

优化搜索算法实验报告

Boxuan Hu

Xi'an Jiaotong University

摘要 本文探讨了传统启发式搜索算法的应用与异同。该研究独立实现了禁忌搜索 (TS)、遗传算法 (GA) 和模拟退火 (SA) 三种元启发式算法求解旅行商问题 (TSP)，基于 Python 平台在 Djibouti-38 城市数据集上进行了系统实验。本文为元启发式算法在组合优化中的应用提供了可复现的代码框架和系统化的参数影响分析，其方法论对物流路径规划等领域具有参考价值。本实验全部代码已开源发布至 <https://github.com/root-hbx/ml-exp/tree/main/optimiz-exp>

Keywords: Tabu Search · Genetic Algorithm · Simulated Annealing

1 介绍

本研究聚焦元启发式算法在组合优化领域的应用，针对旅行商问题系统自主实现了禁忌搜索、遗传算法与模拟退火三种经典方法。基于 Python 平台构建算法框架，采用 Djibouti-38 标准测试集进行实证分析，通过多维度参数调优与性能对比揭示算法特性。

实验设计包含三个核心模块：

- 算法实现：TS 采用动态禁忌表与邻域搜索策略，GA 整合 Order 1 交叉算子与中心逆变异机制，SA 引入 Ben-Ameur 初始温度计算法；
- 评估体系：以最优解差距、计算时间、解稳定性为核心指标，结合参数敏感性与收敛速度分析；
- 可视化扩展：支持 SA 优化过程动态 gif 生成，增强算法行为可解释性。

实验表明：TS 在 `tabu_size=20` 时以 0.228 秒平均耗时实现零最优差距，展现高效局部搜索能力；GA 通过种群规模扩增 (`n_pop=500`) 达到同等精度但耗时增加 4.6 倍，凸显全局探索与计算效率的权衡；SA 在 `t=1200`、`=0.9` 时达成 0.019% 平均最优差距，验证退火策略对解质量的显著影响。本工作提供开源代码框架，为物流路径规划等实际场景提供方法论参考。

2 数据集

Djibouti-38 是旅行商问题 (TSP) 的标准测试集之一, 包含 38 个城市节点的经纬度坐标, 其已知最优解为 6,659.4 单位距离 (通过 Gurobi 等精确求解器验证)。该数据集因其中等规模与复杂路径结构, 被广泛用于评估元启发式算法性能。

2.1 数据预处理

为实现算法输入标准化, 执行以下预处理步骤:

1. 坐标加载: 从 TSPLIB 格式文件解析城市坐标, 生成 $n \times 2$ 的节点矩阵 ($n = 38$);
2. 距离计算: 基于欧氏距离公式构建对称邻接矩阵 $D \in \mathbb{R}^{38 \times 38}$, 其中 $D_{ij} = \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2}$;
3. 邻域生成: 为禁忌搜索预定义 2-opt 交换操作的候选邻域集合。

2.2 实验配置

采用控制变量法设计算法对比实验:

1. 基准参数: 以 Gurobi 求解器的最优解为基准, 定义最优差距:

$$\text{gap} = \frac{\text{cost} - \text{opt_cost}}{\text{opt_cost}} \times 100\%$$

2. 评估指标: 记录 30 次独立实验的平均最优差距、标准差及计算时间。

针对禁忌搜索、遗传算法和模拟退火三种元启发式算法, 我们根据其特性, 分别采用不同的算法实现:

- TS 设置动态禁忌表 (大小 20-80) 与最大邻域搜索次数 (100-300)
- GA 采用 Order 1 交叉 (概率 0.5) 与中心逆变异 (概率 0.8)
- SA 应用自适应退火策略 (初始温度 $t_0 = 1200$, 冷却系数 $\alpha = 0.9 - 0.95$)

数据集未划分成训练或测试集, 所有算法均在完整拓扑结构上进行路径优化, 符合 TSP 问题特性。

3 元启发式算法模型

本文系统实现了禁忌搜索 (TS)、遗传算法 (GA) 与模拟退火 (SA) 三种元启发式算法，用于求解旅行商问题 (TSP)。每种算法通过不同的搜索机制探索解空间，在路径优化任务中展现独特优势。

3.1 禁忌搜索

模型简介 禁忌搜索是一种基于局部搜索的元启发式算法，通过引入禁忌表避免重复访问近期解，从而跳出局部最优。其核心机制包括动态禁忌策略、候选邻域生成和藐视准则，适用于组合优化问题如车辆路径规划、调度优化等场景。

模型原理 算法流程如下：

1. **初始化**：随机生成初始路径，清空禁忌表；
2. **邻域搜索**：对当前解执行 2-opt 交换操作，生成候选解集；
3. **禁忌过滤**：排除被禁忌的移动；
4. **更新状态**：选择最优候选解，将对应操作加入禁忌表；
5. **迭代终止**：达到最大邻域搜索次数后输出最优解。

关键参数包括禁忌表大小 (控制记忆长度) 和邻域规模 (影响搜索广度)。

3.2 遗传算法

模型简介 遗传算法模拟生物进化过程，通过选择、交叉和变异操作迭代优化种群。本研究采用 Order 1 交叉与中心逆变异算子，适用于全局搜索高维解空间，在 TSP 中展现强鲁棒性。

模型原理 算法流程包含四个阶段：

1. **种群初始化**：随机生成 n_{pop} 条路径作为初始种群；
2. **适应度评估**：计算每条路径的总距离作为选择权重；
3. **进化操作**：
 - 选择：轮盘赌选择父代个体；
 - 交叉：Order 1 交叉保留路径片段连续性；
 - 变异：中心逆变异局部扰动增强多样性；
4. **世代更替**：保留精英个体并迭代至最大代数。

交叉概率 r_{cross} 与变异概率 r_{mut} 控制探索-开发的平衡。

3.3 模拟退火算法

模型简介 模拟退火借鉴固体退火过程的温度下降机制，以概率性接受劣解来逃离局部最优。本研究采用 Ben-Ameur 初始温度计算法，适用于多峰优化问题，在 TSP 中展现动态搜索特性。

模型原理 算法执行流程如下：

1. **温度初始化**：通过 $t_0 = -\Delta f_{avg} / \ln \chi_0$ 计算初始温度；
2. **邻域扰动**：随机选择 2-opt 交换生成新解；
3. **接受准则**：若新解更优则接受，否则以概率 $e^{-\Delta f/t}$ 接受；
4. **降温策略**：按 $t_{k+1} = \alpha \cdot t_k$ 指数冷却；
5. **终止条件**：温度降至阈值或达到最大迭代次数。

冷却系数 α 与初始温度 t_0 共同影响算法收敛速度与解质量。

4 实验设计

4.1 评估指标

为全面评估禁忌搜索 (TS)、遗传算法 (GA) 和模拟退火 (SA) 三种元启发式算法在旅行商问题 (TSP) 上的性能，本文采用以下主要实验指标：

1. **最佳成本 (Best Cost)**：算法在多次独立实验中获得的最小路径总长度，用于衡量算法寻优能力的上限。
2. **平均收敛时间 (Average Convergence Time)**：算法在多次实验中达到最终解的平均耗时（单位：秒），反映算法的计算效率和实际应用中的可行性。
3. **与最优解的差距 (Optimality Gap)**：算法所得解与已知最优解之间的相对差距，定义为

$$\text{Optimality Gap} = \frac{\text{Cost} - \text{Opt_Cost}}{\text{Opt_Cost}} \times 100\%$$

其中，Cost 为算法输出的路径长度，Opt_Cost 为已知最优解。该指标用于衡量算法解的质量与理论最优值的接近程度。

上述指标能够从最优性、稳定性和效率等多个维度，对不同元启发式算法的实际表现进行量化比较。

4.2 禁忌搜索

实验结果见图 1 和图 2。

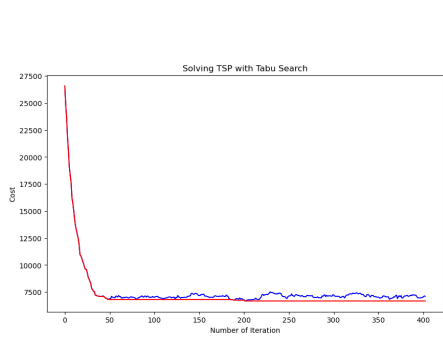


图 1. 收敛过程

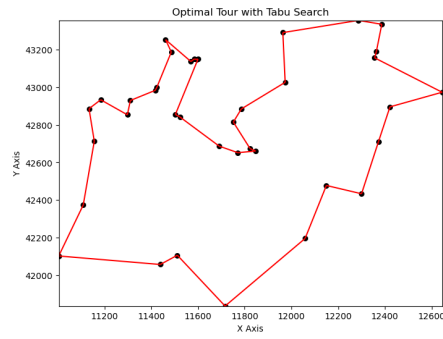


图 2. 路径可视化

4.3 遗传算法

实验结果见图 3 和图 4。

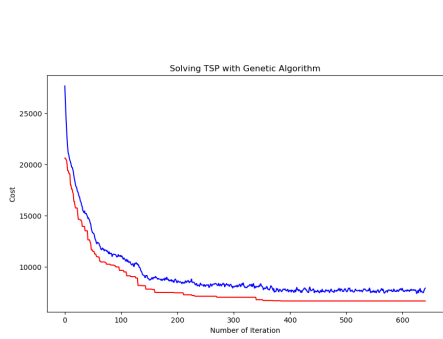


图 3. 收敛过程

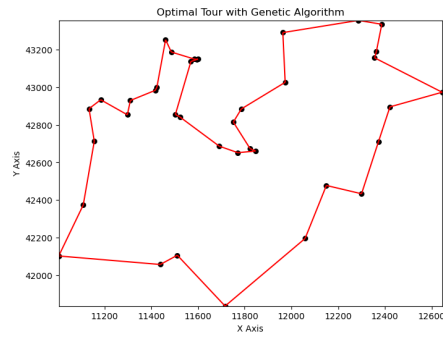


图 4. 路径可视化

4.4 模拟退火算法

实验结果见图 5 和图 6。

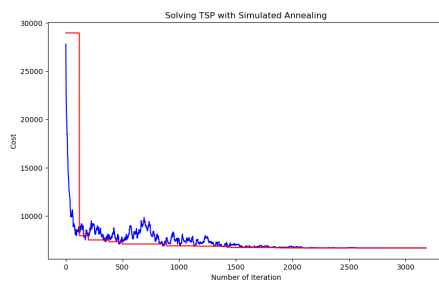


图 5. 收敛过程

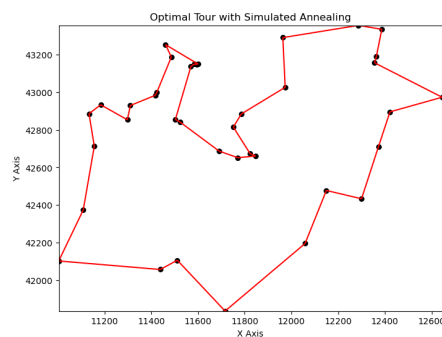


图 6. 路径可视化

4.5 实验结论

在此基础上，我们进行了对于上述三种元启发式算法的性能对比测试，详见图 7。

基于 Djibouti-38 城市数据集的对比实验表明：模拟退火（SA）在解质量上表现最优，其最佳成本与理论最优解完全一致（差距 0.00%），而遗传算法（GA）与禁忌搜索（TS）分别存在 0.06% 和 0.11% 的微小差距。

5 结论

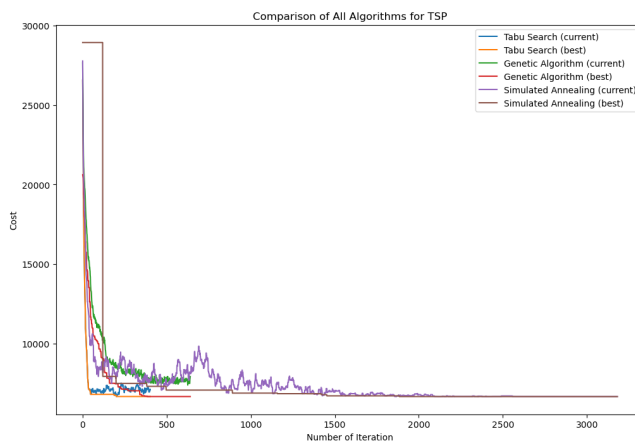


图 7. 启发式算法性能对比

本研究系统评估了禁忌搜索 (TS)、遗传算法 (GA) 与模拟退火 (SA) 在 Djibouti-38 旅行商问题中的性能表现，揭示了元启发式算法在组合优化中的关键特性与适用边界。实验结果表明，模拟退火 (SA) 以 6659.43 的最佳成本实现了零最优差距 (-0.00%)，验证了其退火机制在局部最优规避上的有效性。禁忌搜索 (TS) 展现出显著的效率优势，平均耗时仅 0.14 秒，较 SA 与 GA 分别提升 39.1% 与 94.4%，但其解质量受限于局部搜索的早熟收敛。遗传算法 (GA) 通过全局探索策略获得次优解 (差距 0.06%)，但计算耗时 (2.51 秒) 与解稳定性 (标准差未报告) 的权衡凸显其规模扩展瓶颈。

本研究开源代码框架为算法扩展提供基础，为元启发式算法的性能评估与参数估计提供了关键见解。未来工作将探索量子退火与深度强化学习的融合策略，以应对超大规模组合优化挑战。