

NOVOS LIMITANTES PARA O PROBLEMA DE PROGRAMAÇÃO QUADRÁTICA BINÁRIA IRRESTRITA

Geraldo Regis Mauri

Centro de Ciências Agrárias, Departamento de Engenharia Rural
Universidade Federal do Espírito Santo - UFES
Alegre – ES
mauri@cca.ufes.br

Luiz Antonio Nogueira Lorena

Laboratório Associado de Computação e Matemática Aplicada
Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais - INPE
São José dos Campos – SP
lorena@lac.inpe.br

RESUMO

O Problema de Programação Quadrática Binária Irrestrita - PQ é um dos problemas clássicos na área de otimização não-linear cujo objetivo é otimizar uma função quadrática através da escolha de valores binários apropriados para as variáveis de decisão. Este trabalho propõe novas abordagens para obtenção de limitantes para o PQ . Os métodos apresentados tratam uma versão linear inteira mista (PQL) do PQ . São apresentadas duas abordagens baseadas na relaxação lagrangeana com divisão em clusters (*LagClus*), sete abordagens baseadas em relaxações lagrangeanas tradicionais, uma abordagem baseada em restrições de corte e uma baseada na relaxação linear das variáveis de decisão do PQL . Vários experimentos foram realizados com um conjunto de dados formado por instâncias com diferentes características.

PALAVRAS CHAVE. Programação Quadrática, Relaxação Lagrangeana, Limitantes.

PM - Programação Matemática, OC - Otimização Combinatória

ABSTRACT

The Unconstrained Binary Quadratic Programming Problem - PQ is a classical non-linear problem. This is the problem of optimizing a quadratic objective function by suitable choice of binary decisions variables. This paper proposes new approaches to find bounds for PQ . The presented methods treat a mixed binary linear version (PQL) of PQ . Two approaches based in the lagrangean relaxation with clusters (*LagClus*) are presented. Seven approaches based on traditional lagrangean relaxations, one approach based on cut constraints, and one based on the linear relaxation of PQL are also presented. Several experiments were performed over a data set formed by instances with different characteristics.

KEYWORDS. Quadratic Programming, Lagrangean Relaxation, Bounds.

PM - Mathematical Programming, OC - Combinatorial Optimization

1. Introdução

O Problema de Programação Quadrática Binária Irrestrita é um dos problemas clássicos na área de otimização não-linear. Esse problema também é conhecido como problema de programação bivalente quadrática irrestrita (Gulati *et al.*, 1984) e problema de programação quadrática zero-um irrestrita (Chardaire e Sutter, 1995). Por uma questão de notação, esse problema será tratado adiante como *PQ*.

O *PQ* consiste em maximizar (ou minimizar) uma função objetivo quadrática através da escolha de valores apropriados para as variáveis de decisão binárias (Beasley, 1998). O *PQ* é um problema *NP-Hard* (Billionnet e Elloumi, 2007) e apresenta uma grande quantidade de aplicações em diversas áreas, como por exemplo: biologia molecular (Phillips e Rosen, 1994); planejamento de investimentos e análise financeira (Laughunn, 1970; McBride e Yormark, 1980); e alguns problemas do tipo CAD (Krarup e Pruzan, 1978).

Além disso, o *PQ* ainda aborda inúmeros problemas modelados através de grafos, como clique máximo, máximo conjunto independente, e outros (Pardalos e Phillips, 1990; Pardalos e Rodgers, 1992; Pardalos e Xue, 1994).

Vários métodos exatos e heurísticos têm sido propostos para resolver o *PQ*, entretanto, os métodos exatos existentes (Billionnet e Sutter, 1994; Pardalos e Rodgers, 1990a; Pardalos e Rodgers, 1990b) são restritos a problemas com até 200 variáveis. Já os métodos heurísticos (Beasley, 1998; Glover *et al.*, 1998; Pardalos e Jha, 1992) têm apresentado bons resultados para instâncias maiores (com até 2500 variáveis).

Uma outra abordagem interessante para resolver o *PQ* é a relaxação do problema para obtenção de limitantes (Adams e Dearing, 1994; Chardaire e Sutter, 1995). Essa abordagem possui a vantagem de definir limitantes para a solução ótima, e pode apresentar uma informação dual de boa qualidade, o que permite avaliar a proximidade da melhor solução encontrada em relação à solução ótima do problema.

Uma estratégia usada para relaxar o problema original é a sua divisão em problemas menores, com a mesma característica. Essa divisão pode ser realizada através do particionamento do grafo que representa o problema em *clusters* formados por vértices e arestas. Essa estratégia não garante a obtenção de uma solução viável para o problema completo, pois algumas arestas são ignoradas. Entretanto, uma maneira de considerar essas arestas é relaxá-las no sentido lagrangeano e encontrar um limitante de boa qualidade para o problema original. Essa é a idéia da relaxação lagrangeana baseada em *clusters* - *LagClus* (Ribeiro, 2005; Ribeiro e Lorena, 2007; Ribeiro e Lorena, 2008).

Outra prática comum para resolver o *PQ* é a linearização do seu modelo original (Adams *et al.*, 2004; Glover, e Woolsey, 1974; Hansen e Meyer, 2008), ou seja, a obtenção de um modelo linear equivalente cujas soluções são correspondentes ao modelo quadrático original. Dessa forma, o *PQ* é transformado em um problema linear inteiro misto, o que permite a relaxação linear de suas variáveis de decisão e conseqüentemente a obtenção de um limitante para a solução do problema original. Esse limitante é conhecido como *roof dual* (Adams e Dearing, 1994; Boros *et al.*, 1990; Boros *et al.*, 1992; Hammer *et al.*, 1984).

Este trabalho propõe novas abordagens para obtenção de limitantes para o *PQ*. São apresentadas duas abordagens baseadas na divisão do problema em *clusters*, sete abordagens baseadas em relaxações lagrangeanas tradicionais, uma abordagem baseada na relaxação linear das variáveis de decisão, e uma baseada na inserção de uma restrição de corte de *Chvatal-Gomory* no modelo linear do problema.

O restante do artigo está organizado como segue. A Seção 2 apresenta uma breve revisão bibliográfica sobre o *PQ* e os métodos utilizados neste artigo. Na Seção 3 são apresentados os modelos matemáticos utilizados. A Seção 4 descreve os limitantes propostos, e a Seção 5 apresenta os métodos utilizados para obtê-los. Os resultados computacionais obtidos são apresentados na Seção 6, e as conclusões são resumidas na Seção 7.

2. Revisão bibliográfica

Adams e Dearing (1994) apresentam uma discussão sobre a obtenção de limitantes para o PQ . Eles apresentam um modelo linear para o problema, que é obtido através da técnica de linearização de Glover e Woolsey (1974).

Chardaire e Sutter (1995) propõem um algoritmo para obtenção de limitantes para o PQ . Esse algoritmo é baseado na decomposição lagrangeana da função objetivo quadrática do problema original em um somatório de funções pseudo-lineares. O método proposto é uma relaxação dual do problema quadrático original. Os resultados obtidos mostram que quanto maior o tamanho dos *clusters* melhor é o limitante, entretanto, os *gaps* aumentam significativamente com o tamanho dos problemas. Eles mostram que entre as técnicas de decomposição, a lagrangeana é a que apresenta os melhores resultados. Além disso, eles mostram que o algoritmo proposto obtém, no pior caso, um limitante igual ao *roof dual*. Os resultados são apresentados para problemas com até 100 variáveis.

Várias estratégias de linearização do PQ são apresentadas e discutidas em Adams *et al.* (2004) e Hansen e Meyer (2008).

Billionnet e Calmels (1996) apresentam uma abordagem trivial para obtenção de limitantes para o Problema Quadrático da Mochila - PQM . Essa abordagem é baseada na linearização do problema e na resolução desse modelo linear através da relaxação linear das variáveis de decisão. Eles mostram que esses limitantes são de qualidade moderada. Além disso, eles utilizam a inserção de restrições de corte de *Chvatal-Gomory*, que apresentam melhores limitantes.

Billionnet *et al.* (1999) propõem um limitante para o PQM baseado na divisão do conjunto de variáveis do problema original em diversos subconjuntos disjuntos. Essa divisão é feita aleatoriamente, gerando subconjuntos com no máximo 5 variáveis. A idéia é utilizar a decomposição lagrangeana para dividir o problema em subproblemas independentes. A escolha dos multiplicadores lagrangeanos é feita através do método de subgradiente. Assim como apresentado por Chardaire e Sutter (1995), os autores mostram que quanto maior o tamanho dos subproblemas melhor é o limitante, entretanto, o tempo de processamento aumenta exponencialmente.

A *LagClus*, apesar de recente, já apresenta bons resultados para vários problemas, como por exemplo: carregamento de paletes (Ribeiro e Lorena, 2007), rotulação cartográfica (Ribeiro e Lorena, 2008), alocação de facilidades (Corrêa *et al.*, 2006), entre outros.

Vários métodos baseados em busca em árvores para resolver o PQ são encontrados na literatura. Gulati *et al.* (1984) apresentam um método de busca em árvore, baseado na enumeração de ótimos locais, que resolve problemas com até 40 variáveis. Pardalos e Rodgers (1990a) apresentam um método de busca em árvore que utiliza limitantes baseados na fixação de variáveis em cada nó da árvore. Os resultados tratam problemas com até 200 variáveis. Pardalos e Rodgers (1990b) apresentam uma versão paralelizada de um *branch-and-bound* capaz de resolver problemas com até 100 variáveis. Billionnet e Sutter (1994) apresentam um método de busca em árvore capaz de resolver problemas com até 100 variáveis. Palubeckis (1995) propõe uma busca em árvore heurística que apresenta resultados para problemas com até 247 variáveis.

Glover *et al.* (1998) propõe uma heurística baseada na Busca Tabu que resolve problemas com até 500 variáveis. Beasley (1998) apresenta uma comparação entre duas metaheurísticas para resolver o PQ . Ele utiliza a Busca Tabu e o *Simulated Annealing* para resolver problemas com até 2500 variáveis (com baixa densidade). A Busca Tabu apresenta os melhores resultados para a maioria dos problemas utilizados. Já o *Simulated Annealing* supera a Busca Tabu para os problemas com maior número de variáveis.

Pardalos e Jha (1992) discutem a complexidade computacional de vários problemas relacionados com o PQ e apresentam uma heurística de busca local para resolvê-lo. Os resultados são apresentados para problemas com até 100 variáveis.

3. Modelos matemáticos

Dada uma matriz de números reais $\mathbf{Q} = [q_{ij}]_{m \times m}$, o PQ pode ser formulado pela expressão (1).

$$PQ: \quad v(PQ) = \max_{x \text{ binário}} \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m q_{ij} x_i x_j \quad (1)$$

Como apresentado em Billionnet e Elloumi (2007), pode-se considerar que a matriz \mathbf{Q} é simétrica sem perder a generalidade do problema. Sendo assim, de forma análoga a apresentada por Adams e Dearing (1994), o problema pode ser reescrito da seguinte forma:

$$PQ: \quad v(PQ) = \max_{x \text{ binário}} \left(\sum_{i=1}^m q_{ii} x_i + \sum_{(i,j) \in P \cup N} 2q_{ij} x_i x_j \right) \quad (2)$$

onde $N = \{(i,j) : i < j, q_{ij} < 0\}$ e $P = \{(i,j) : i < j, q_{ij} > 0\}$.

Fica claro nos modelos (1) e (2) que o número de elementos da matriz \mathbf{Q} utilizados em (2) será significativamente menor do que em (1), pois em (2) são considerados apenas os elementos não nulos situados na metade superior e na diagonal principal dessa matriz.

Aplicando a técnica de linearização de Glover e Woolsey (1974) em (2), os termos quadráticos $x_i x_j$ são substituídos pela variável contínua w_{ij} e por restrições que garantem que $w_{ij} = x_i x_j$. Logo, tem-se uma versão linear inteira mista de PQ (3-8). Esse modelo linear é apresentado em Adams e Dearing (1994) e será utilizado no restante deste trabalho. Por convenção, esse modelo será chamado PQL .

$$PQL: \quad v(PQL) = \mathbf{Max} \sum_{i=1}^m q_{ii} x_i + \sum_{(i,j) \in P \cup N} 2q_{ij} w_{ij} \quad (3)$$

Sujeito à

$$w_{ij} - x_i \leq 0 \quad (i, j) \in P \quad (4)$$

$$w_{ij} - x_j \leq 0 \quad (i, j) \in P \quad (5)$$

$$x_i + x_j - w_{ij} \leq 1 \quad (i, j) \in N \quad (6)$$

$$w_{ij} \geq 0 \quad (i, j) \in N \quad (7)$$

$$x_i \in \{0,1\} \quad i = 1, \dots, m \quad (8)$$

4. Limitantes para o PQ

Um limitante trivial para o PQ é o valor da solução da relaxação linear do PQL (substituir a restrição 8 por $0 \leq x_i \leq 1$). Como apresentado em Adams e Dearing (1994), esse limitante é conhecido como *roof dual* para o PQ . Por notação, esse modelo relaxado será tratado como \overline{PQL} .

Um outro limitante para o PQ pode ser obtido através da inserção de uma restrição de corte de *Chvatal-Gomory* em PQL . Essa restrição é descrita na expressão (9).

$$x_i + x_j + x_k - w_{ij} - w_{jk} - w_{ik} \leq 1 \quad (i, j), (j, k), (i, k) \in P \cup N \quad (9)$$

Essa restrição de corte é baseada em uma das restrições de corte apresentadas em Billionnet e Calmels (1996) para o Problema Quadrático da Mochila - PQM . Como mostrado por esses autores, os limitantes obtidos com a inserção de restrições de corte é melhor do que o

apresentado pela relaxação linear do PQM . Por convenção, o modelo PQL com a restrição de corte será tratado como $PQLC$.

A relaxação lagrangeana das restrições (4), (5) e (6) também pode ser utilizada para obtenção de outros limitantes para o PQ . Sendo assim, essas restrições podem ser combinadas de forma a gerar sete modelos diferentes para o problema:

- $Lag_{\alpha}PQL$: restrição (4) relaxada no sentido lagrangeano.
- $Lag_{\beta}PQL$: restrição (5) relaxada no sentido lagrangeano.
- $Lag_{\lambda}PQL$: restrição (6) relaxada no sentido lagrangeano.
- $Lag_{\alpha\beta}PQL$: restrições (4) e (5) relaxadas no sentido lagrangeano.
- $Lag_{\alpha\lambda}PQL$: restrições (4) e (6) relaxadas no sentido lagrangeano.
- $Lag_{\beta\lambda}PQL$: restrições (5) e (6) relaxadas no sentido lagrangeano.
- $Lag_{\alpha\beta\lambda}PQL$: restrições (4), (5) e (6) relaxadas no sentido lagrangeano.

Para cada um desses modelos, poderá ser obtido um limitante através da minimização do seu dual lagrangeano correspondente ($DLag_{\alpha}PQL$, $DLag_{\beta}PQL$, etc).

4.1. Relaxações lagrangeanas com divisão em clusters - *LagClus*

A partir da matriz Q descrita na seção anterior, pode-se criar um grafo $G=(V,A)$ com $V = \{1, \dots, m\}$ e uma matriz de adjacências $A = [a_{ij}]_{m \times m}$, $a_{ij} = 1$ se $q_{ij} \neq 0$ e $a_{ij} = 0$ se $q_{ij} = 0$. Particionando o grafo G em n ($n \leq m$) *clusters* independentes, tem-se $V = V_1 \cup V_2 \cup \dots \cup V_n$, onde $V_1 \cap V_2 \cap \dots \cap V_n = \emptyset$, $G_i = (V_i, A_i)$, $i = 1, \dots, n$, e $X_i = V - V_i$, $i = 1, \dots, n$. A partir de então, o modelo PQL pode ser reescrito da seguinte forma:

$$PQL^n: v(PQL^n) = \text{Max} \sum_{k=1}^n \left(\sum_{i \in V_k} q_{ii} x_i + \sum_{(i,j) \in P \cup N; i \in V_k; j \in V_k \cup X_k} 2q_{ij} w_{ij} \right) \quad (10)$$

Sujeito à:

$$w_{ij} - x_i \leq 0 \quad (i, j) \in P, i \in V_k, j \in V_k, k = 1, \dots, n \quad (11)$$

$$w_{ij} - x_j \leq 0 \quad (i, j) \in P, i \in V_k, j \in V_k, k = 1, \dots, n \quad (12)$$

$$x_i + x_j - w_{ij} \leq 1 \quad (i, j) \in N, i \in V_k, j \in V_k, k = 1, \dots, n \quad (13)$$

$$w_{ij} \geq 0 \quad (i, j) \in N, i \in V_k, j \in V_k, k = 1, \dots, n \quad (14)$$

$$w_{ij} - x_i \leq 0 \quad (i, j) \in P, i \in V_k, j \in X_k, k = 1, \dots, n \quad (15)$$

$$w_{ij} - x_j \leq 0 \quad (i, j) \in P, i \in V_k, j \in X_k, k = 1, \dots, n \quad (16)$$

$$x_i + x_j - w_{ij} \leq 1 \quad (i, j) \in N, i \in V_k, j \in X_k, k = 1, \dots, n \quad (17)$$

$$w_{ij} \geq 0 \quad (i, j) \in N, i \in V_k, j \in X_k, k = 1, \dots, n \quad (18)$$

$$x_i \in \{0,1\} \quad i \in V_k, k = 1, \dots, n \quad (19)$$

Pode-se notar que as restrições (11)-(14) tratam apenas as arestas (i,j) cujos vértices são internos ao *cluster* (sub-grafo) k (arestas *intra-cluster*). Já as restrições (15)-(18) tratam as arestas (i,j) cujos vértices estão em *clusters* distintos (arestas *inter-clusters* - arestas de ligação).

4.1.1. 1ª abordagem

Relaxando as restrições (15)-(17) no sentido lagrangeano através de vetores de multiplicadores α , β e λ , respectivamente, o problema PQL^n (indiretamente o PQ) pode ser dividido em n subproblemas independentes, sendo:

$$\begin{aligned}
 LC_{\alpha\beta\lambda}PQL_k: \quad v(LC_{\alpha\beta\lambda}PQL_k) = \mathbf{Max} \\
 \sum_{i \in V_k} q_{ii}x_i + \sum_{(i,j) \in (P \cup N) \cap A_k} 2q_{ij}w_{ij} + \sum_{\substack{(i,j) \in P \\ i \in V_k, j \in X_k}} \alpha_{ij}x_i + \sum_{\substack{(i,j) \in P \\ i \in X_k, j \in V_k}} \beta_{ij}x_j - \sum_{\substack{(i,j) \in N \\ i \in V_k, j \in X_k}} \lambda_{ij}x_i - \sum_{\substack{(i,j) \in N \\ i \in X_k, j \in V_k}} \lambda_{ij}x_j \\
 + \sum_{\substack{(i,j) \in P \\ i \in V_k, j \in X_k}} (2q_{ij} - \alpha_{ij} - \beta_{ij})w_{ij} + \sum_{\substack{(i,j) \in N \\ i \in V_k, j \in X_k}} (2q_{ij} + \lambda_{ij})w_{ij} + \sum_{(i,j) \in N; i \in V_k; j \in X_k} \lambda_{ij} \quad (20)
 \end{aligned}$$

Sujeito à:

$$w_{ij} - x_i \leq 0 \quad (i, j) \in P, i \in V_k, j \in V_k \quad (21)$$

$$w_{ij} - x_j \leq 0 \quad (i, j) \in P, i \in V_k, j \in V_k \quad (22)$$

$$x_i + x_j - w_{ij} \leq 1 \quad (i, j) \in N, i \in V_k, j \in V_k \quad (23)$$

$$w_{ij} \geq 0 \quad (i, j) \in N, i \in V_k, j \in V_k \quad (24)$$

$$w_{ij} \in \{0,1\} \quad i \in V_k, j \in X_k \quad (25)$$

$$x_i \in \{0,1\} \quad i \in V_k \quad (26)$$

Note que a restrição (18) é substituída pela restrição (25) para manter a viabilidade das soluções dos subproblemas. Por fim, a solução da relaxação do problema PQL (que é equivalente a PQ) em n subproblemas (*clusters*), é dada pela expressão (27), e o seu dual lagrangeano é apresentado na expressão (28).

$$LC_{\alpha\beta\lambda}PQL^n: \quad v(LC_{\alpha\beta\lambda}PQL^n) = \sum_{k=1}^n LC_{\alpha\beta\lambda}PQL_k + \sum_{(i,j) \in N; cl(i) \neq cl(j)} \lambda_{ij} \quad (27)$$

$$DLC_{\alpha\beta\lambda}PQL^n: \quad v(DLC_{\alpha\beta\lambda}PQL^n) = \mathbf{Min}\{LC_{\alpha\beta\lambda}PQL^n\}, \alpha, \beta, \lambda \geq 0. \quad (28)$$

Logo, como demonstrado por Adams e Dearing (1994), para $n = m$ tem-se que $DLC_{\alpha\beta\lambda}PQL^n$ é o *roof dual* para o PQ , e conseqüentemente, pode-se afirmar que:

$$v(DLC_{\alpha\beta\lambda}PQL^n) \leq v(DLC_{\alpha\beta\lambda}PQL^m) = \overline{PQL} \quad (29)$$

4.1.2. 2ª abordagem

Seguindo a 1ª abordagem, surge a idéia de não relaxar a restrição (15), pois assim como na 1ª abordagem, as variáveis w_{ij} e x_i serão tratadas no subproblema onde se encontra o vértice i . Logo, a relaxação dessa restrição não necessariamente deve ser considerada. Sendo assim, uma outra forma de relaxação do PQL em *clusters* pode ser escrita como:

$$\begin{aligned}
 LC_{\beta\lambda}PQL_k: \quad v(LC_{\beta\lambda}LQP_k) = \mathbf{Max} \\
 \sum_{i \in V_k} q_{ii}x_i + \sum_{(i,j) \in P \cup N; i \in V_k; j \in V_k \cup X_k} 2q_{ij}w_{ij} + \sum_{(i,j) \in P; j \in V_k; i \in X_k} \beta_{ij}x_j \\
 - \sum_{(i,j) \in N; i \in V_k; j \in X_k} \lambda_{ij}x_i - \sum_{(i,j) \in N; i \in X_k; j \in V_k} \lambda_{ij}x_j - \sum_{(i,j) \in P; i \in V_k; j \in X_k} \beta_{ij}w_{ij} + \sum_{(i,j) \in P; i \in V_k; j \in X_k} \lambda_{ij}w_{ij} \quad (30)
 \end{aligned}$$

Sujeito à:

$$w_{ij} - x_i \leq 0 \quad (i, j) \in P, i \in V_k, j \in V_k \cup X_k \quad (31)$$

$$w_{ij} - x_j \leq 0 \quad (i, j) \in P, i \in V_k, j \in V_k \quad (32)$$

$$x_i + x_j - w_{ij} \leq 1 \quad (i, j) \in N, i \in V_k, j \in V_k \quad (33)$$

$$w_{ij} \geq 0 \quad (i, j) \in N, i \in V_k, j \in V_k \cup X_k \quad (34)$$

$$x_i \in \{0,1\} \quad i \in V_k \quad (35)$$

Note que nesse caso a restrição (18) não precisará ser substituída. Nesse modelo, as restrições (31) e (34) são "junções" das restrições (11) e (15), e (14) e (18), respectivamente. A solução da relaxação do problema PQL em n clusters é dada pela expressão (36), e o seu dual lagrangeano pela expressão (37).

$$LC_{\beta\lambda}PQL^n: \quad v(LC_{\beta\lambda}PQL^n) = \sum_{k=1}^n LC_{\beta\lambda}PQL_k + \sum_{(i,j) \in N: cl(i) \neq cl(j)} \lambda_{ij} \quad (36)$$

$$DLC_{\beta\lambda}PQL^n: \quad v(DLC_{\beta\lambda}PQL^n) = \text{Min}\{LC_{\beta\lambda}PQL^n\}, \beta, \lambda \geq 0. \quad (37)$$

Mais uma vez, a partir das idéias expostas em Adams e Dearing (1994) e da 1ª abordagem, pode-se afirmar diretamente que:

$$v(DLC_{\beta\lambda}PQL^n) \leq v(DLC_{\alpha\beta\lambda}PQL^n) \leq v(DLC_{\beta\lambda}PQL^m) = v(DLC_{\alpha\beta\lambda}PQL^m) = \overline{PQL} \quad (38)$$

5. Otimização dos modelos

O Cplex 10.0.1 (Ilog, 2006) foi utilizado para resolver a relaxação linear do problema (\overline{PQL}) e a relaxação linear com a restrição de corte ($PQLC$), ambas com o tempo limite de 1 hora de processamento.

Para otimizar o dual lagrangeano dos modelos apresentados na seção anterior, e consequentemente obter limitantes para o PQ , foi utilizado o algoritmo de subgradiente apresentado em Narciso e Lorena (1999), que aproxima as soluções do problema no sentido euclidiano de distância (Parker e Rardin, 1988).

O Cplex também foi utilizado para resolver de forma exata os modelos dos problemas e subproblemas (no caso da divisão em *clusters*) a cada iteração do algoritmo de subgradiente. O tempo limite para execução desse algoritmo também foi de 1 hora, porém em alguns casos esse limite foi ultrapassado devido ao tempo de resolução dos subproblemas via Cplex.

A divisão do grafo G foi realizada através da heurística Metis (Karyps e Kumar, 1998), que segundo Hicks *et al.* (2005), apresenta bons resultados para o particionamento de grafos. Dado um grafo $G=(V,A)$ e um número pré-definido n de *clusters*, a Metis divide o grafo G em n agrupamentos com o objetivo de minimizar o número de arestas com terminações em *clusters* distintos.

6. Resultados computacionais

Foram realizados inúmeros experimentos computacionais envolvendo os modelos já descritos sobre um conjunto de 45 instâncias disponíveis na OR-Library (Beasley, 1990). Essas instâncias foram geradas através do gerador proposto por Pardalos e Rodgers (1990a), e separadas em 6 classes (A, B, C, D, E e F) com diferentes características (m , densidade, e intervalo dos elementos da matriz Q). Os problemas das classes A, B e C foram apresentados em Pardalos e Rodgers (1990a), e os demais em Glover *et al.* (1998). Segundo Glover *et al.* (1998), essas instâncias, devido a suas características, estão entre as mais difíceis encontradas na literatura.

Todos os experimentos foram realizados em um PC com processador AMD Athlon de 2.2 GHz com 1GB de memória RAM, e o código-fonte foi implementado em C++. Nas tabelas seguintes, os *gaps* apresentados são calculados de acordo com a expressão (39), na qual $v(OPT)$ é o valor das melhores soluções conhecidas (Glover *et al.*, 1998) para as instâncias utilizadas, e $v(Solução)$ é o valor dos limitantes obtidos pelas abordagens propostas. Os melhores resultados estão destacados em negrito. As últimas colunas dessas tabelas apresentam os tempos médios

necessários para resolver cada instância através do método correspondente. O tamanho de cada *cluster* foi limitado a 50 vértices em todos os experimentos.

$$gap = \frac{v(\text{Solução}) - v(\text{OPT})}{v(\text{OPT})} \times 100 \quad (39)$$

Como pode ser observado na Tabela 1, os *gaps* obtidos pelas relaxações com divisão em *clusters* foram semelhantes, e de melhor qualidade em relação às demais relaxações. Nesses casos, os problemas foram divididos em 2 *clusters*. Os resultados obtidos pelas relaxações lagrangeanas baseadas nas arestas positivas ($Lag_{\alpha}PQL$, $Lag_{\beta}PQL$ e $Lag_{\alpha\beta}PQL$) foram de qualidade mediana, e os demais foram ruins, e praticamente iguais ao $roof\ dual - PQL$.

Tabela 1: *Gaps* obtidos para as instâncias da classe A.

Inst.		1a	2a	3a	4a	5a	6a	7a	8a	Tempo médio (seg)
<i>m</i>		50	60	70	80	50	30	30	100	
Densidade (%)		10	10	10	10	20	40	50	6,25	
Gap (%)	PQL	0	0	6,77	0,10	16,12	28,38	28,51	0	0,01
	$PQLC$	0	0	6,36	0,10	11,59	20,67	10,58	0	0,01
	$DLag_{\alpha}PQL$	0	0	3,37	0,10	4,17	8,48	7,69	0	17,16
	$DLag_{\beta}PQL$	0	0	3,37	0,10	4,17	8,48	7,69	0	19,84
	$DLag_{\lambda}PQL$	0	0	6,78	0,10	16,13	28,38	28,51	0	1,97
	$DLag_{\alpha\beta}PQL$	0	0	3,39	0,10	4,29	8,49	7,70	0	23,66
	$DLag_{\alpha\lambda}PQL$	0	0	6,79	0,10	16,16	28,49	28,61	0	0,74
	$DLag_{\beta\lambda}PQL$	0	0	6,78	0,10	16,14	28,46	28,61	0	3,00
	$DLag_{\alpha\beta\lambda}PQL$	0	0	6,79	0,25	16,16	28,47	28,60	0	23,66
	$DLC_{\alpha\beta\lambda}PQL^2$	0	0	0,32	0,10	0,36	0,14	0	0	25,99
$DLC_{\beta\lambda}PQL^2$	0	0	0,32	0,10	0,36	0,14	0	0	21,48	

Na Tabela 2, que trata um conjunto de instâncias com grandes *gaps* de dualidade, os *gaps* obtidos pelas relaxações com divisão em *clusters* também foram semelhantes, e novamente os resultados foram significativamente melhores dos que os demais. As instâncias apresentadas nessa tabela (da classe B) são formadas por matrizes **Q** nas quais todos os elementos externos à diagonal principal são negativos ou nulos ($q_{ij} \leq 0, \forall i < j$). Logo, as relaxações lagrangeanas baseadas nas arestas positivas ($Lag_{\alpha}PQL$, $Lag_{\beta}PQL$ e $Lag_{\alpha\beta}PQL$) não foram utilizadas. Nesse caso, apenas os resultados da $Lag_{\lambda}PQL$ são apresentados, pois $v(Lag_{\lambda}PQL) = v(Lag_{\alpha\lambda}PQL) = v(Lag_{\beta\lambda}PQL) = v(Lag_{\alpha\beta\lambda}PQL)$. Além disso, como não existem arestas positivas, também fica claro que $v(DLC_{\alpha\beta\lambda}PQL^2) = v(DLC_{\beta\lambda}PQL^2)$. Os problemas também foram divididos em 2 *clusters*. Os resultados obtidos pela relaxação linear com a restrição de corte foram razoáveis.

Tabela 2: *Gaps* obtidos para as instâncias da classe B.

Inst.		1b	2b	3b	4b	5b	6b	7b	8b	9b	10b	Tempo médio (seg)
<i>m</i>		20	30	40	50	60	70	80	90	100	125	
Densidade (%)		100	100	100	100	100	100	100	100	100	10	
Gap (%)	PQL	193,98	328,51	429,24	537,60	532,67	678,77	687,50	890,00	1109,12	1175,97	0,04
	$PQLC$	95,99	185,67	252,82	325,06	321,78	419,18	425,00	560,00	706,08	750,65	1,26
	$DLag_{\lambda}PQL$	194,66	329,68	429,66	538,65	534,36	680,98	690,11	892,05	1109,76	1176,72	2,17
	$DLC_{\alpha\beta\lambda}PQL^2$	38,72	49,59	52,54	47,68	38,99	52,05	25,93	66,21	74,82	63,86	466,09
	$DLC_{\beta\lambda}PQL^2$	38,72	49,59	52,54	47,68	38,99	52,05	25,93	66,21	74,82	63,86	466,06

A Tabela 3 mostra que os resultados obtidos pelas relaxações com divisão em *clusters* foram significativamente melhores do que os demais, sendo que a 2ª abordagem ($LC_{\beta\lambda}PQL^2$) apresentou resultados melhores do que a 1ª ($LC_{\alpha\beta\lambda}PQL^2$). Os problemas também foram divididos em 2 *clusters*. Os resultados obtidos pelas relaxações lagrangeanas baseadas nas arestas positivas

e pela relaxação linear com a restrição de corte foram medianos, e distantes do *roof dual*, e os demais foram praticamente iguais ao *roof dual*.

Tabela 3: Gaps obtidos para as instâncias da classe C.

Inst.		1c	2c	3c	4c	5c	6c	7c	Tempo médio (seg)
<i>m</i>		40	50	60	70	80	90	100	
Densidade (%)		80	60	40	30	20	10	10	
Gap (%)	\overline{PQL}	65,57	63,79	44,04	36,62	21,64	1,48	0	0,03
	$PQLC$	21,31	25,51	22,27	20,03	16,35	0,30	0	0,59
	$DLag_{\alpha}PQL$	17,31	20,43	14,31	9,11	6,90	0	0	1950,40
	$DLag_{\beta}PQL$	17,27	20,43	14,24	9,15	6,91	0	0	2016,56
	$DLag_{\lambda}PQL$	65,73	63,95	44,09	36,70	21,68	1,48	0	6,30
	$DLag_{\alpha\beta}PQL$	17,33	21,21	14,54	9,49	6,97	0,06	0	2145,84
	$DLag_{\alpha\lambda}PQL$	65,80	64,02	44,21	36,76	21,72	1,48	0	1,72
	$DLag_{\beta\lambda}PQL$	65,83	64,01	44,19	36,75	21,72	1,48	0	1,76
	$DLag_{\alpha\beta\lambda}PQL$	65,71	64,04	44,14	36,73	21,72	1,48	0,18	1,50
	$DLC_{\alpha\beta\lambda}PQL^2$	13,68	10,16	0	0,62	0,45	0	0	608,11
	$DLC_{\beta\lambda}PQL^2$	13,68	10,16	0	0,55	0,37	0	0	465,65

Na Tabela 4, pode-se notar que os resultados obtidos pelas relaxações com divisão em *clusters* foram novamente melhores que os demais para as instâncias com densidade inferior a 50%. Já para as demais instâncias, a relaxação linear com a restrição de corte ($PQLC$) apresentou os melhores resultados. Entretanto, a 2ª abordagem com divisão em *clusters* ($LC_{\beta\lambda}PQL^2$) apresentou resultados muito próximos aos obtidos pela $PQLC$, e melhores que a 1ª abordagem ($LC_{\alpha\beta\lambda}PQL^2$). Os problemas também foram divididos em 2 *clusters*. Mais uma vez, os resultados obtidos pelas relaxações lagrangeanas baseadas nas arestas positivas foram de qualidade mediana, e os demais foram piores que o *roof dual*. Para essas instâncias, as abordagens baseadas na divisão em *clusters* encontram dificuldades para obter bons limitantes, pois nesses casos a matriz Q é muito densa, e conseqüentemente o número de arestas *inter-clusters* (que são relaxadas) é grande.

Tabela 4: Gaps obtidos para as instâncias da classe D.

Inst.		1d	2d	3d	4d	5d	6d	7d	8d	9d	10d	Tempo médio (seg)
<i>m</i>		100	100	100	100	100	100	100	100	100	100	
Densidade (%)		10	20	30	40	50	60	70	80	90	100	
Gap (%)	PQL	11,53	86,91	94,94	134,52	164,34	162,79	205,14	207,24	252,13	234,16	0,76
	$PQLC$	8,27	64,31	58,08	73,17	86,05	80,52	110,48	105,85	134,76	132,04	65,50
	$DLag_{\alpha}PQL$	1,73	44,96	57,69	92,15	125,90	116,84	162,80	181,96	194,06	183,00	4103,49
	$DLag_{\beta}PQL$	1,75	46,85	60,07	95,73	112,79	113,68	162,54	151,40	226,05	197,91	3660,77
	$DLag_{\lambda}PQL$	11,54	86,98	95,01	134,57	164,38	163,05	205,16	207,67	252,45	234,55	37,53
	$DLag_{\alpha\beta}PQL$	1,82	60,09	79,38	171,27	203,18	203,10	241,26	246,30	284,30	274,54	3340,16
	$DLag_{\alpha\lambda}PQL$	11,57	87,25	95,28	135,03	164,93	163,43	205,93	208,05	253,10	235,05	5,21
	$DLag_{\beta\lambda}PQL$	11,57	87,18	95,25	135,00	164,94	163,41	205,90	208,04	253,06	235,03	4,94
	$DLag_{\alpha\beta\lambda}PQL$	11,56	87,20	95,14	134,93	164,67	163,10	205,52	207,61	252,62	234,82	4,03
	$DLC_{\alpha\beta\lambda}PQL^2$	0	26,91	35,79	81,47	113,57	109,27	181,13	149,80	208,84	305,00	3885,52
	$DLC_{\beta\lambda}PQL^2$	0	24,86	27,28	64,42	87,69	82,29	117,88	119,64	161,10	150,03	4387,28

A Tabela 5 mostra que os resultados obtidos pelas relaxações com divisão em *clusters* também foram melhores do que os demais para as instâncias com baixa densidade. Já para as demais instâncias, a relaxação linear com a restrição de corte ($PQLC$) apresentou os melhores resultados. A 2ª abordagem com divisão em *clusters* ($LC_{\beta\lambda}PQL^4$) apresentou resultados melhores que a 1ª ($LC_{\alpha\beta\lambda}PQL^4$). Nesses casos, os problemas foram divididos em 4 *clusters*. Os resultados obtidos pelas relaxações lagrangeanas baseadas nas arestas positivas foram razoáveis, e os demais foram piores que o *roof dual*.

Na Tabela 6, pode-se notar que os resultados obtidos pelas relaxações com divisão em *clusters* foram ruins para todas as instâncias, e a 2ª abordagem com divisão em *clusters* ($LC_{\beta\lambda}PQL^{10}$) novamente apresentou resultados melhores que a 1ª ($LC_{\alpha\beta\lambda}PQL^{10}$). Notou-se nesses experimentos que o Cplex encontrou dificuldades em resolver os subproblemas, consumindo um alto tempo de processamento, e conseqüentemente o número de iterações do algoritmo de subgradiente foi muito baixo (< 100). Logo, os resultados foram ruins (pior que o *roof dual* em alguns casos). Nesses casos, os problemas foram divididos em 10 *clusters*. A relaxação linear com a restrição de corte (*PQLC*) apresentou bons resultados para as duas primeiras instâncias, e para as demais o Cplex não foi capaz de resolver os modelos em 1 hora. Já os resultados obtidos pelas relaxações lagrangeanas baseadas nas arestas positivas apresentaram excelentes resultados.

Tabela 5: Gaps obtidos para as instâncias da classe E.

Inst.		1e	2e	3e	4e	5e	Tempo médio (seg)
<i>m</i>		200	200	200	200	200	
Densidade (%)		10	20	30	40	50	
Gap (%)	\overline{PQL}	44,27	119,48	188,73	186,88	263,42	2,59
	<i>PQLC</i>	35,26	83,86	110,69	98,50	148,84	293,48
	$DLag_{\alpha}PQL$	28,34	94,40	144,66	197,18	228,72	3630,62
	$DLag_{\beta}PQL$	28,26	105,59	155,59	187,58	258,77	4366,85
	$DLag_{\lambda}PQL$	44,41	119,57	188,80	186,91	263,81	106,75
	$DLag_{\alpha\beta}PQL$	48,97	160,25	225,73	217,13	298,72	3626,49
	$DLag_{\alpha\lambda}PQL$	44,43	119,93	189,42	187,52	264,43	11,84
	$DLag_{\beta\lambda}PQL$	44,43	119,94	189,45	187,60	264,44	11,63
	$DLag_{\alpha\beta\lambda}PQL$	44,43	119,72	189,09	187,45	264,08	9,36
	$DLC_{\alpha\beta\lambda}PQL^4$	13,77	83,14	151,18	186,41	279,85	3746,97
	$DLC_{\beta\lambda}PQL^4$	13,30	79,58	136,94	138,58	224,51	4072,38

Tabela 6: Gaps obtidos para as instâncias da classe F.

Inst.		1f	2f	3f	4f	5f	Tempo médio (seg)
<i>m</i>		500	500	500	500	500	
Densidade (%)		10	25	50	75	100	
Gap (%)	\overline{PQL}	159,28	297,20	474,68	587,96	500,32	1561,36
	<i>PQLC</i>	126,12	164,58	-	-	-	2919,29
	$DLag_{\alpha}PQL$	124,66	306,49	26,35	11,08	9,41	3725,14
	$DLag_{\beta}PQL$	165,98	301,88	19,33	28,21	29,68	4537,57
	$DLag_{\lambda}PQL$	159,40	297,34	474,75	588,45	747,97	2488,11
	$DLag_{\alpha\beta}PQL$	423,65	696,82	1050,44	1276,14	1557,97	3609,29
	$DLag_{\alpha\lambda}PQL$	159,88	298,33	476,44	590,24	731,40	132,21
	$DLag_{\beta\lambda}PQL$	159,86	298,36	476,44	590,18	731,38	150,10
	$DLag_{\alpha\beta\lambda}PQL$	159,60	297,77	476,02	588,98	730,04	119,19
	$DLC_{\alpha\beta\lambda}PQL^{10}$	182,42	274,60	933,42	1151,23	1425,93	11765,25
	$DLC_{\beta\lambda}PQL^{10}$	132,90	272,42	448,25	559,69	706,28	5069,41

7. Conclusões

Este trabalho apresentou novas abordagens para obtenção de limitantes para o problema de programação quadrática binária irrestrita. Foram realizados vários experimentos com instâncias de diferentes características cuja obtenção de soluções apresenta um alto grau de dificuldade.

A relaxação lagrangeana com divisão em *clusters* apresentou excelentes resultados para as instâncias com até 200 variáveis, principalmente para as instâncias com baixa densidade. Já para as instâncias com 500 variáveis, tais métodos falharam, principalmente pela dificuldade encontrada pelo Cplex em resolver os subproblemas dentro de um tempo aceitável.

A relaxação linear com a restrição de corte apresentou bons resultados para instâncias maiores com alta densidade, porém o Cplex não foi capaz de encontrar soluções em alguns casos. Já as relaxações lagrangeanas baseadas nas arestas positivas apresentaram bons resultados para as instâncias com 500 variáveis, e resultados medianos para as demais. As demais relaxações apresentaram resultados ruins em todos os casos.

Os resultados obtidos indicam que os limitantes apresentados contribuem com a exploração do PQ , e sugerem maiores esforços no sentido de encontrar técnicas mais eficientes para resolução dos subproblemas para os métodos baseados na divisão em *clusters*. Uma possível alternativa é a otimização dos subproblemas através do processamento paralelo.

Agradecimentos

Os autores agradecem à Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo - FAPESP (processo 04/11053-9) e ao Conselho Nacional de Pesquisas - CNPq (processo 304598/2003-8) pelo apoio financeiro parcial dado ao desenvolvimento deste trabalho.

Referências

- Adams, W.P., Forrester, R.J. e Glover, F.W.** (2004), Comparisons and enhancement strategies for linearizing mixed 0-1 quadratic programs, *Discrete Optimization*, 1, 99-120.
- Adams, W.P. e Dearing, P.M.** (1994), On the equivalence between roof duality and lagrangean duality for unconstrained 0-1 quadratic programming problems, *Discrete Applied Mathematics*, 48(1), 1-20.
- Beasley, J.E.** (1998), Heuristic algorithms for the unconstrained binary quadratic programming problem, *Technical Report - Management School, Imperial College*, London, UK.
- Beasley, J.E.** (1990), Or-library: Distributing test problems by electronic mail. *Journal of the Operational Research Society*, 41(11), 1069-1072.
- Billionnet, A. e Calmels, F.** (1996), Linear programming for the 0-1 quadratic knapsack problem, *European Journal of Operational Research*, 92(2), 310-325.
- Billionnet, A. e Elloumi, S.** (2007), Using a mixed integer quadratic programming solver for the unconstrained quadratic 0-1 problem, *Mathematical Programming*, 109, 55-68.
- Billionnet, A., Faye, A. e Soutif, E.** (1999), A new upper bound for the 0-1 quadratic knapsack problem, *European Journal of Operational Research*, 112, 664-672.
- Billionnet, A. e Sutter, A.** (1994), Minimization of a quadratic pseudo-Boolean function, *European Journal of Operational Research*, 78, 106-115.
- Boros, E., Crama, Y. e Hammer, P.L.** (1990), Upper bounds for quadratic 0-1 maximization, *Operations Research Letters*, 9, 73-79.
- Boros, E., Crama, Y. e Hammer, P.L.** (1992), Chvatal cuts and odd cycle inequalities in quadratic 0-1 optimization, *Journal on Discrete Mathematics*, 5(2), 163-177.
- Chardaire, P. e Sutter, A.** (1995), A decomposition method for quadratic zero-one programming, *Management Science*, 41(4), 704-712.
- Corrêa, F.A., Lorena, L.A.N. e Senne, E.L.F.** (2006), Lagrangean relaxation with clusters for the uncapacitated facility location problem, *XIII CLAIO - Congresso Latino-Iberoamericano de Investigación Operativa*, Montevideo - Uruguay.
- Glover, F., Kochenberger, G.A. e Alidaee, B.** (1998), Adaptive memory tabu search for binary quadratic programs, *Management Science*, 44(3), 336-345.
- Glover, F. e Woolsey, E.** (1974), Converting a 0-1 polynomial programming problem to a 0-1 linear program, *Operations Research*, 22, 180-182.

- Gulati, V.P., Gupta, S.K. e Mittal, A.K.** (1984). Unconstrained quadratic bivalent programming problem, *European Journal of Operational Research*, 15, 121-155.
- Hammer, P.L., Hansen, P. e Simeone, B.** (1984), Roof duality, complementation and persistency in quadratic 0-1 optimization, *Mathematical Programming*, 28, 121-195.
- Hansen, P. e Meyer, C.** (2008), Improved compact linearizations for the unconstrained quadratic 0-1 minimization problem, *Discrete Applied Mathematics*, in press.
- Hicks, I.V., Warren, J.S., Warriar, D. e Wilhelm, W.E.** (2005), A branch-and-price approach for the maximum weight independent set problem, *Networks*, 46(4), 198-209.
- Ilog** (2006), ILOG CPLEX 10.0: user's manual. France: [s.n.], 478 p.
- Karypis, G. e Kumar, V.** (1998), Multilevel k-way partitioning scheme for irregular graphs, *Journal of Parallel and Distributed Computing*, 48, 96-129.
- Krarup, J. e Pruzan, P.A.** (1978), Computer aided layout design, *Mathematical Programming Study*, 9, 75-94.
- Laughunn, D.J.** (1970), Quadratic binary programming with application to capital budgeting problems, *Operations Research*, 18, 454-461.
- McBride, R.D. e Yormark, J.S.** (1980), An implicit enumeration algorithm for quadratic integer programming, *Management Science*, 26, 282-296.
- Narciso, M.G. e Lorena, L.A.N.** (1999), Lagrangean/surrogate relaxation for generalized assignment problems, *European Journal of Operational Research*, 114, 165-177.
- Palubeckis, G.** (1995), A heuristic-based branch and bound algorithm for unconstrained quadratic 0-1 programming, *Computing*, 54(4), 283-301.
- Pardalos, P.M. e Phillips, A.T.** (1990), A global optimization approach for solving the maximum clique problem, *International Journal of Computer Mathematics*, 33, 209-216.
- Pardalos, P.M. e Jha, S.** (1992), Complexity of uniqueness and local search in quadratic 0-1 programming, *Operations Research Letters*, 11, 119-123.
- Pardalos, P.M. e Rodgers, G.P.** (1990a), Computational aspect of a branch and bound algorithm for quadratic 0-1 programming, *Computing*, 45, 131-144.
- Pardalos, P.M. e Rodgers, G.P.** (1990b), Parallel branch and bound algorithms for quadratic zero-one programs on the hypercube architecture, *Annals of Operations Research*, 22, 271-292.
- Pardalos, P.M. e Rodgers, G.P.** (1992), A branch and bound algorithm for the maximum clique problem, *Computers & Operations Research*, 19, 363-375.
- Pardalos, P.M. e Xue, J.** (1994), The maximum clique problem, *Journal of Global Optimization*, 4, 301-328.
- Parker, R.G. e Rardin, R.L.** (1988), *Discrete Optimization*, Academic Press, New York, USA.
- Phillips, A.T. e Rosen, J.B.** (1994), A quadratic assignment formulation of the molecular conformation problem, *Journal of Global Optimization*, 4, 229-241.
- Ribeiro, G.M.** (2005), Relaxação lagrangeana com divisão em clusters para alguns problemas de otimização modelados em grafos de conflitos, *Proposta de Tese* (Doutorado em Computação Aplicada) - Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais, São José dos Campos - SP.
- Ribeiro, G.M. e Lorena, L.A.N.** (2007), Lagrangean relaxation with clusters and column generation for the manufacturer's pallet loading problem, *Computers & Operations Research*, 34(9), 2695-2708.

Ribeiro, G.M. e Lorena, L.A.N. (2008), Lagrangean relaxation with clusters for point-feature cartographic label placement problems, *Computers & Operations Research*, 35, 2129-2140.