MO824A/MC859A – Tópicos em Otimização Combinatória
Primeiro semestre de 2019

Atividade 6 (extra-classe)
Entrega: 21 de maio até meio-dia

Prof. Fábio Luiz Usberti (fusberti@ic.unicamp.br)
Prof. Celso Cavellucci (celsocv@ic.unicamp.br)

---

1 Objetivo

O objetivo desta atividade na análise comparativa de três metaheurísticas (GRASP, Busca Tabú e Algoritmo Genético) e de modelos de programação inteira para o problema de maximização de uma função binária quadrática ("quadractic binary function" – QBF) com triplas proibidas.

2 Problema MAX-QBF

Uma função binária quadrática (QBF) é uma função $f : \mathbb{B}^n \to \mathbb{R}$ que pode ser expressa como uma soma de termos quadráticos:

$$f(x_1, \dots, x_n) = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} a_{ij} \cdot x_i \cdot x_j$$

Onde $a_{ij} \in \mathbb{R} \;\; (i, j = 1, \dots, n)$ são os coeficientes da função f. Em notação matricial, uma QBF pode ser expressa como:

$$f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}' \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{x}$$

Por exemplo:

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}) &= \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & x_3 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 3 \\ 0 & 0 & 4 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 0 & x_1 & (2x_1 + 3x_2 + 4x_3) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} \\ &= x_1x_2 + 2x_1x_3 + 3x_2x_3 + 4x_3^2 \end{aligned}$$

O problema de maximização de uma função binária quadrática (MAX-QBF) pode ser expresso como:

$$Z = \max_{\mathbf{x}} \; f(\mathbf{x}) \; ,$$

O MAX-QBF é um problema NP-difícil [1], mesmo que nenhuma restrição adicional seja imposta sobre as variáveis binárias $\mathbf{x}$. No entanto, se os coeficientes a_{ij} forem todos não-negativos, o problema torna-se trivial, uma vez que $x_i = 1 \;\; (i = 1, \dots, n)$ é uma solução ótima.

3 Problema MAX-QBF com triplas proibidas

Uma variante do problema MAX-QBF é definida a seguir:

Problema MAX-QBFPT ("Maximum quadractic binary function with prohibited triples"): Considere o conjunto $\mathcal{T}$ de todas as triplas ordenadas, sem repetição, dos naturais de 1 a n, ou seja, $\mathcal{T} = \{(i, j, k) \in \mathbb{N}^3 : 1 \leqslant i < j < k \leqslant n\}$. No problema **MAX-QBFPT**, dado um conjunto de triplas proibidas $T \subseteq \mathcal{T}$, deseja-se maximizar uma função binária quadrática tal que x_i, x_j e x_k não podem ser todos iguais a 1, para todo $(i, j, k) \in T$. Este problema pode ser formulado da seguinte forma:

$$
\begin{array}{lll}
Max & Z = \displaystyle\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} a_{ij} \cdot x_i \cdot x_j & \\
s.a. & & \\
 & x_i + x_j + x_k \leqslant 2 & \forall (i, j, k) \in T \\
 & x_i \in \mathbb{B} & \forall i = \{1, \ldots, n\}
\end{array}
$$

Onde $a_{ij} \in \mathbb{R}\ \ (i, j = 1, \ldots, n)$ são parâmetros do problema.

Para esta atividade, o conjunto de triplas proibidas T será definido da seguinte forma. Para cada natural $u \in [1, n]$ serão aplicadas duas funções $g, h : [1, n] \rightarrow [1, n]$ para gerar dois novos números que formarão uma tripla proibida. As funções g e h serão definidas tomando como base a seguinte função linear congruente l, tipicamente usada para a geração de números pseudo-aleatórios:

$$
l(u) = \ \ 1 + ((\pi_1 \cdot (u - 1) + \pi_2) \mod n)
$$

Onde π_1 e π_2 são normalmente escolhidos como números primos.

Para impedir que $g(u) = u$, define-se a função g da seguinte forma:

$$
g(u) = \begin{cases} l(u) & \text{se } l(u) \neq u \\ 1 + (l(u) \mod n) & \text{caso contrário} \end{cases}
$$

Para impedir que $h(u) = u$ ou $h(u) = g(u)$, define-se a função h da seguinte forma:

$$
h(u) = \begin{cases} l(u) & \text{se } l(u) \neq u \wedge l(u) \neq g(u) \\ 1 + (l(u) \mod n) & \text{se } (1 + (l(u) \mod n)) \neq u \wedge (1 + (l(u) \mod n)) \neq g(u) \\ 1 + ((l(u) + 1) \mod n) & \text{caso contrário} \end{cases}
$$

Para esta atividade, os números primos utilizados para a função g são $\pi_1 = 131$ e $\pi_2 = 1031$; para a função h os números primos são $\pi_1 = 193$ e $\pi_2 = 1093$.

A partir das informações acima, torna-se possível definir o conjunto de triplas proibidas desta atividade como $T = \{(i, j, k) \in \mathcal{T} : \forall u \in [1, n], (i, j, k) = sort(\{u, g(u), h(u)\})\}$.

4 Linearização do modelo MAX-QBF com triplas proibidas

Uma forma de linearizar o model quadrático para o MAX-QBFPT é apresentada a seguir:

$$
\begin{array}{lll}
Max & Z = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} a_{ij} \cdot w_{ij} & \\
s.a. & & \\
 & x_i + x_j + x_k \leqslant 2 & \forall (i, j, k) \in T \\
 & w_{ij} \leqslant x_i & \forall i = \{1, \ldots, n\}, \forall j = \{1, \ldots, n\} \\
 & w_{ij} \leqslant x_j & \forall i = \{1, \ldots, n\}, \forall j = \{1, \ldots, n\} \\
 & w_{ij} \geqslant x_i + x_j - 1 & \forall i = \{1, \ldots, n\}, \forall j = \{1, \ldots, n\} \\
 & x_i \in \mathbb{B} & \forall i = \{1, \ldots, n\} \\
 & w_{ij} \geqslant 0 & \forall i = \{1, \ldots, n\}, \forall j = \{1, \ldots, n\}
\end{array}
$$

Observe a introdução de uma nova variável real w_{ij} não-negativa tal que $w_{ij} = 1$ se x_i e x_j forem ambos iguais a 1, caso contrário $w_{ij} = 0$.

5 Requisitos da atividade

Esta atividade consiste na análise comparativa de desempenho entre as metaheurísticas GRASP, Busca Tabú e Algoritmo Genético, e dos modelos quadrático e linearizado para o MAX-QBFPT. Para a análise deverão ser utilizados gráficos *ttt-plots* e *performance profiles*. As cinco metodologias que deverão ser comparadas são:

- $GRASP$: metaheurística GRASP desenvolvida na Atividade 3.
- $Tabu$: metaheurística Busca Tabú desenvolvida na Atividade 4.
- AG: metaheurística Algoritmo Genético desenvolvida na Atividade 5.
- $Model1$: modelo inteiro quadrático para o MAX-QBFPT resolvido com alguma ferramenta de programação matemática (Ex: Gurobi).
- $Model2$: modelo linear inteiro misto para o MAX-QBFPT resolvido com alguma ferramenta de programação matemática (Ex: Gurobi).

Você pode usar como base o código[1] elaborado pelos docentes da disciplina para a solução dos modelos matemáticos.

É necessário apresentar no relatório:

- Metodologia de geração do gráfico *ttt-plot*.
- Gráfico *ttt-plot* comparando as três metaheurísticas.
- Discussão sobre o desempenho das metaheurísticas com base no gráfico *ttt-plot*.
- Metodologia de geração do gráfico *performance profile*.
- Gráfico *performance profile* comparando as três metaheurísticas e os dois modelos utilizando como métrica de comparação o valor da melhor solução obtida.

[1] presume a instalação do Gurobi.

- Discussão sobre o desempenho das metodologias com base no gráfico *performance profile*.

Finalmente, o relatório deve apresentar uma tabela com os resultados dos testes computacionais comparando as cinco metodologias. A tabela deve conter para cada instância a melhor solução obtida por cada metodologia e no caso dos modelos, incluir também os limitantes duais.

Esta atividade exige a entrega dos códigos-fonte utilizados e de um relatório de cinco páginas (aproximadamente) apresentando uma discussão dos resultados obtidos.

6 Instâncias

Testes computacionais devem ser realizados com um conjunto de sete instâncias disponíveis no ambiente ensino aberto. Recomenda-se um tempo de execução para cada instância de pelo menos 30 minutos. Os nomes das instâncias, suas dimensões e os valores das soluções ótimas (quando conhecidos) são fornecidos a seguir:

Instância	$\lvert\mathbf{x}\rvert$	MAX-QBF (Z^*)	MAX-QBFPT (Z^*)
qbf020	20	**151**	**125**
qbf040	40	**429**	**366**
qbf060	60	**576**	$[508, 576]$
qbf080	80	**1000**	$[843, 1000]$
qbf100	100	$[1468, 1539]$	$[1263, 1539]$
qbf200	200	$[5385, 5826]$	$[3813, 5826]$
qbf400	400	$[14826, 16625]$	$[9645, 16625]$

Para fins de conferência, seguem as triplas proibidas para a instância qbf020:

```
[1, 12, 14]
[2, 3, 7]
[3, 14, 20]
[4, 5, 13]
[5, 6, 16]
[6, 7, 19]
[7, 12, 18]
[5, 8, 9]
[9, 18, 20]
[10, 11, 12]
[2, 4, 11]
[12, 13, 17]
[4, 10, 13]
[3, 14, 15]
[6, 15, 16]
[9, 16, 17]
[2, 8, 17]
[15, 18, 19]
[8, 10, 19]
[1, 2, 20]
```

7 Referências

1. Kochenberger, et al. The unconstrained binary quadratic programming problem: a survey. **J Comb Optim** (2014). 28:58–81. DOI:10.1007/s10878-014-9734-0.

2. Michel Gendreau e Jean-Yves Potvin. Tabu Search. In: M. Gendreau, J.-Y. Potvin (eds.), **Handbook of Metaheuristics**, International Series in Operations Research & Management Science 146, DOI: 10.1007/978-1-4419-1665-5.

3. Manuel López-Ibáñez, Jérémie Dubois-Lacoste, Leslie Pérez Cáceres, Thomas Stützle, and Mauro Birattari. The irace package: Iterated Racing for Automatic Algorithm Configuration. **Operations Research Perspectives**, 3:43?58, 2016.

4. R. M. Aiex, M. G. C. Resende, and C. C. Ribeiro. tttplots - a perl program to create time-to-target plots. AT&T Labs Research Technical Report (TD-6HT7EL), 2005.

5. E. D. Dolan and J. J. Moré. Benchmarking optimization software with performance profiles. **Mathematical Programming**, 91(2), 2002. DOI: 10.1007/s101070100263.