# MO824 - Análise Comparativa entre as metaheurísticas *GRASP*, *Tabu*, e *GA* para a resolução do problema MAX-QBF com mochila

Lucas Guesser Targino da Silva (203534)

3 de julho de 2022

Esse trabalho tem como objetivo comparar os resultados obtidos pelas implementações de três metaheurísticas:

1. *Greedy Randomized Adaptive Search Procedure* (*GRASP*) [1]

2. *Tabu Search* (*Tabu*) [2]

3. *GA Algorithm* (*GA*) [3]

O problema resolvido foi o *MAX-QBF com mochila*, descrito no Apêndice A.

## 1 Metaheurísticas

Nessa seção são descritas todas as metaheurísticas utilizadas ao longo do trabalho.

No desenvolvimento dos trabalhos anteriores, explorou-se variações de cada metaheurística, essas com diferentes parâmetros, estratégias construtivas, buscas locais, etc. Para cada metaheurística, foram selecionadas duas variações, as que apresentaram melhor desempenho, para serem utilizadas nas investigações deste trabalho.

### 1.1 *GRASP*

A metaheurística *GRASP* é descrita no Algoritmo 1, sua estratégia construtiva em Algoritmo 2, e sua estratégia de busca local em Algoritmo 3, todos descritos no Apêndice A.2.

Ambas usam a estratégia construtiva padrão (Algoritmo 2) e o parâmetro $\alpha$ com valor 0.2.

Elas diferem na estratégia de busca local, entretanto. A primeira variação, chamada *GRASP Best*, utiliza *Best Improving*, em que toda a vizinhança é percorrida e a melhor opção selecionada. A segunda variação, chamada *GRASP First*, utiliza *First Improving*, em que a busca na vizinhança retorna a primeira solução encontrada que seja melhor do que a atual.

Em ambas, *Best Improving*e *First Improving*, a vizinhança é definida como o conjunto de soluções obtidas a partir da solução atual que tenham:

1. 1 elemento a mais - adição;

2. 1 elemento a menos - remoção;

3. 1 elemento trocado (equivalente a uma adição e uma remoção) - troca;

### 1.1.1 *GRASP Best*

1. Estratégia construtiva: **padrão** com $\alpha$ igual a **0.2**
2. Estratégia de busca local: **best improving**

### 1.1.2 *GRASP First*

1. Estratégia construtiva: **padrão** com $\alpha$ igual a **0.2**
2. Estratégia de busca local: **first improving**

## 1.2 *Tabu*

A metaheurística *Tabu* é descrita no Algoritmo 4.

Ambas as variações descritas nessa subseção usam:

1. solução inicial a solução da estratégia construtiva do *GRASP*, Algoritmo 2;
2. busca local *Best Improving*. Ela é similar a *Best Improving*descrita na Subseção 1.1, entretanto ela não considera a adição ou remoção de elementos que estão na lista tabu $T$ (a menos que eles levem a uma solução melhor do que $S^*$);
3. *Tenure Ration*, parâmetro que controla o tamanho da lista tabu $T$, igual a 0.4, o que significa que $T$ pode ter tamanho até 40% do tamanho da entrada.

A primeira variação, chamada *Tabu Vanilla*, implementa *Tabu* com as características acima. A segunda variação, chamada *Tabu com Intensificação e Diversificação*, inclui estratégias de diversificação e intensificação, descritas nas Subsubseção 1.2.1 e Subsubseção 1.2.2.

### 1.2.1 Estratégia de Intensificação

A estratégia de intensificação aumenta o tamanho da vizinhaça, ao invés de considerar 1 adição, 1 remoção e 1 troca, ela considera:

1. 2 adições e 1 remoção;
2. 2 remoções e 1 adição;
3. 2 adições e 2 remoções;

A intensificação é feita em torno da melhor solução conhecida. Ela é ativada quando passam-se muitas iterações (o critério de parada é definido como um número máximo de iterações, e “muitas iterações” significa 20% número máximo de iterações) sem melhora na solução ótima e sem sua ativação.

### 1.2.2 Estratégia de Diversificação

A estratégia de diversificação constroi uma nova solução, utilizando a estratégia construtiva do GRASP, e recomeça a busca nesse outro local do espaço de solução. Além disso, antes de começar a busca, faz-se uma busca intensiva (usando a estratégia de intensificação) em torno dessa nova solução.

Seu critério de ativação é o mesmo da Estratégia de Intensificação, excetuando-se que Diversificação é ativada apenas quando Intensificação não é (no programa, há um registro separado para quando cada uma delas foi ativada pela última vez).

Assim, quando se passaram muitas iterações sem melhora na solução ótima, primeiro tenta-se intensificação. Caso essa falhe, executa-se a diversificação.

#### 1.2.3 *Tabu Vanilla*

1. Solução inicial: saída da estratégia construtiva do *GRASP*
2. *Tenure Ration*: **0.4**
3. Estratégia de busca local: ***Best Improving***

#### 1.2.4 *Tabu com Intensificação e Diversificação*

1. Solução inicial: saída da estratégia construtiva do *GRASP*
2. *Tenure Ration*: **0.4**
3. Estratégia de busca local: ***Best Improving***
4. Adição das estratégias: **Intensificação e Diversificação**

### 1.3 *GA*

A metaheurística *Tabu* é descrita no Algoritmo 5.

Ambas as variações descritas nessa subseção usam:

1. população inicial aleatória;
2. tamanho da população igual a 100;
3. seleção para reprodução em torneio: dois cromossomos são escolhidos aleatoriamente e o melhor dos dois (em relação à função de aptidão) é escolhido para continuar enquanto o outro é descartado.
4. reprodução com *two point crossover (2X)*;
5. Critério de parada: 1000 gerações;

#### 1.3.1 *GA Vanilla*

A primeira variação, chamada *GA Vanilla*, implementa *GA* conforme descrito na Subseção 1.3 com as seguintes adições/modificações:

1. taxa de mutação igual a 0.5%;
2. seleção da nova população: descendentes, substituindo-se o pior deles pelo melhor gene conhecido

#### 1.3.2 *GA Steady*

A segunda variação, chamada *GA Steady*, implementa *GA* conforme descrito na Subseção 1.3 com as seguintes adições/modificações:

1. taxa de mutação igual a 1%;
2. seleção da nova população: os 100 melhores genes entre mães e filhos (conhecida como *Steady-State* $\lambda + \mu$);

## 2 Time-To-Target Plot (TTT Plot)

### 2.1 Entendedo o TTT Plot

Considere um problema $p$, um algoritmo de metaheurística $A$, e um valor alvo $v$. Seja $t$ a variável randomica que representa o tempo que $A$ leva para encontrar uma solução com valor pelo menos $v$[1]:

$$t = \text{TempoExecução}(A(p) \geqslant v) \tag{1}$$

$t$ é chamada *Tempo para atingir valor alvo da solução*[2].

Em [4], os autores conjecturam que a distribuição de $t$ é uma função exponencial deslocada:

$$P(t) = exp\left(\frac{-(t-\mu)}{\lambda}\right) \quad \lambda \in \mathbb{R}^+, \mu \in \mathbb{R} \tag{2}$$

Sem TTT Plot, como compararíamos o desempenho dos algoritmos de metaheurística? Possivelmente com tabelas com alguns resultados e alguma análise estatística menos desenvolvida.

O TTT Plot fornece um modelo para o comportamento esperado dos algoritmos. Isso permite que comparemos os seus desempenhos de forma mais robusta já que ele requer que:

1. juntemos informação suficiente para criar o modelo;
2. criemos o modelo;

Além do modelo exponencial, o TTT Plot inclui um gráfico *Q-Q plot*, que permite analisarmos a validade do modelo exponencial para um certo conjunto de dados.

### 2.2 Escolha dos Problemas e Valores Alvo

Para a análise desse problema, escolheu-se as instâncias do MAX-KQBF e valores alvo da Tabela 1 abaixo (a nomeclatura dos problemas segue a Tabela 2).

| **Problema** | **Valor Alvo** |
|---|---|
| kqbf040 | 275 |
| kqbf060 | 446 |
| kqbf080 | 729 |

Tabela 1: Instâncias do MAX-KQBF selecionadas e seus respectivos valores alvo.

O valor alvo de cada instância foi selecionado como o limite inferior do intervalo de otimalidade da Tabela 2. Tais valores foram escolhidos por não serem baixos, o que comprometeria a análise [4], mas também não são altos demais, o que comprometeria o tempo de execução.

Selecionou-se as instâncias *kqbf040*, *kqbf060*, *kqbf080* pois elas apresentam o grau de dificuldade requerido mas não requerem tanto tempo de execução (o que inviabilizaria a execução dos testes já que o tempo requerido seria muito grande).

### 2.3 Validação dos TTT Plot

Os TTT Plot para todos os algoritmos analisados nesse trabalho estão no Apêndice C.

[1] Aqui supõe-se um problema de maximização, mas funciona de forma similar para minimização.

[2] *Time-To-Target Solution Value* em inglês.

### 2.3.1 *GRASP Best*

Figuras: 3, 9, 15.

Observando os *Q-Q plot* nas Figuras 9, 15, vemos que o modelo proposto descreve bem o comportamento do algoritmo.

Porém, o modelo da Figura 3 não. Na verdade, observamos dois conjuntos bem claros de tempo de execução: os próximos de zero e os em torno de 3.5 segundos. Esses dois conjuntos correspondem aos casos em que o algoritmo atingiu e os casos em que ele não atingiu o valor alvo, respectivamente[3]. Para os últimos, o tempo de execução tende a ser constante, que é o tempo necessário para a execução de todas as iterações.

### 2.3.2 *GRASP First*

Figuras: 4, 10, 16. Observando-as, vemos que o modelo proposto descreve bem o comportamento do algoritmo.

### 2.3.3 *Tabu Vanilla*

Figuras: 5, 11, 17. Observando-as, vemos que nenhum modelo proposto descreve bem o comportamento do algoritmo.

Para os casos da Figura 5, observando os logs de execução, vê-se dois comportamentos bem distintos:

1. execuções em que o valor alvo é atingido em poucas iterações (menos de 10). Tempo de execução em torno de alguns poucos milisegundos ($\approx 10ms$).

2. execuções em que são necessárias pelo menos 300 iterações para atingir o valor alvo. Tempo de execução em torno de décimos de segundo ($\approx 400ms = 0.4s$).

Mas isso não é suficiente para explicar todos os comportamentos observados. Houveram casos em que, mesmo com poucas iterações, o tempo de execução foi muito grande, como é em alguns o caso das execuções da Figura 11. Para esses, não encontrou-se nenhuma explicação.

### 2.3.4 *Tabu com Intensificação e Diversificação*

Figuras: 6, 12, 18. Observando-as, vemos que nenhum modelo proposto descreve bem o comportamento do algoritmo. O comportamento observado é similar ao descrito na Subsubseção 2.3.3.

### 2.3.5 *GA Vanilla*

Figuras: 2, 8, 14. Observando-as, vemos que, à exceção de alguns ponto fora da curva, o modelo proposto descreve bem o comportamento do algoritmo.

### 2.3.6 *GA Steady*

Figuras: 1, 7, 13. Observando-as, notamos que o modelo não parece ser tão adequado para essas instâncias. Nos gráficos de Distribuição de Probabilidade Cumulativa, parece haver uma região de plato, em que um aumento no tempo computacional não leva a uma maior probabilidade de encontrar uma solução boa.

[3] Observando-se os logs isso fica bem claro.

Observou-se que a variação de tempo de execução deve-se ao número de iterações necessárias para a convergência do algoritmo: enquanto que alguns casos precisam de algumas poucas dezenas de iterações, outros precisam de algumas centenas. Isso pode ser explicado por uma população inicial ruim, ou talvez perda de diversidade. A verificação de que é algum desses fatores, ou nenhum deles, que causa o comportamente esperado está, entretanto, fora do escopo do presente trabalho.

## Referências


[1] M. G. Resende and C. C. Ribeiro, "Greedy randomized adaptive search procedures: advances and extensions," in *Handbook of metaheuristics*, pp. 169–220, Springer, 2019.

[2] M. Gendreau and J.-Y. Potvin, "Tabu search," in *Handbook of Metaheuristics* (M. Gendreau and J.-Y. Potvin, eds.), vol. 146 of *International Series in Operations Research & Management Science*, ch. 2, pp. 41–56, Springer Science+Business Media, 2010.

[3] C. R. Reeves, "Genetic algorithms," in *Handbook of metaheuristics*, pp. 109–139, Springer, 2010.

[4] R. M. Aiex, M. G. Resende, and C. C. Ribeiro, "Ttt plots: a perl program to create time-to-target plots," *Optimization Letters*, vol. 1, no. 4, pp. 355–366, 2007.

[5] G. Kochenberger, J.-K. Hao, F. Glover, M. Lewis, Z. Lü, H. Wang, and Y. Wang, "The unconstrained binary quadratic programming problem: a survey," *Journal of combinatorial optimization*, vol. 28, no. 1, pp. 58–81, 2014.

[6] L. G. T. da Silva, "Mo824a-combinatorial-optimization," 2022. Disponível em `https://github.com/lucasguesserts/MO824A-combinatorial-optimization`.


## Apêndice A *MAX-QBF com mochila* (MAX-KQBF)

**Definição 1** (Conjunto Binário)**.** $\mathbb{B} = \{0, 1\}$

**Definição 2** (Função Binária Quadrática (QBF))**.** É uma função $f : \mathbb{B}^n \to \mathbb{Z}$ da forma:

$$f(x) = \sum_{j=1}^{n} x_i \cdot a_{i,j} \cdot x_j = x^T \cdot A \cdot x$$

em que $a_{i,j} \in \mathbb{Z}$, $\forall i, j \in \{1, \cdots, n\}$ e $A$ é a matriz $n$ por $n$ induzida pelos $a_{i,j}$.

**Definição 3** (Problema de Maximização de uma Função Binária Quadrática (MAX-QBF))**.** Dada uma QBF $f$, um MAX-QBF é um problema da forma:

$$\max_x f(x)$$

**Fato 1.** MAX-QBF é NP-difícil [5]

**Definição 4** (Maximum knapsack quadractic binary function (MAX-KQBF))**.** Dada uma QBF $f$, um vetor $w \in \mathbb{Z}^n$, e um valor $W \in \mathbb{Z}$, um MAX-KQBF é um problema da forma:

$$\begin{aligned} \max \quad & f(x) \\ \text{subjected to} \quad & w^T x \leq W \\ & x \in \mathbb{B}^n \end{aligned}$$

### A.1 Instâncias

Foram utilizadas as instâncias com características conforme a Tabela 2.

| Instância | Num. Variáveis | Num. Possibilidades | Intervalo de Otimalidade |
|---|---|---|---|
| kqbf020 | 20 | 1.0e+06 | [80, 151] |
| kqbf040 | 40 | 1.1e+12 | [275, 429] |
| kqbf060 | 60 | 1.2e+18 | [446, 576] |
| kqbf080 | 80 | 1.2e+24 | [729, 1000] |
| kqbf100 | 100 | 1.3e+30 | [851, 1539] |
| kqbf200 | 200 | 1.6e+60 | [3597, 5826] |
| kqbf400 | 400 | 2.6e+120 | [10846, 16625] |

Tabela 2: Instâncias do problema MAX-KQBF. Os dados completos estão disponíveis em [6].

### A.2 *GRASP*

**Algorithm 1** *GRASP*

$S_{\text{best}} \leftarrow \varnothing$
**for** $k = 1, \ldots, N_{it}$ **do**
    $S \leftarrow$ Greedy-Randomized-Construction()
    $S \leftarrow$ Local-Search($S$)
    $S_{\text{best}} \leftarrow \max\{S, S_{\text{best}}\}$
**return** $S_{\text{best}}$

**Algorithm 2** Greedy-Randomized-Construction($\alpha$)

$S \leftarrow \varnothing$
$C \leftarrow E$ ▷ Candidates list
**for** $e \in C$ **do**
    $c(e) \leftarrow$ Incremental-Cost($e, S$) ▷ Increment in the cost by adding $e$ to $S$
**while** $C \neq \varnothing$ **do**
    $c_{min} = \min\{c(e) : e \in C\}$
    $c_{max} = \max\{c(e) : e \in C\}$
    $R \leftarrow \{e \in C : c(e) \leqslant c_{min} + \alpha(c_{max} - c_{min})\}$ ▷ Restricted candidates list
    $s \leftarrow$ Select-Random-Element($R$)
    $S \leftarrow S \cup \{s\}$
    Update $C$
    Update $c(e)$
**return** $S$

**Algorithm 3** Loca-Search($S$)

```
while S is not local optimal do
    S ← argmax_{S' ∈ N(S)} {f(S')}        ▷ N(S) is the neighborhood of S        ▷ f is the goal function
return S
```

### A.3 *Tabu*

**Algorithm 4** *Tabu* ($S_0$)

```
S ← S_0                        ▷ S_0 is the initial solution        ▷ S is the current solution
S* ← S                         ▷ S* is the current best solution
f* ← f(S*)                     ▷ f is the goal function
T ← ∅                          ▷ T is the tabu list
while not Termination-Criteria-Satisfied do
    S ← argmax_{S' ∈ N(S,T)} {f(S')}     ▷ N(S,T) is the neighborhood of S limited by T
    if f(S) > f* then
        S* ← S
        f* ← f(S)
    Update T                   ▷ record moves and delete old entries
return S*
```

### A.4 *GA*

**Algorithm 5** *GA*

```
escolher a população inicial de cromossomos
while condição de parada não é satisfeita do
    while Não há descendentes suficientes do
        if condição de cruzamento é satisfeita then
            Selecionar cromossomos mãe
            Selecionar parâmetros de cruzamento
            Executar cruzamento
        if condição de mutação é satisfeita then
            Selecionar pontos de mutação
            Executar mutação
        Calcular adaptação (fitness) dos descendentes
    Selecionar nova população
return Melhor cromossomo da população
```

## Apêndice B Implementação e execução dos experimentos

O programs foram executados num ideapad S145 81S90005BR: Lenovo IdeaPad S145 Notebook Intel Core i5-8265U (6MB Cache, 1.6GHz, 8 cores), 8GB DDR4-SDRAM, 460 GB SSD, Intel UHD Graphics 620 no ambiente:

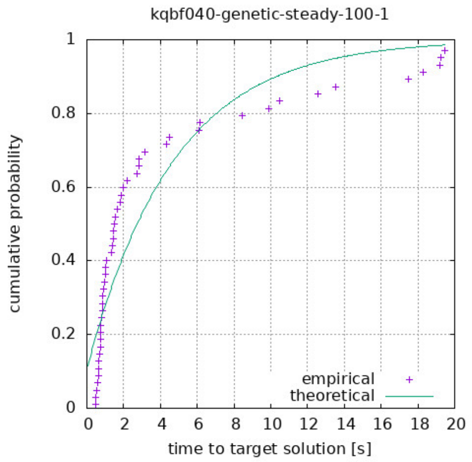
1. sistema operacional: Fedora 35

2. Java versão 17

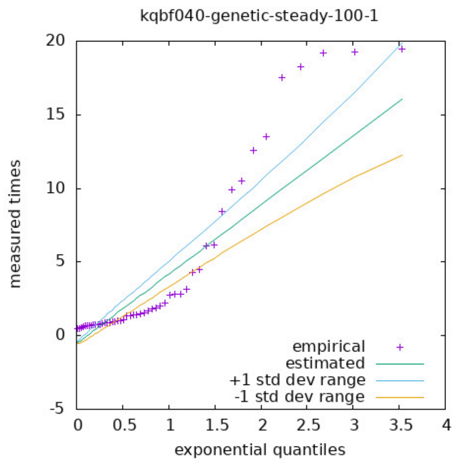
3. Gradle versão 7.4

O desenvolvimento da solução do problema foi feito em Java, baseado nos frameworks disponibilizados pelos professores. O código pode ser encontrado em [6].

# Apêndice C Time-To-Target Plot (TTT Plot)

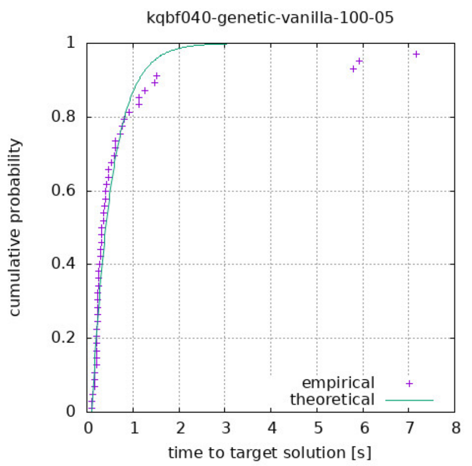



(a) Cumulative Probability Distribution - Algorithm GA steady - Problem kqbf040

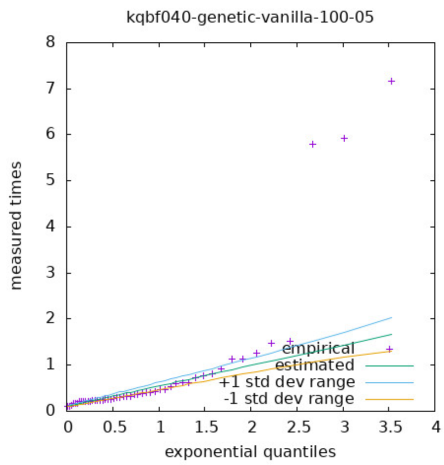



(b) Q-Q plot - Algorithm GA steady - Problem kqbf040

Figura 1: Algorithm GA steady - Problem kqbf040.

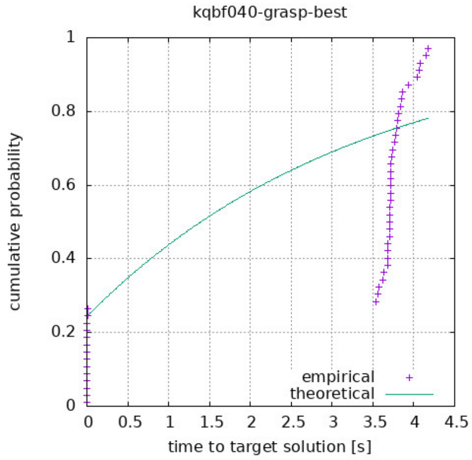



(a) Cumulative Probability Distribution - Algorithm GA vanilla - Problem kqbf040

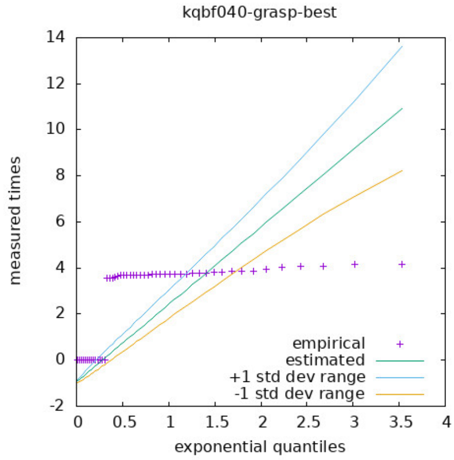



(b) Q-Q plot - Algorithm GA vanilla - Problem kqbf040

Figura 2: Algorithm GA vanilla - Problem kqbf040.

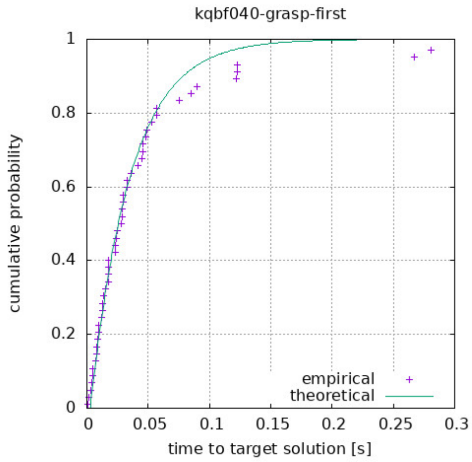



(a) Cumulative Probability Distribution - Algorithm GRASP Best - Problem kqbf040

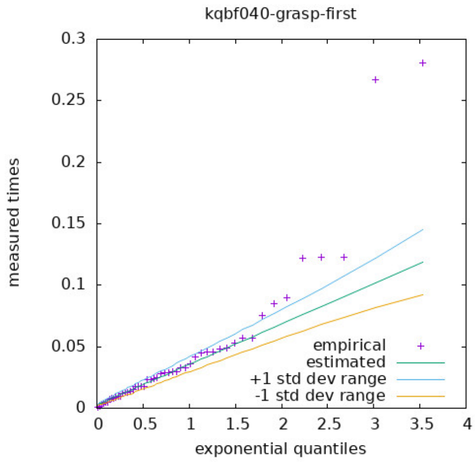



(b) Q-Q plot - Algorithm GRASP Best - Problem kqbf040

Figura 3: Algorithm GRASP Best - Problem kqbf040.

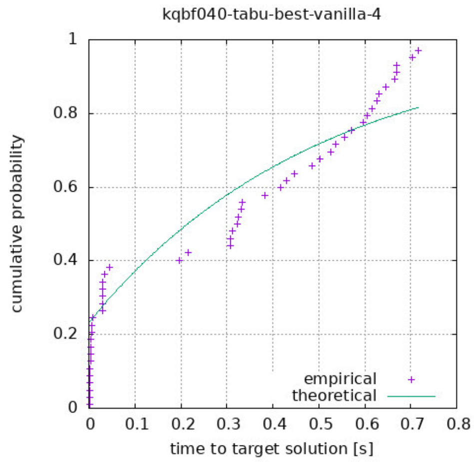



(a) Cumulative Probability Distribution - Algorithm GRASP First - Problem kqbf040

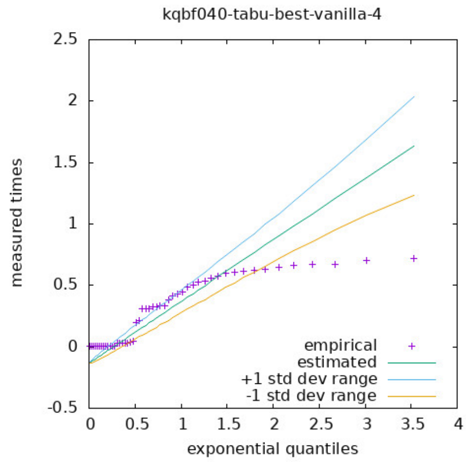



(b) Q-Q plot - Algorithm GRASP First - Problem kqbf040

Figura 4: Algorithm GRASP First - Problem kqbf040.

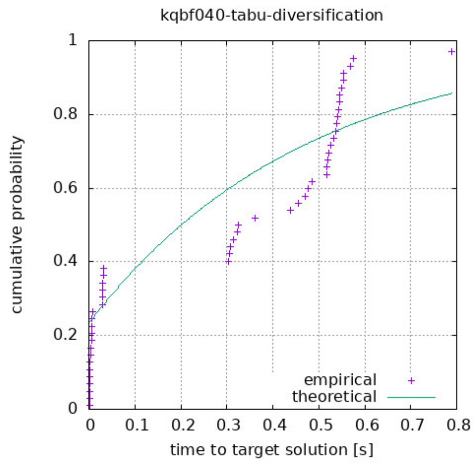



(a) Cumulative Probability Distribution - Algorithm Tabu vanilla - Problem kqbf040

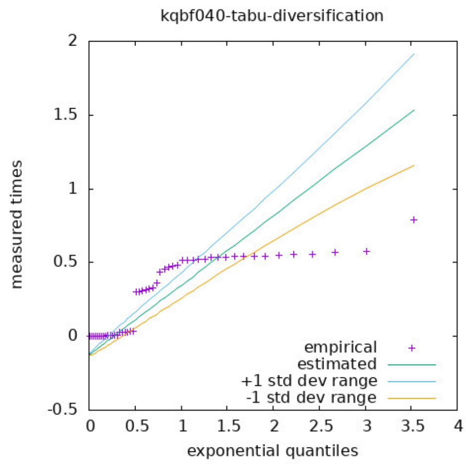



(b) Q-Q plot - Algorithm Tabu vanilla - Problem kqbf040

Figura 5: Algorithm Tabu vanilla - Problem kqbf040.

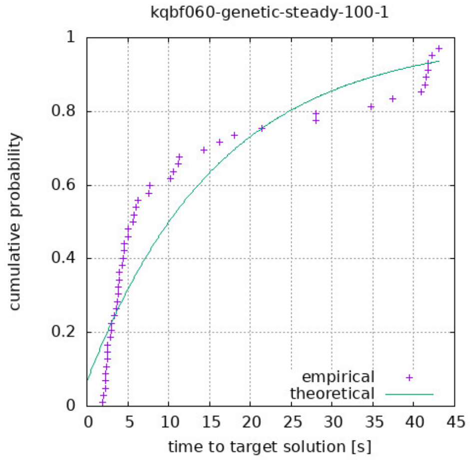



(a) Cumulative Probability Distribution - Algorithm Tabu com Intensificação e Diversificação - Problem kqbf040

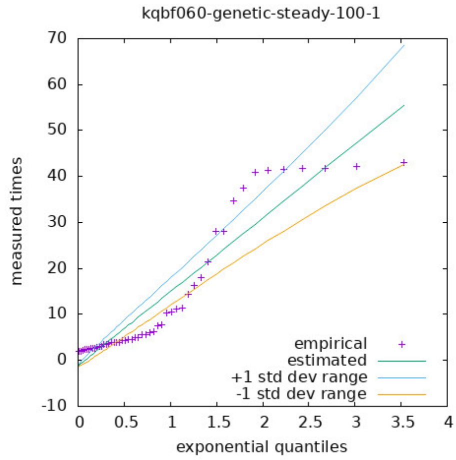



(b) Q-Q plot - Algorithm Tabu com Intensificação e Diversificação - Problem kqbf040

Figura 6: Algorithm Tabu com Intensificação e Diversificação - Problem kqbf040.

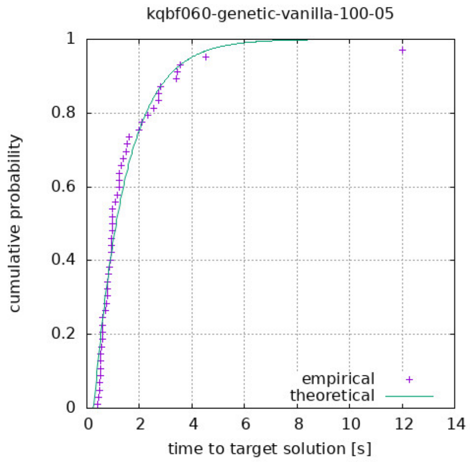



(a) Cumulative Probability Distribution - Algorithm GA steady - Problem kqbf060

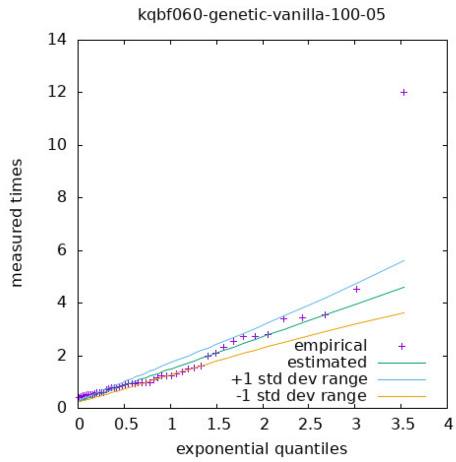



(b) Q-Q plot - Algorithm GA steady - Problem kqbf060

Figura 7: Algorithm GA steady - Problem kqbf060.

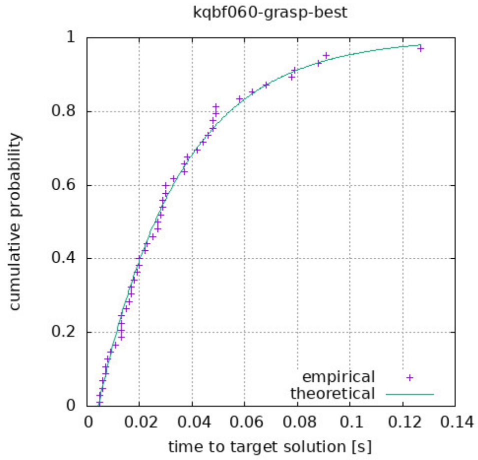



(a) Cumulative Probability Distribution - Algorithm GA vanilla - Problem kqbf060

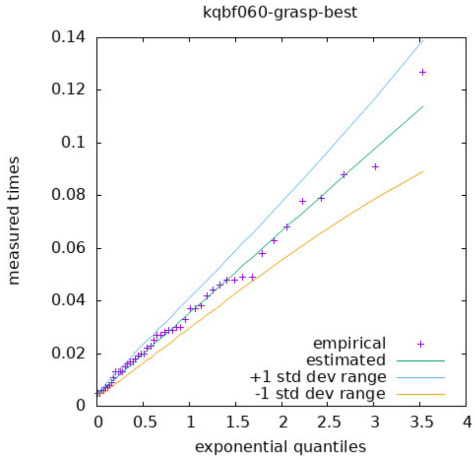



(b) Q-Q plot - Algorithm GA vanilla - Problem kqbf060

Figura 8: Algorithm GA vanilla - Problem kqbf060.

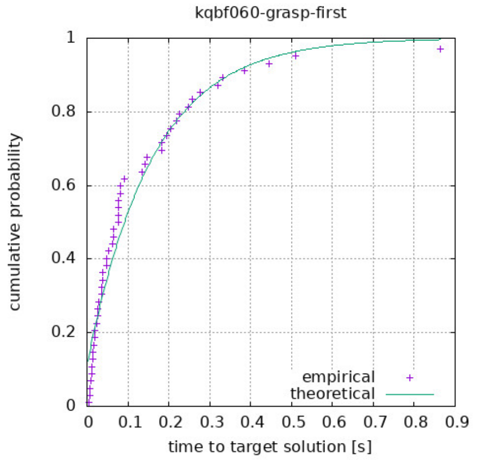



(a) Cumulative Probability Distribution - Algorithm GRASP Best - Problem kqbf060

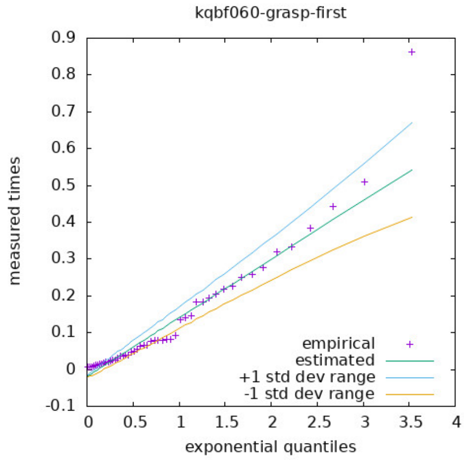



(b) Q-Q plot - Algorithm GRASP Best - Problem kqbf060

Figura 9: Algorithm GRASP Best - Problem kqbf060.

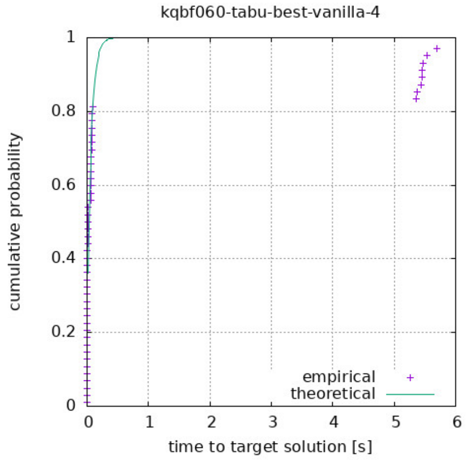



(a) Cumulative Probability Distribution - Algorithm GRASP First - Problem kqbf060

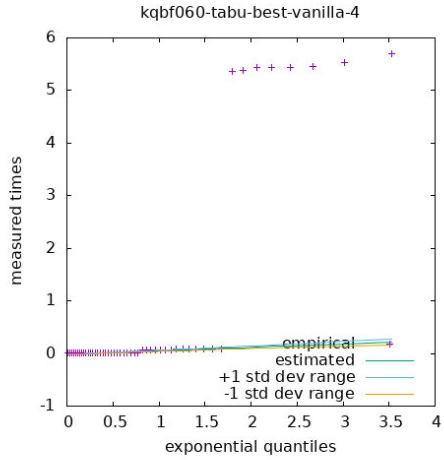



(b) Q-Q plot - Algorithm GRASP First - Problem kqbf060

Figura 10: Algorithm GRASP First - Problem kqbf060.

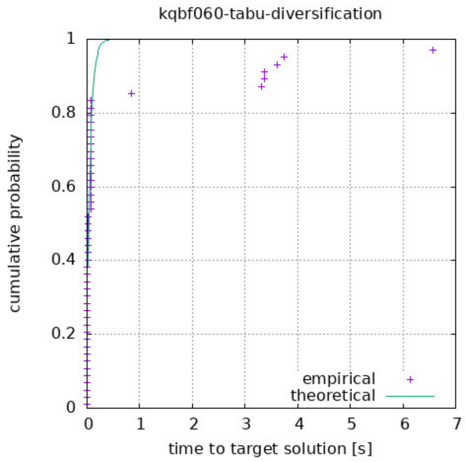



(a) Cumulative Probability Distribution - Algorithm Tabu vanilla - Problem kqbf060

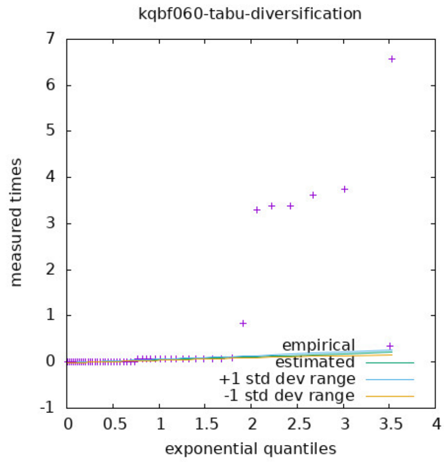



(b) Q-Q plot - Algorithm Tabu vanilla - Problem kqbf060

Figura 11: Algorithm Tabu vanilla - Problem kqbf060.

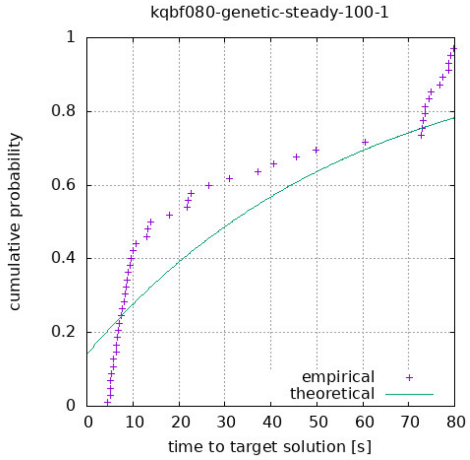



(a) Cumulative Probability Distribution - Algorithm Tabu com Intensificação e Diversificação - Problem kqbf060

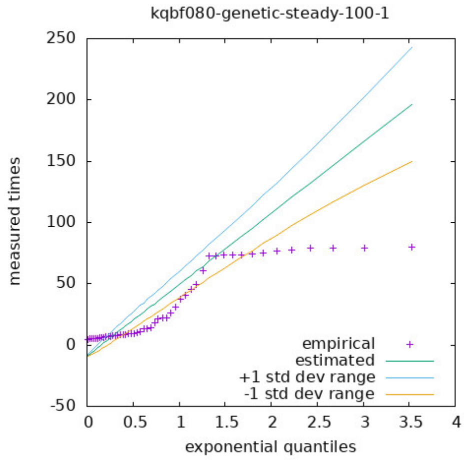



(b) Q-Q plot - Algorithm Tabu com Intensificação e Diversificação - Problem kqbf060

Figura 12: Algorithm Tabu com Intensificação e Diversificação - Problem kqbf060.

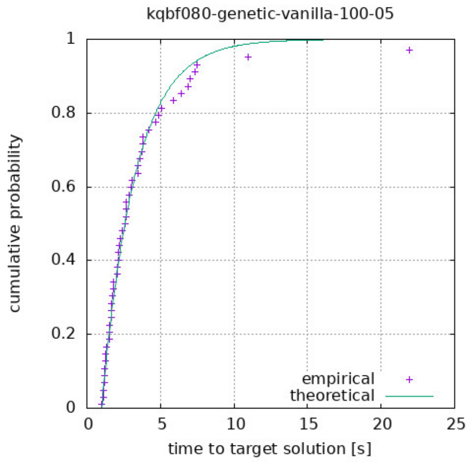



(a) Cumulative Probability Distribution - Algorithm GA steady - Problem kqbf080

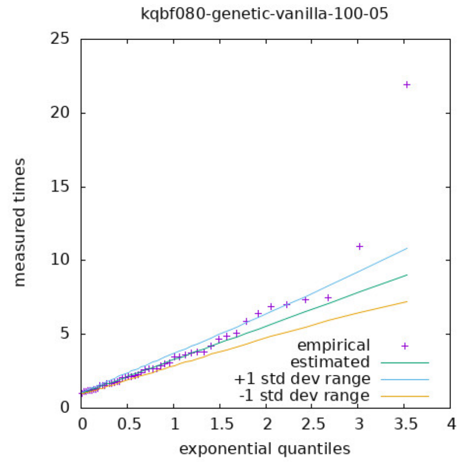



(b) Q-Q plot - Algorithm GA steady - Problem kqbf080

Figura 13: Algorithm GA steady - Problem kqbf080.

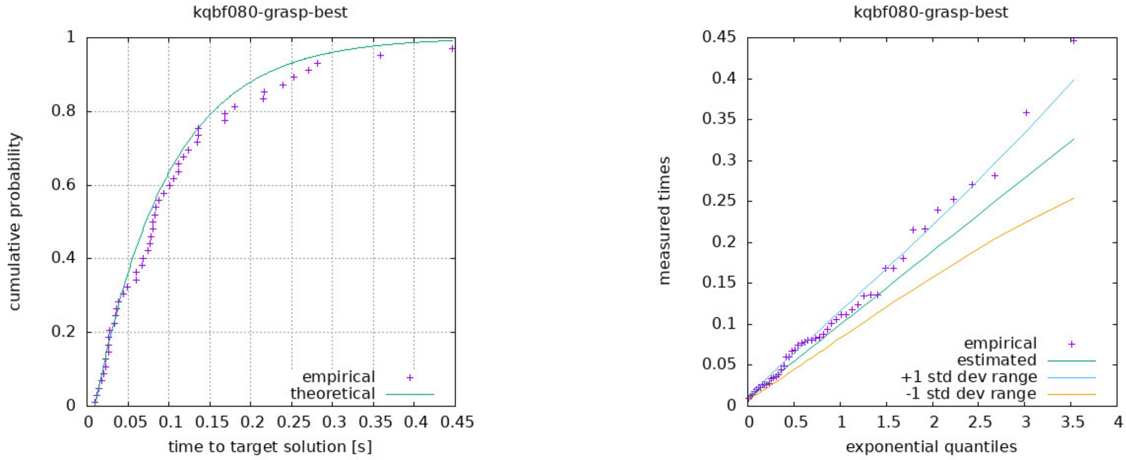



(a) Cumulative Probability Distribution - Algorithm GA vanilla - Problem kqbf080




(b) Q-Q plot - Algorithm GA vanilla - Problem kqbf080

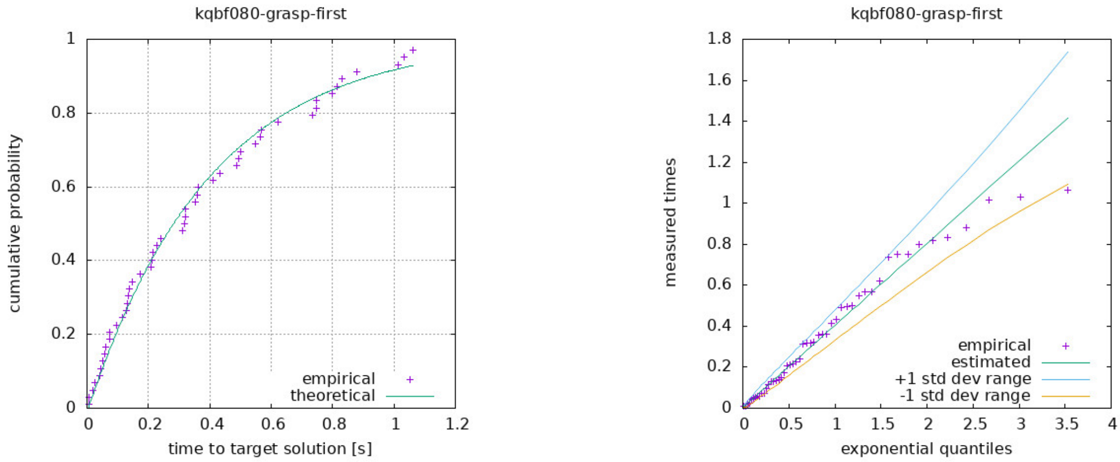
Figura 14: Algorithm GA vanilla - Problem kqbf080.




(a) Cumulative Probability Distribution - Algorithm GRASP Best - Problem kqbf080

(b) Q-Q plot - Algorithm GRASP Best - Problem kqbf080

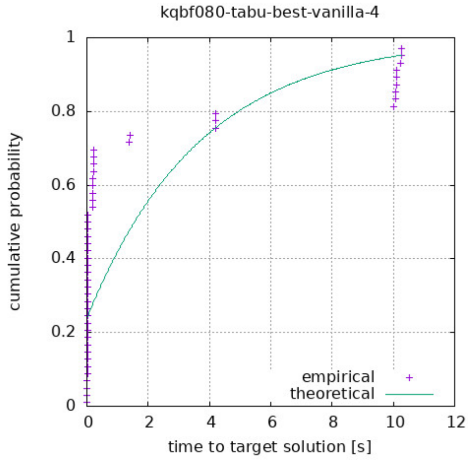
Figura 15: Algorithm GRASP Best - Problem kqbf080.



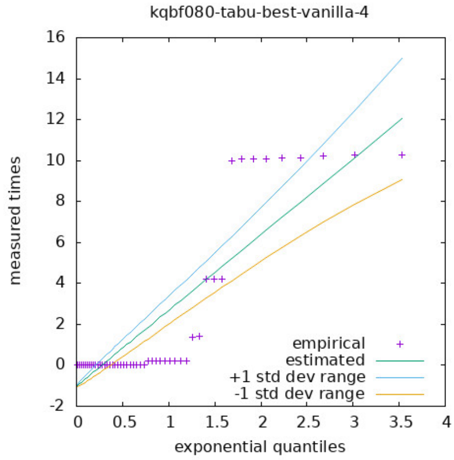

(a) Cumulative Probability Distribution - Algorithm GRASP First - Problem kqbf080

(b) Q-Q plot - Algorithm GRASP First - Problem kqbf080

Figura 16: Algorithm GRASP First - Problem kqbf080.

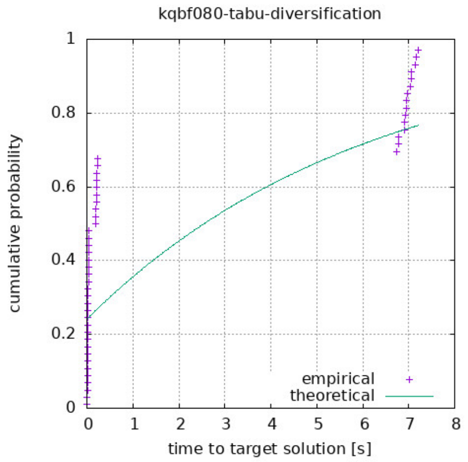



(a) Cumulative Probability Distribution - Algorithm Tabu vanilla - Problem kqbf080

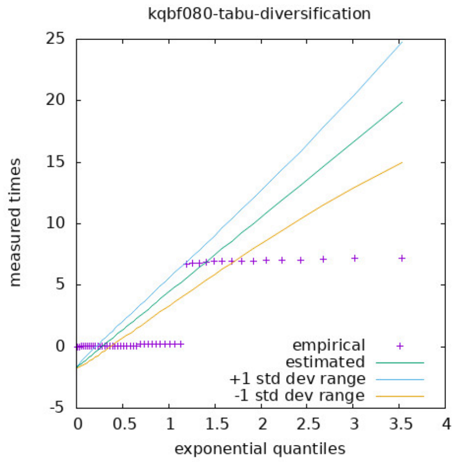



(b) Q-Q plot - Algorithm Tabu vanilla - Problem kqbf080

Figura 17: Algorithm Tabu vanilla - Problem kqbf080.




(a) Cumulative Probability Distribution - Algorithm Tabu com Intensificação e Diversificação - Problem kqbf080




(b) Q-Q plot - Algorithm Tabu com Intensificação e Diversificação - Problem kqbf080

Figura 18: Algorithm Tabu com Intensificação e Diversificação - Problem kqbf080.