ANÁLISE ESTATÍSTICA DE META-HEURÍSTICAS PARA O PROBLEMA DO CAIXEIRO VIAJANTE

1º Daniel Silva da Fonseca
Pós-Graduação em Modelagem Matemática e Computacional
Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais
Belo Horizonte, Brasil
daniel0547@gmail.com

2º Thomás Henrique Lopes Silva
Pós-Graduação em Modelagem Matemática e Computacional
Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais
Belo Horizonte, Brasil
thomashlsilva@gmail.com

***Resumo*—Este trabalho propõe uma análise do comportamento das meta-heurísticas Recozimento Simulado e GRASP no problema do caixeiro viajante. Para tal análise são avaliados três cenários, com diferentes tamanhos e especificidades. Através do teste não paramétrico de Wilcoxon verificamos que as heurísticas são competitivas entre si, o recozimento simulado apresenta melhores resultados nos cenários menores enquanto o GRASP apresenta resultados melhores no maior cenário.**

Palavras-chave: Problema do caixeiro viajante, Recozimento simulado, GRASP

I. INTRODUÇÃO

Dado um conjunto de cidades e distância entre cada par dessas cidades, o problema do caixeiro viajante (*traveling salesman problem* ou TSP) consiste em encontrar o menor caminho para passar uma única vez por todas elas e retornar a cidade de origem. É um dos mais famosos, importantes e difíceis problemas de otimização combinatória. Possui aplicações para a ciência da computação, engenharia, pesquisa operacional, matemática discreta, teoria dos grafos e diversas outras áreas [6].

Dizemos que o TSP é simétrico se, $c_{ij} = c_{ji} \forall i, j$, onde i e j representam a linha e a coluna de uma matriz de distâncias, respectivamente, caso contrário, assimétrica. Neste trabalho será considerado apenas a versão simétrica do problema.

O número de caminhos possíveis para o caixeiro viajante é dado por (n-1)! já que a primeira e última cidades são fixas e a cada visita a uma cidade o viajante tem uma opção a menos para a próxima. Assim, para um conjunto com apenas 10 cidades existem 362.880 caminhos para o TSP e em um conjunto com 25 cidades já são $6.2 * 10^{23}$ caminhos possíveis, o que em um computador pessoal comum levaria algo em torno de 470 milhões de anos para serem avaliadas. Dada a característica fatorial do número de soluções possíveis a serem analisadas e o rápido crescimento dessa função, classificamos este problema como NP-difícil. Tal classe de problema também é denominada intratável, dado que para entradas maiores o tempo computacional para se obter a resposta deixa de pertencer a escala humana.

Devido a dificuldade de utilização de métodos exatos para instâncias maiores este trabalho se propõe a estudar a utilização heurísticas computacionais para o problema do caixeiro viajante.

Em otimização, uma heurística é uma técnica projetada para encontrar rapidamente soluções aproximadas para um problema quando os métodos clássicos são muito lentos ou não conseguem encontrar uma solução exata. Isso é possível trocando exatidão ou precisão por velocidade, neste caso uma heurística pode ser um algoritmo que encontra boas soluções a maioria das vezes, mas não tem garantias de que sempre encontrará.

Apresentada a complexidade de percorrer todo o espaço de busca para instâncias maiores, o objetivo deste trabalho é avaliar a utilização das meta-heurísticas Recozimento Simulado e GRASP para resolver o problema do caixeiro viajante e comparar o comportamento dessas.

II. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

A. Meta-heurísticas

Sob tradução livre, de acordo com [1]: "meta-heurísticas, em sua definição original, são métodos de solução que orquestram uma interação entre procedimentos de melhoria local e estratégias de nível superior para criar um processo capaz de escapar de ótimos locais e realizar uma busca robusta de um espaço de solução." Portanto, esses algoritmos são adotados como as ferramentas de solução mais apropriadas para o tratamento de problemas NP-difíceis, nesta categoria se enquadra o problema do caixeiro viajante.

Entre os grupos de meta-heurísticas existem os algoritmos de busca local, que movem-se de solução para solução no espaço de busca aplicando mudanças locais, até que uma solução considerada ótima seja encontrada ou um limite de tempo seja decorrido. Os dois algoritmos escolhidos pelos autores para solucionar o problema proposto, SA e GRASP, se enquadram neste grupo.

B. Recozimento Simulado

Proposto por [2], a principal característica do recozimento simulado é que ele fornece um mecanismo para escapar de ótimos locais, permitindo movimentos de subida (ou seja, movimentos que pioram o valor da função objetivo) na esperança de encontrar um ótimo global.

C. Procedimentos de Busca Adaptativa Aleatória Gananciosa

Proposto por [3], consiste basicamente em duas fases: construção e busca local. A primeira fase constrói uma solução viável, cuja vizinhança é investigada até que um mínimo local seja encontrado durante a fase de busca local. A melhor solução geral é mantida como resultado.

III. Experimento

Para comparar as meta-heurísticas foram analisados os comportamentos destas em três cenários diferentes do problema do caixeiro viajante, denominados “si535”, “pa561” e “si1032”. Tais cenários foram escolhidos dentre os disponíveis em [7] por serem os maiores disponíveis no formato de matriz de distâncias.

Os valores ótimos de custo para cada cenário são conhecidos e apresentados na tabela abaixo:

Cenário	# Cidades	Valor ótimo
pa561	561	2763
si535	535	48450
si1032	1032	92650

Os dois menores cenários possuem um número próximo de cidades porém matrizes de distâncias com características diferentes, o que permite verificar se as heurísticas são capazes de resolver cenários com diferentes características.

Para a comparação entre as duas meta-heurísticas foram limitadas para ambas o número de avaliações da função objetivo em 100.000 para os dois primeiros cenários e 1.000.0000 para o terceiro cenário.

Para iniciar a comparação entre os resultados dos dois algoritmos, definiu-se um tamanho de amostra $n = 30$ para cada uma de suas três entradas distintas. Esta é uma regra prática considerada muito conservadora baseada no Teorema do Limite Central (TLC). Uma vez que não podemos afirmar nada sobre a distribuição da população original, a distribuição das médias amostrais pode ser aproximada satisfatoriamente por uma distribuição normal [4].

A seguir está disposta a tabela I, contendo as duas amostras probabilísticas coletadas das duas meta-heurísticas para as três entradas do problema:

Tabela I
Amostras coletadas nos 3 cenários.

Cenário 1		Cenário 2		Cenário 3	
SA	GRASP	SA	GRASP	SA	GRASP
3273	3247	49382	49935	98001	93808
3280	3234	49282	49698	100964	93613
3288	3294	49312	49883	97801	93876
3264	3244	50054	49785	97869	93891
3301	3244	49358	49924	97775	93933
3246	3277	49669	49698	98480	93790
3203	3259	49592	49639	97409	93850
3199	3265	49867	49765	100579	93607
3168	3281	49565	49905	99311	93859
3236	3253	49451	49875	97434	93732
3174	3302	49207	49845	97560	93720
3352	3267	49441	49752	99919	93764
3342	3240	49776	49786	97384	93744
3197	3319	49510	49758	97682	93916
3363	3240	49470	49925	98270	93780
3264	3294	49426	49847	97406	93615
3344	3283	49227	49914	97545	93788
3279	3305	49444	49969	99647	93673
3242	3261	49316	49904	98134	93725
3204	3302	49486	49734	98326	93702
3159	3260	49165	49752	98143	93749
3323	3292	49487	49840	97772	93846
3256	3239	50316	49766	97802	93753
3251	3261	49580	49718	97428	93924
3180	3243	49644	49943	98188	93656
3145	3239	49786	49914	98415	93749
3292	3327	49386	49698	97256	93905
3216	3276	49236	49773	98684	93676
3219	3269	49236	49808	97605	93724
3248	3240	49841	49955	96468	93673

A tabela II apresenta os estimadores média, variância e desvio padrão amostrais calculados para cada um dos três cenários:

Tabela II
Estimadores.

	Cenário 1		Cenário 2		Cenário 3	
	SA	GRASP	SA	GRASP	SA	GRASP
$\overline{x}$	3250,3	3268,6	49517,1	49823,6	98175,2	93768,0
s^2	3556,8	693,4	70104,3	8617,7	1008229,4	9256,4
s	59,6	26,3	264,8	92,8	1004,1	96,2

A seguir foram geradas seis densidades de probabilidade para os três cenários, dispostas nas figuras 1, 2 e 3, respectivamente.

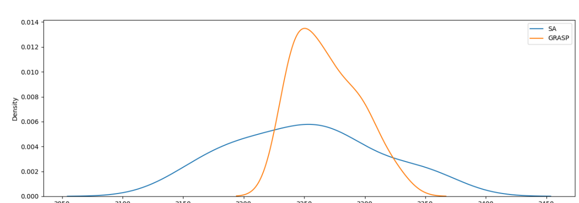

Figura 1. Densidade de probabilidade - Cenário 1.

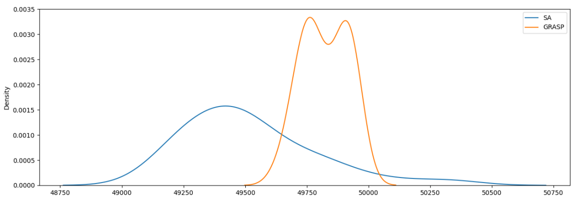

Figura 2. Densidade de probabilidade - Cenário 2.

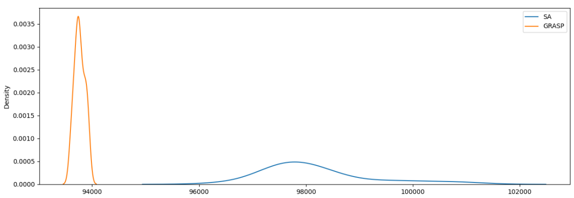

Figura 3. Densidade de probabilidade - Cenário 3.

Analisando estes três gráficos, visualmente é possível perceber uma distribuição normal dos dados, principalmente para o cenário 1 da meta-heurística SA e os cenários 2 e 3 da meta-heurística GRASP. Já para os cenários 2 e 3 da SA tem-se caudas muito esticadas até as extremidades, e o cenário 1 da GRASP apresenta uma aproximação à distribuição bimodal. Além disso, tem-se um indicativo que a variância dos dados é menor para o GRASP em comparação ao SA, como pode ser confirmado via tabela II.

A fim de concluir se o conjunto de dados amostrais segue uma distribuição normal ou não, a tabela III dispõe os p-valores do teste de normalidade Shapiro–Wilk feito em linguagem R pela função *shapiro.test*. Vale ressaltar que o teste de hipóteses para este método é o seguinte:

H_0: A amostra foi gerada de uma distribuição normalmente distribuída.

H_a: A amostra não foi gerada de uma distribuição normalmente distribuída.

Tabela III
TESTE SHAPIRO-WILK.

	Cenário 1		Cenário 2		Cenário 3	
	SA	GRASP	SA	GRASP	SA	GRASP
p-v	0,6425	0,04524	0,01893	0,1221	0,001225	0,2817
H_0	Falha	Rejeita	Rejeita	Falha	Rejeita	Falha

Conclui-se com evidência estatística o que foi proposto na análise dos gráficos de distribuição de probabilidade: os cenários GRASP-1, SA-2 e SA-3 não são pertencentes à populações que seguem uma distribuição normal. Portanto, deve-se adotar um teste de hipóteses não paramétrico para todos os cenários, a fim de verificar estatisticamente se as duas amostras de cada cenário se originam da mesma população.

De acordo com [5], quando estamos interessados em testar a igualdade das médias de duas distribuições contínuas que são não normais e as amostras são independentes, o teste da soma de postos de Wilcoxon ou teste de duas amostras de Wilcoxon é uma alternativa apropriada ao teste t em duas amostras de distribuições contínuas que são normais.

Da mesma literatura retira-se o teste de Kruskal-Wallis, também chamado de teste Kruskal-Wallis H, é uma generalização do teste da soma de postos para o caso de 3 ou mais amostras. O teste é um procedimento não-paramétrico para testar a igualdade das médias na análise de variância em um fator quando o pesquisador deseja evitar a suposição de que as amostras foram selecionadas de populações normais.

Definidos estes dois testes, nota-se que o teste da soma de postos de Wilcoxon se adequa melhor ao caso tratado neste trabalho. Então, o teste de hipóteses a ser tratado é o seguinte:

H_0: $\tilde{\mu}_{SA} = \tilde{\mu}_{GRASP}$

H_a: $\tilde{\mu}_{SA} \neq \tilde{\mu}_{GRASP}$

Sendo $\tilde{\mu}_{SA}$ a média populacional da meta-heurística SA e $\tilde{\mu}_{GRASP}$ a média populacional da meta-heurística GRASP, ambas para o mesmo cenário. Este teste de hipóteses foi repetido três vezes, uma para cada cenário, e discussões e conclusões a respeito dos resultados obtidos via ferramentas computacionais são feitas nas duas seções seguintes.

IV. Resultados e Discussões

Tabela IV
TESTE DA SOMA DE POSTOS DE WILCOXON.

	Cenário 1	Cenário 2	Cenário 3
p-valor	0,14	$5,30 \times 10^{-5}$	$1,73 \times 10^{-6}$

O resultado do teste da soma de postos de Wilcoxon no primeiro cenário indica que não há evidências para rejeitar a hipótese nula ($p - valor > 0.05$), logo não podemos afirmar que há diferença estatística entre as amostras.

Já no segundo cenário podemos observar que há evidências para rejeitar a hipótese nula ($p - valor < 0.05$) e podemos afirmar que há diferença estatística entre as amostras. Analisando a figura 2 verificamos que a heurística do recozimento simulado se comporta melhor que o GRASP, obtendo melhores resultados para este cenário.

Por fim, para o terceiro cenário é possível observar na figura 3 que o teste da soma de postos de Wilcoxon não era necessário para comparação entre as heurísticas, uma vez que as distribuições não se cruzam. Para confirmar tal afirmação ainda é possível observar que há evidências para rejeitar a hipótese nula ($p - valor < 0.05$) e podemos afirmar que há diferença estatística entre as amostras e podemos concluir que o GRASP se comporta melhor que o recozimento simulado, obtendo melhores resultados para este cenário.

V. Conclusão

Para este trabalho foram desenvolvidas duas meta-heurísticas para o problema do caixeiro viajante e os resultados obtidos em três cenários diferentes do problema foram analisados e comparados entre si.

A partir dos resultados obtidos podemos observar que as meta-heurísticas são competitivas já que apresentam bons resultados, suficientemente próximos do ótimo conhecido em todos os cenários em tempo menor que o necessário para avaliar todas as possíveis soluções do problema.

Também comparamos as meta-heurísticas entre si e verificamos que são competitivas entre si. Ambas obtiveram resultados semelhantes no primeiro cenário, não sendo possível verificar diferenças estatísticas entre os valores obtidos. O recozimento simulado apresentou melhores resultados no segundo cenário (instância com 535 cidades) e o GRASP apresentou melhores resultados no terceiro cenário (a maior instância de teste disponível com 1032 cidades).

Como trabalho futuro pode ser interessante tentar avaliar quais características de cada meta-heurística faz com que ela se comporte melhor em cada cenário, e também avaliar o comportamento dessas em outros cenários.

REFERÊNCIAS

[1] Gendreau, Michel, and Jean-Yves Potvin, eds. Handbook of metaheuristics. Vol. 2. New York: Springer, 2010.

[2] Van Laarhoven, Peter JM, and Emile HL Aarts. "Simulated annealing."Simulated annealing: Theory and applications. Springer, Dordrecht, 1987. 7-15.

[3] Feo, Thomas A., and Mauricio GC Resende. "Greedy randomized adaptive search procedures."Journal of global optimization 6.2 (1995): 109-133.

[4] Montgomery, Douglas C. Design and analysis of experiments. John wiley sons, 2017.

[5] Walpole, Ronald E., et al. Probability and statistics for engineers and scientists. Vol. 5. New York: Macmillan, 1993.

[6] LENSTRA, Jan Karel; SHMOYS, David. The Traveling Salesman Problem: A Computational Study. 2009.

[7] REINELT, Gerhard. Tsplib95. Interdisziplinäres Zentrum für Wissenschaftliches Rechnen (IWR), Heidelberg, v. 338, p. 1-16, 1995.