如下.

$$P(t_k) = P(i \Rightarrow j) = \begin{cases} t & f(j) \leq f(i) \\ \exp\left(\frac{f(i)-f(j)}{t_k}\right) & f(j) > f(i) \end{cases}$$

其中, i 为初始解; j 为新解; $f(i)$ 是解 i 的函数值; $f(j)$ 为解 j 的函数值; t 为控制参数的初值; P 为温度趋于平衡时的概率; t_k 表示 Metropolis 算法第 k 次迭代时控制参数 t 的值.

经过大量迁移以后, 系统将趋于能量较低的平衡状态, 各状态的概率将趋于某种概率分布. 同时, 需要注意, 这种重要性采样过程在高温下可接受与当前状态能量差较大的新状态, 而在低温下基本上只接受与当前能量差较小的新状态, 当温度趋于零时, 就不能接受比当前状态能量高的新状态. 这与不同温度下热运动的影响完全一致.

1.4 冷却进度表

称调整模拟退火法的一系列重要参数为冷却进度表. 一个冷却进度表应当规定下述参数: ① 控制参数 t 的初值. 一般要求初值 t_0 的值要充分大, 即一开始处于高温状态, 且 Metropolis 的接受率约为 1. ② 控制参数 t 的衰减函数. 衰减函数用于控制温度的退火速度, 用 K 表示. 一个常用的函数为 $T(+1) = K * T(n)$, 其中, K 是一个非常接近于 1 的常数. ③ Markov 链的长度 L_k 表示 Metropolis 算法第 k 次迭代时产生的变换数. 在控制参数 t 的衰减函数已选定的前提下, 对 Markov 链长度 L_k 的选取, 应该满足在控制参数的每一个取值上解的概率分布都趋于平稳分布. ④ 结束条件的选择.

2 改进模拟退火算法

2.1 改进模拟退火算法

模拟退火方法从某个初始解出发, 经过大量解的变换后, 可以求得给定控制参数值时组合优化问题的

相对最优解, 然后减少控制参数 T 的值, 重复执行 Metropolis 算法, 就可以控制参数 T 趋于零时, 最终求得组合优化问题的整体最优解.

它是依赖邻域结构的迭代方法, 如何找邻域的解直接影响收敛速度和最优解. 意味着解的变换即新解的产生对问题的求解非常重要. 对旅行商问题而言, 基本的模拟退火算法的新解是通过随机选择两个城市并交换这两个城市获得, 这样, 很容易落入局部最优解. 针对这一缺点, 本文提出了在解变换产生新解的过程中, 采用逆转操作的方法. 即随机选择两个城市后, 逆转这两个城市之间的所有城市.

2.2 改进模拟退火算法求解 TSP

TSP 可以描述为: 设有 n 个城市, 分别用 $1, 2, \dots, n$ 代表. 城市 i 和城市 j 之间的距离为 $d(i, j), i, j = 1, 2, \dots, n$. TSP 是要找到遍访每个城市恰好一次的一条回路, 且其路径总长度为最短. 它的解空间是遍访每个城市恰好一次的所有回路, 是 $\{1, 2, \dots, n\}$ 的所有循环排列的集合.

改进模拟退火算法求解 TSP 的步骤如下:

step1. 控制参数的设置. 需要控制的参数有降温速率 Q , 初始温度 T_0 , 结束温度 T_{end} 以及链长 L_k .

step2. 初始解. 对于 n 个城市的 TSP 问题而言, 初始解为 $1 \sim n$ 的一个排序, 采用随机排列的方式给出.

step3. 解变换产生新解. 对当前的解进行变换, 产生新的路径数组, 经典的变换是用产生随机数的方法产生将要交换的两个城市, 用二邻域变换法产生新的路径. 例如, $n=10$ 时, 产生两个 $[1, 10]$ 范围内的随机整数 r_1 和 r_2 , 确定两个位置, 将其对换位置, 如 $r_1=2, r_2=7$ 时

10 2 3 4 1 5 7 9 8 6

得到的新解为

10 7 3 4 1 5 2 9 8 6

本文的变换是使用逆转操作, 首先, 随机选择两个城市, 然后, 逆转这两个城市间的所有城市. 对于逆转操作, 如何是所谓的逆转呢? 例如, 若 $r_1=2, r_2=7$ 时

10 2 3 4 1 5 7 9 8 6

得到的新解为

10 2 9 7 5 1 4 3 8 6

step4. Metropolis 准则. 路径长度为 $f(S)$, 则当前解的路径为 $f(S_1)$, 新解得路径为 $f(S_2)$, 路径差为 $df = f(S_2) - f(S_1)$, 则 Metropolis 准则为

$$P = \begin{cases} 1 & df < 0 \\ \exp(-\frac{df}{T}) & df \geq 0 \end{cases}$$

如果 $df < 0$, 则以概率 1 接受新的路径; 否则, 以概率 $\exp(-df/T)$ 接受新的路径.

step5. 降温. 利用降温速率 Q 进行降温, 即 $T = QT$, 若 T 小于结束温度, 则停止迭代输出当前状态, 得出最优解; 否则, 继续迭代.

3 仿真实验

为了检验利用本文所给的改进模拟退火算法求解 TSP 的有效性和可行性, 这里选用国际上通用的 TSP 测试库 TSPLIB 中的 Oliver30 作为实例, 其具体坐标数据如表 2 所示.

在利用本文所给的改进模拟退火算法求解时, 算法的参数设置为: 初始温度 $T_0=1000$, 终止温度 $T_{end}=0.001$, 迭代次数 $L_k=200$ 和降温速率 $Q=0.9$.

首先, 随机选择种群的一个初始值. 然后, 利用本文方法进行一次求解, 得到的随机路线图, 优化过程图 and 最优路线图分别如图 1 和图 2 所示. 得到的最优路线的解为

1→29→30→28→26→27→25→24→23→22→21→20→18→19→17→16→15→14→13→12→11→10→9→8→7→5→6→4→3→2→1, 最优路径的总距离为 427.9859.

表 2 Oliver30 的坐标

序号	坐标	序号	坐标	序号	坐标	序号	坐标
1	x:87 y:7	9	x:74 y:78	17	x:7 y:64	25	x:25 y:38
2	x:91 y:38	10	x:71 y:71	18	x:22 y:60	26	x:41 y:26
3	x:83 y:46	11	x:58 y:69	19	x:25 y:62	27	x:45 y:21
4	x:71 y:44	12	x:54 y:62	20	x:18 y:54	28	x:44 y:35
5	x:64 y:60	13	x:51 y:67	21	x:4 y:50	29	x:58 y:35
6	x:68 y:58	14	x:37 y:84	22	x:13 y:40	30	x:52 y:32
7	x:83 y:69	15	x:41 y:94	23	x:18 y:40		
8	x:87 y:76	16	x:2 y:99	24	x:24 y:42		

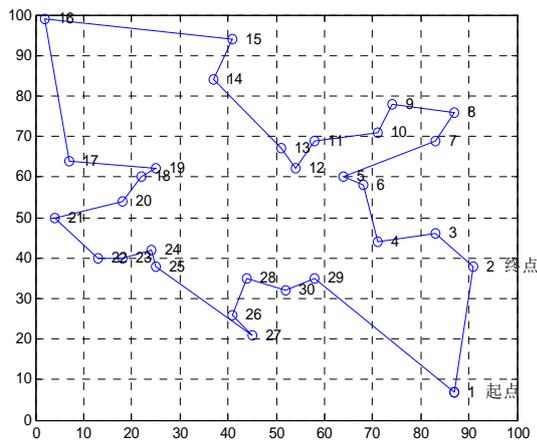


图 1 算法最优路线图

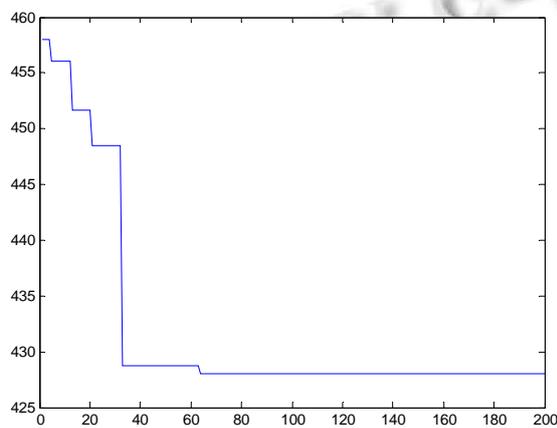


图 2 算法优化过程图

为了进一步说明本文所给方法的有效性, 以下讨论当城市个数增加时的情形. 为此, 选用国际上通用的 TSP 测试库 TSPLIB 中的 Att48 作为城市坐标, 进行仿真实验.

首先, 随机选择种群的一个初始值. 然后, 利用本文方法进行一次求解, 得到的随机路线图, 优化过程图和最优路线图分别如图 3 和图 4 所示. 得到最优路线为

32→33→34→35→43→36→37→38→39→41→40→42→46→45→44→25→24→23→19→20→21→22→47→48→2→1→6→5→7→9→8→10→11→12→13→4→3→14→15→16→17→18→26→27→28→29→30→31→32, 最优路径的总距离为 35283.4816.

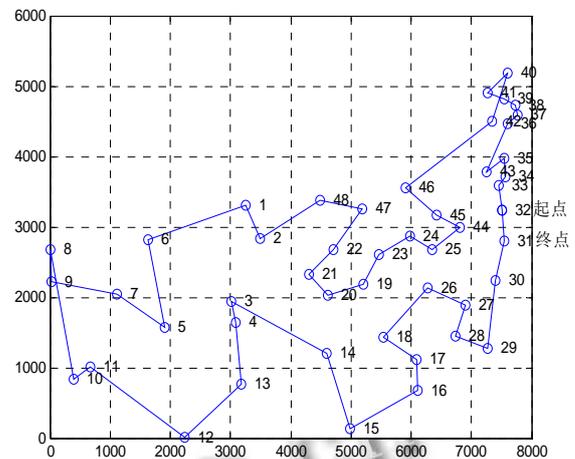


图 3 算法最优路线图

利用文中所提方法进行 50 次求解后, 其结果的最差解, 最好解和平均值均罗列在表 3 中. 为了说明本文所给方法的有效性, 再分别利用基本模拟退火算法 (Basic Simulated Annealing Algorithm, BSAA), 文献[5]中的遗传算法(Genetic Algorithm, GA)和文献[6]中的蚁群算法(Ant Colony Algorithm, ACA)对上问题进行 50 次求解, 将结果的最差解, 最好解和平均值仍分别罗列在表 3 中.

表 3 对 Oliver30 的求解结果

算法	最差解	最好解	平均值
本文方法	431	420	423
BSAA	476	424	433
GA	489	422	456
ACA	440	421	432

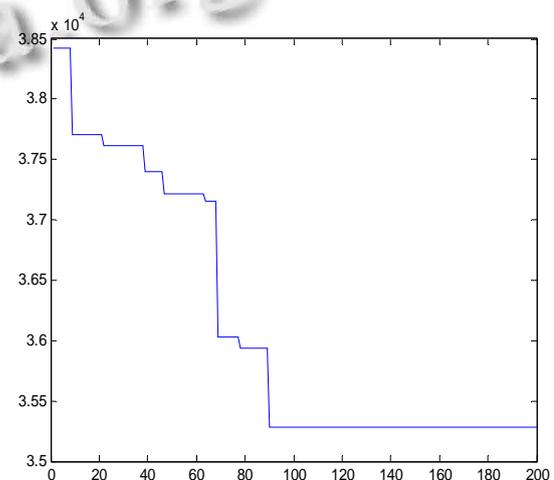


图 4 算法优化过程图

利用文中所提方法进行 50 次求解后, 其结果的最

差解,最好解和平均值均罗列在表4中.分别利用上面涉及的方法仍进行50次求解后,其结果的最差解,最好解和平均值仍分别罗列在表4中.

表4 对Att48的求解结果

算法	最差解	最好解	平均值
本文方法	35892	33522	33792
BSAA	40536	34958	35176
GA	42458	38541	38732
ACA	36351	34611	34679

通过以上结果可以看出,本文所提改进算法在求解TSP的过程时,得到的结果要优化得多,也比较稳定,令人满意,说明本文所给算法是有效的.

4 结语

模拟退火算法是依赖邻域结构的迭代方法,模拟退火算法对选择试验解比较敏感.本文针对基本模拟退火算法解变换只交换两个城市而容易落入局部最优解的缺点,提出了使用逆转操作的改进方法.即就是说,在求解TSP的过程中,提出了随机选择两个城市后,逆转这两个城市间的所有城市的改进方法.针对不同个数的城市进行了仿真实验,结果充分证明了本文算法具有的明显的优越性.

参考文献

- Garey MR, Johnson DS. Computers and Intractability: A Guide to the Theory of NP-Completeness. San Francisco: Freeman W H. 1979.
- Lawer E, Lenstra J, Kan AK, Shmoys D. The Traveling Salesman Problem. New York: Wiley International Publication, 1985.
- Dantzing GB, Ramser RH. The truck dispatching problem. Management Science, 1959, 25 (6): 37-39.
- 余详宜,崔国华,邹海明.计算机算法基础.第2版.武汉:华中科技大学,1998.
- 牟衍臣,谢东来,闫威,聂晶,李想.基于遗传算法航路规划TSP问题的研究.系统仿真学报,2013,25(S):86-89.
- 郝春梅,吴波.蚁群算法实现求解TSP问题.微计算机信息.2012,28(9):480-482.
- 李金忠,夏洁武,曾小荟,曾劲涛,刘新明,冷明,凌宇.多目标模拟退火算法及其应用研究进展.计算机工程与科学,2013,35(8):79-80.
- 彭富裕,崔国民,陈家星.基于模拟退火算法的换热网络双层优化方法.石油化工,2014,43(5):536-537.
- 纪华.模拟退火算法与支持向量机在机械故障诊断中的应用.宁夏大学学报,2014,35(1):142-143.
- 张贵清,余孜,白宇,杨秋英.模拟退火算法中分形和相变现象.南开大学学报,2013,46(1):25-26.
- Kirkpatrick S, Gelatt CD, Vecchi MP. Optimization by simulated annealing. Science, 1983, 220 (4598): 671-680.
- Metroplolis N, Rosenbluth AW, Rosenbultn MN, Teller AH. Equation of state calculations by fast computing machines. Journal of Chemical Physica, 1953, 21(6):1087-1092.
- in W, Qian CJ. Adaptive control of nonlinearly parameterized systems: a nonsmooth feedback framework. IEEE Trans. on Automatic Control, 2002,47(5): 757-774
- 康立山,谢云,尤矢勇.非数值并行算法(第一册):模拟退火算法.北京:科学出版社,1994.
- yan EP. A universal adaptive stabilizer for a class of nonlinear systems. Systems and Control Letters, 1991, 16 (3): 209-218.