Simulated Annealing Uma resolução para Caixeiro Viajante

César Eduardo de Souza¹, Guilherme Diel¹

¹Departamento de Ciência da Computação Universidade do Estado de Santa Catarina (UDESC) – Joinville, SC – Brazil

{cesar.souza, guilherme.diel}@edu.udesc.br

Resumo. Algoritmos heurísticos se alicerçam em técnicas de busca de solução satisfatória. Um deles é o Simulated Annealing, que se baseia no processo de resfriamento de metais. Este algoritmo é capaz de resolver problemas NP-Hard e NP-Completo, como o problema do Caixeiro Viajante, que consiste em determinar o ciclo de menor custo que percorre um conjunto de cidades, visitando cada uma exatamente uma vez e retornando ao ponto de partida. Neste trabalho, apresentamos uma implementação do Simulated Annealing para resolver o problema do Caixeiro Viajante, com resultados satisfatórios e consistentes, principalmente para instâncias de maior dimensão. Além disso, discutimos possíveis aplicações futuras e comparações com outras abordagens.

1. Introdução

Foi no século XX que se iniciou a busca pela resolução de problemas NP, NP-Hard e NP-Completo usando ferramentas computacionais. Estas, portanto, foram, em sua maioria, desenvolvidas com base em algoritmos heurísticos — alicerçados em técnicas de busca de solução não necessariamente ótimas, mas sim satisfatórias. — Sendo assim, alguns destes tornaram-se mais disseminados na literatura científica, como a **Busca Gulosa**, **Algoritmo A***, **Subida de Encosta** e **Simulated Annealing**.

O método de **Simulated Annealing** teve sua lógica concebida a partir do método de anelização de materiais, Metropolis, desenvolvido por Gibbs em 1953. Baseado na fabricação de anéis, este método usa como base o fato de que, quanto mais quente está o material, maior se torna a facilidade de moldá-lo.Sob o mesmo ponto de vista, este método consiste em uma sequência de temperaturas decrescentes em que, quanto maior a temperatura atual, mais aleatorizadas são as otimizações geradas pelo algoritmo, sendo que, quando a temperatura chega a um certo ponto, idealiza-se a otimização do resultado conforme decresce a temperatura, até que esta se torne mínima.

Um problema muito conhecido e discutido na literatura, que é capaz de ser resolvido por algoritmos heurísticos, é o problema do **Caixeiro Viajante** (*Traveling Salesman Problem* - TSP), que consiste em, dado um conjunto de cidades e as distâncias entre cada par de cidades, determinar o ciclo hamiltoniano de custo mínimo que visita cada cidade exatamente uma vez e retorna à cidade de origem. Formalmente, dado um conjunto finito de vértices $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ e uma função de custo $c: V \times V \to R^+$, o objetivo é encontrar uma permutação $\pi \in S_n$ que minimize o custo total da rota, ou seja:

$$\min_{\pi \in S_n} \left(c(v_{\pi(1)}, v_{\pi(2)}) + c(v_{\pi(2)}, v_{\pi(3)}) + \ldots + c(v_{\pi(n)}, v_{\pi(1)}) \right) \tag{1}$$

Ao longo deste relatório, será abordada uma proposta de implementação do **Simulated Annealing** para resolução do problema do Caixeiro Viajante, um problema NP-Completo que consiste em encontrar o ciclo hamiltoniano de menor custo.

Este relatório está organizado da seguinte maneira: a seção 2 apresenta estratégias utilizadas, descrições, justificativas de escolhas, fórmulas utilizadas e descrições. Em seguida, na seção 3 são abordadas descrições dos experimentos, configurações utilizadas e descrições dos resultados obtidos. Outrossim, na seção 4 expõem-se considerações sobre os resultados obtidos e análises críticas sobre os mesmos. Por fim, na seção 5 mostram-se considerações sobre o trabalho desenvolvido e identificação de direcionamentos futuros na pesquisa.

2. Metodologia de Desenvolvimento

O método de Simulated Annealing consiste em:

- 1. Para uma temperatura T_i , realizar N vezes:
 - Realizar uma perturbação aleatória no estado atual estado₀, gerando um novo estado_i
 - Calcular a variação de energia $\Delta E = E(estado_i) E(estado_0)$
 - Se $\Delta E < 0$ (melhora na energia), aceitar a transição ($estado_i \rightarrow estado_0$)
 - Caso contrário, aceitar a transição com probabilidade $P_{accept}(T_i)$
- 2. Critério de parada:
 - Se $T_i \leq T_f$ (temperatura final) ou o sistema atingir convergência (e.g., $\Delta E \approx 0$ por k iterações consecutivas)
 - Retornar o *estado*₀ como solução
 - Caso contrário, reduzir a temperatura ($T_i \leftarrow \alpha T_i$, com $0 < \alpha < 1$) e retornar ao Passo 1

A aplicação do método de **Simulated Annealing** para a otimização do problema do Caixeiro Viajante foi realizada por meio da linguagem de programação *Python*, junto com a biblioteca *Numpy*. A Figura 1 retrata o passo a passo de como foi implementado este algoritmo.

A Figura 1 apresenta as etapas do algoritmo, que foi implementado da seguinte maneira:

1. Inicialização:

- Temperatura inicial $T_0 = 1000$
- Taxa de resfriamento $\alpha = 0.99$
- Temperatura final $T_f = 0.1$
- Número de iterações por temperatura N=1000
- $SA_{max} = 1,5$ ou 10 (limite mínimo de temperatura)

2. Iteração por temperatura:

- (a) Gerar nova solução aleatória (modificando uma variável)
- (b) Calcular $\delta E = E_{nova} E_{atual}$
- (c) Se $\delta E < 0$, aceitar a nova solução
- (d) Caso contrário, aceitar com probabilidade:

$$P_{accept} = \exp\left(-\frac{\Delta E}{T_i}\right) \tag{2}$$

| 3. | Restriamento: |
|----|--|
| | (a) Foram utilizados 3 tipos diferentes de funções de diminuição de tempera- |
| | tura: Linear, Exponencial e Logaritmo |
| | (b) Verificar critério de parada: |
| | • Se $T_i \leq T_{min} \rightarrow \text{Parar}$ |

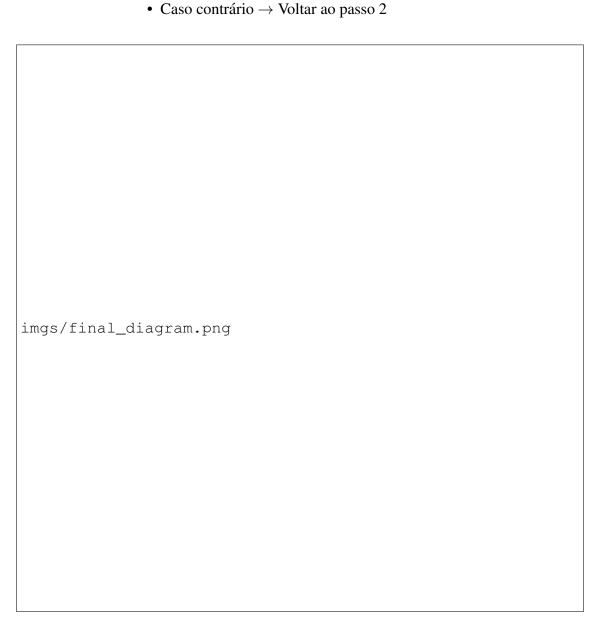


Figura 1. Diagrama do algoritmo de Simulated Annealing

3. Descrição de Experimentos/Simulações e Resultados Obtidos

As configurações utilizadas foram: Temperatura inicial = 1.000, Temperatura minima = 0.01. A taxa de resfriamento foi de 3 tipos diferentes: Linear, Exponencial e Logarítmica. Na linear, a temperatura diminuiu de 1 em 1, enquanto na exponencial diminuiu sempre 95% da temperatura atual e na logarítmica diminuiu segundo a função: Temperatura atual / (1 + 0.001 * iteração)

Nestas configurações foram obtidos resultados para bases de eil51 e kroA100 como os seguintes gráficos de convergência, com o SA de 1 a 10 nas respectivas figuras 2 e 3.

Conseguimos perceber que todos os gráficos chegaram a energia final parecida, entretanto, quanto maior o SA_{MAX} , melhor tende a ser o resultado final.

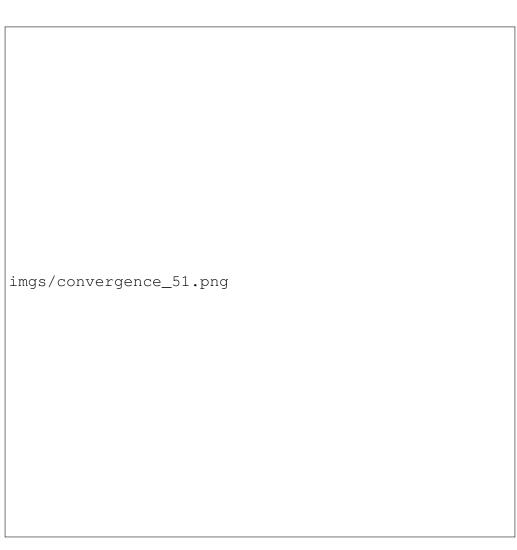


Figura 2. Convergência para eil51

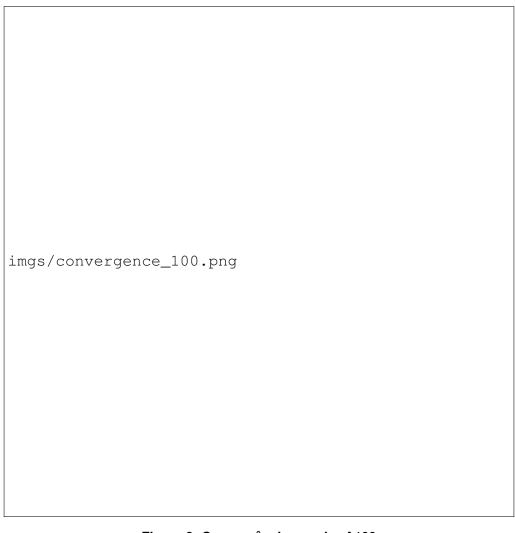


Figura 3. Convergência para kroA100

Ademais, foi gerado os boxplots para cada um dos 3 tipos de funções de diminuição de temperatura, com os respectivos resultados obtidos, conforme as figuras 4 e 5.

Aqui é possível perceber que no arquivo com menor quantidade de nós 4, o exponencial deu o melhor resultado. Porém, no maior arquivo, o resultado 5 foi o linear que apresentou o melhor resultado.

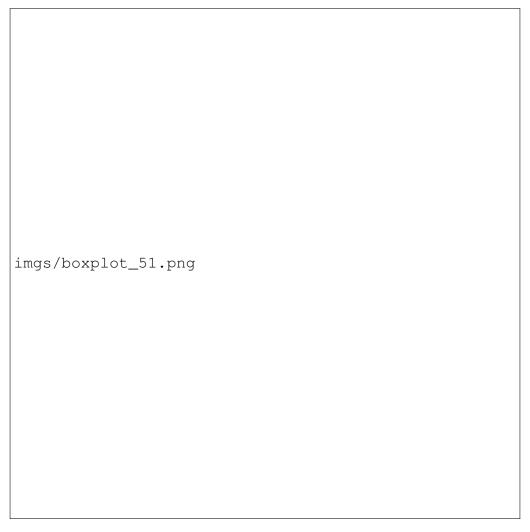


Figura 4. Boxplots para eil51



Figura 5. Boxplots para kroA100

Além disso, é possível verificar a seguinte tabela com média e desvio padrão de 30 execuções do experimento, apontados pelos consecutivos boxplots.

A tabela confirma o que os gráficos mostraram, de maneira que mostra o exponencial como o melhor resultado para o menor arquivo, enquanto o linear foi o melhor resultado para o maior arquivo.

Tabela 1. Média e Desvio Padrão dos Resultados Obtidos

| Arquivo | Algoritmo de Resfriamento | Média | Desvio Padrão |
|---------|---------------------------|----------|---------------|
| eli51 | EXP | 517.55 | 17.44 |
| eli51 | LINEAR | 712.49 | 36.62 |
| eli51 | LOG | 560.58 | 25.29 |
| kroA100 | EXP | 37455.66 | 2638.58 |
| kroA100 | LINEAR | 32617.12 | 2189.60 |
| kroA100 | LOG | 41868.92 | 2443.86 |

Dessa maneira, é possível obter uma visão aprofundada da execução do algoritmo,

discutida na seção a seguir.

4. Análise dos resultados obtidos.

A análise dos resultados obtidos permite verificar a influência significativa da estratégia de resfriamento na qualidade das soluções encontradas pelo algoritmo de **Simulated Annealing** para o problema do Caixeiro Viajante. Os dados apresentados demonstram que, embora todas as abordagens de resfriamento tenham convergido para soluções de energia final semelhante, a taxa de resfriamento e a quantidade de iterações (SA_{MAX}) impactaram diretamente a qualidade da solução final.

Observa-se que, para a instância *eil51*, de menor dimensão, a estratégia de resfriamento exponencial apresentou desempenho superior, obtendo a menor média de custo e o menor desvio padrão. Este comportamento pode ser atribuído ao fato de que, em instâncias menores, uma redução mais rápida da temperatura favorece a exploração eficiente do espaço de soluções, evitando a estagnação em mínimos locais sem comprometer a convergência.

Em contraste, para a instância *kroA100*, de maior dimensão, o resfriamento linear demonstrou desempenho superior. A diminuição gradual e uniforme da temperatura parece ter permitido uma exploração mais robusta do espaço de soluções, resultando em soluções de menor custo médio e menor variabilidade em relação às demais estratégias. Esse comportamento sugere que, em instâncias mais complexas, uma taxa de resfriamento mais conservadora contribui para um equilíbrio mais eficaz entre exploração e intensificação.

Adicionalmente, constata-se que, independentemente da estratégia de resfriamento, o aumento de SA_{MAX} resultou, de forma consistente, em melhores soluções finais, evidenciando a relevância da quantidade de iterações no desempenho do algoritmo.

Portanto, conclui-se que a escolha da estratégia de resfriamento deve considerar a dimensão e a complexidade da instância do problema, sendo o resfriamento exponencial mais adequado para instâncias menores e o resfriamento linear mais indicado para instâncias maiores. Esta constatação destaca a necessidade de parametrização criteriosa para maximizar a eficiência do **Simulated Annealing** na resolução do problema do Caixeiro Viajante.

5. Conclusões e Trabalhos Futuros

Neste trabalho, foi apresentada uma implementação do algoritmo de **Simulated Anne-** aling aplicado à resolução do problema do Caixeiro Viajante, avaliando o impacto de diferentes estratégias de resfriamento sobre a qualidade das soluções obtidas. As análises realizadas demonstraram que a escolha da função de resfriamento exerce influência relevante no desempenho do algoritmo, sendo que o resfriamento exponencial apresentou melhores resultados em instâncias de menor dimensão, enquanto o resfriamento linear se mostrou mais eficaz em instâncias de maior complexidade.

Além disso, verificou-se que o aumento do número de iterações contribui consistentemente para a obtenção de soluções mais próximas do ótimo, reforçando a importância de uma parametrização adequada conforme a instância do problema.

Como trabalhos futuros, propõe-se a realização de experimentos adicionais utilizando outras instâncias clássicas do problema do Caixeiro Viajante, de diferentes tamanhos e características, a fim de validar a generalização dos resultados obtidos. Ademais, sugere-se a investigação de estratégias híbridas, combinando **Simulated Annealing** com outros métodos heurísticos ou metaheurísticos, como algoritmos genéticos ou busca tabu, visando potencializar a eficiência e a robustez da abordagem.

Outra linha de pesquisa promissora consiste na adaptação dinâmica da taxa de resfriamento durante a execução do algoritmo, com base em métricas de desempenho em tempo de execução, de forma a automatizar a escolha da estratégia mais adequada conforme o comportamento da busca.

Dessa forma, espera-se que os avanços futuros ampliem a aplicabilidade e a eficácia do **Simulated Annealing** na resolução de problemas de otimização combinatória, em especial o problema do Caixeiro Viajante.