

DECOMPOSIÇÕES LAGRANGEANAS PARA O PROBLEMA DE PROGRAMAÇÃO QUADRÁTICA BINÁRIA IRRESTRITA

Geraldo Regis Mauri*

Lab. Associado de Computação e Matemática Aplicada
Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais (INPE)
São José dos Campos – SP
Dep. de Engenharia Rural / Centro de Ciências Agrárias
Universidade Federal do Espírito Santo (UFES)
Alegre – ES
mauri@cca.ufes.br

Luiz Antonio Nogueira Lorena

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

* *Corresponding author* / autor para quem as correspondências devem ser encaminhadas

Recebido em 04/2008; aceito em 12/2008 após 1 revisão
Received April 2008; accepted December 2008 after one revision

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 alternativas de decomposição Lagrangeana para obtenção de limitantes para o PQ . Os métodos propostos tratam uma versão linear inteira mista (PQL) do PQ que tem restrições representadas através de um grafo. Esse grafo é particionado em *clusters* de vértices formando um problema dual cuja solução é dada por um algoritmo de subgradiente. A cada iteração desse método, os subproblemas formados pelos subgrafos gerados são resolvidos pelo CPLEX. Experimentos computacionais tratam um conjunto de dados formado por diversas instâncias de difícil solução e diferentes características. Os resultados mostram a eficiência dos métodos propostos em relação a métodos tradicionais de relaxação Lagrangeana e outros métodos encontrados na literatura.

Palavras-chave: programação quadrática; decomposição Lagrangeana; limitantes.

Abstract

The Unconstrained Binary Quadratic Programming Problem – PQ is a classical non-linear problem of optimizing a quadratic objective by suitable choice of binary decisions variables. This paper proposes new alternatives of Lagrangean decomposition to find bounds for PQ . The presented methods treat a mixed binary linear version (PQL) of PQ with constraints represented by a graph. This graph is partitioned in clusters of vertices forming a dual problem that is solved by a subgradient algorithm. The subproblems formed by the generated subgraphs are solved by the CPLEX. Computational experiments consider with a data set formed by several difficult instances with different characteristics. The results show the efficiency of the proposed methods over traditional Lagrangean relaxations and other methods found in literature.

Keywords: quadratic programming; Lagrangean decomposition; bounds.

1. Introdução

O Problema de Programação Quadrática Binária Irrestrita é um dos problemas clássicos em 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 & 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 & Elloumi, 2007) e apresenta uma grande quantidade de aplicações em diversas áreas, como por exemplo: biologia molecular (Phillips & Rosen, 1994); biologia computacional (Forrester & Greenberg, 2008); neurociência (Pardalos *et al.*, 2004); planejamento de investimentos e análise financeira (Laughunn, 1970; McBride & Yormark, 1980); e alguns problemas do tipo CAD (Krarup & Pruzan, 1978). Além disso, o PQ ainda aborda inúmeros problemas modelados através de grafos, como clique máximo, máximo conjunto independente, e outros (Pardalos & Phillips, 1990; Pardalos & Rodgers, 1992; Pardalos & Xue, 1994).

Vários métodos exatos e heurísticos têm sido propostos para resolver o PQ , entretanto, os métodos exatos existentes (Billionnet & Sutter, 1994; Pardalos & Rodgers, 1990a; Pardalos & Rodgers, 1990b) são restritos a problemas com até 200 variáveis. Já os métodos heurísticos (Beasley, 1998; Glover *et al.*, 1998; Pardalos & 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 & Dearing, 1994; Chardaire & 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.

Outra prática comum para resolver o PQ é a linearização do seu modelo original (Adams *et al.*, 2004; Glover & Woolsey, 1974; Hansen & 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 & Dearing, 1994; Boros *et al.*, 1990; Boros *et al.*, 1992; Hammer *et al.*, 1984).

Este trabalho propõe novos métodos para obtenção de limitantes para o PQ . São apresentadas três abordagens baseadas na decomposição Lagrangeana para tratar uma versão linear inteira mista (PQL) do PQ . O PQL é representado através de um grafo que é particionado através da heurística METIS (Karypis & Kumar, 1998). A partir de então, é formado um problema dual cuja solução é dada por um algoritmo de subgradiente. A cada iteração desse método, os subproblemas formados pelos subgrafos gerados são resolvidos pelo CPLEX.

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, e a Seção 4 descreve os limitantes propostos. Os resultados computacionais são apresentados na Seção 5, e as conclusões são resumidas na Seção 6.

2. Revisão bibliográfica

Chardaire & 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 pseudolineares. O método proposto é uma relaxação dual do problema quadrático original. A divisão do problema em *clusters* é realizada de forma aleatória. 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.

Uma abordagem trivial para obtenção de limitantes para o Problema Quadrático da Mochila – PQM é apresentada por Billionnet & Calmels (1996). 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 ideia 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 & Sutter (1995), os autores mostram que quanto maior o tamanho dos subproblemas melhor é o limitante, entretanto, o tempo aumenta exponencialmente.

Adams & 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 & Woolsey (1974). Várias estratégias de linearização do PQ são apresentadas e discutidas em Adams *et al.* (2004) e Hansen & Meyer (2008).

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 & 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 & Rodgers (1990b) apresentam uma versão paralelizada de um *branch-and-bound* capaz de resolver problemas com até 100 variáveis. Billionnet & 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.

Uma heurística baseada na Busca Tabu é proposta por Glover *et al.* (1998). Essa heurística 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.

Recentemente, Palubeckis (2004) apresenta cinco diferentes estratégias baseadas na Busca Tabu para resolver o PQ. O autor apresenta diferentes mecanismos que juntamente com a Busca Tabu proposta por Beasley (1998) apresentam as melhores soluções conhecidas para o conjunto de instâncias utilizado. São apresentados resultados para instâncias com até 6000 variáveis em tempos computacionais inferiores aos demais métodos encontrados na literatura.

Pardalos & 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

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

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

A matriz \mathbf{Q} pode ser considerada simétrica sem perder a generalidade do problema, pois caso essa matriz não seja simétrica, pode-se utilizar a relação $\mathbf{Q} = (\mathbf{Q} + \mathbf{Q}') / 2$ (Billionnet & Elloumi, 2007). Assim, de forma análoga a apresentada por Adams & Dearing (1994), o PQ 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 $P = \{(i,j): i < j, q_{ij} > 0\}$.

Como apresentado em Adams & Dearing (1994), pode-se aplicar a técnica de linearização de Glover & Woolsey (1974) em (2), substituindo os termos quadráticos $x_i x_j$ pela variável contínua w_{ij} e por restrições que garantam que $w_{ij} = x_i x_j$. Logo, tem-se uma versão linear inteira mista de PQ (3-8). 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 a

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

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

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

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

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

4. Decomposições Lagrangeanas

A decomposição Lagrangeana é um caso especial de relaxação Lagrangeana que consiste em dividir o problema original em vários subproblemas e criar uma cópia das variáveis de decisão em cada um dos subproblemas gerados. Essas “cópias” são utilizadas nas restrições dos subproblemas, e restrições que garantem a igualdade entre as variáveis originais e suas cópias são relaxadas no sentido Lagrangeano (Chardaire & Sutter, 1995).

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 $V_i \cap V_j = \emptyset$ ($\forall i, j = 1, \dots, n; i \neq j$), $G_i = (V_i, A_i)$, $i = 1, \dots, n$, e $X_i = V - V_i$, $i = 1, \dots, n$. A Figura 1(a) apresenta um exemplo de grafo gerado a partir do modelo PQL. O particionamento desse grafo em 3 clusters ($n = 3$) é ilustrado na Figura 1(b).

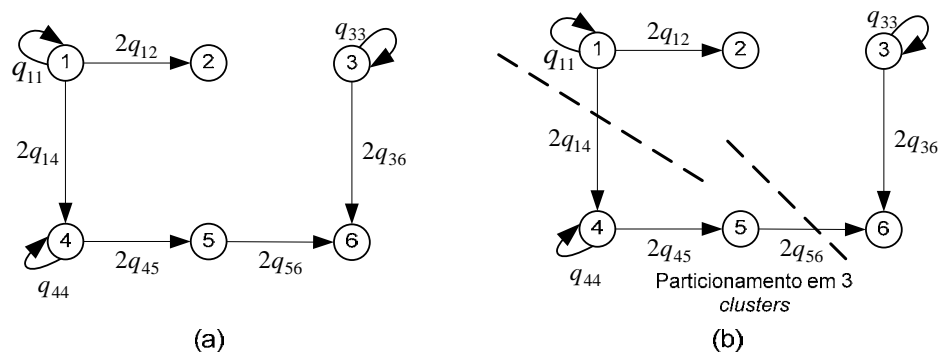


Figura 1 – Exemplo de grafo para representação do PQ.

A seguir, são apresentadas as abordagens propostas neste trabalho, que tratam o PQ através de modelos lineares representados através de grafos, e copiam apenas as variáveis de decisão necessárias em cada subproblema. Essas são as principais características que diferenciam as decomposições propostas em relação às já existentes na literatura para problemas quadráticos (Billionnet *et al.*, 1999 e Chardaire & Sutter, 1995).

4.1 1ª abordagem

A partir do grafo G , o PQL é decomposto em n subproblemas através da cópia das arestas formadas por vértices pertencentes a clusters distintos (arestas *inter-clusters*) e de seus respectivos vértices. Além disso, o valor associado a cada aresta é dividido entre os originais e suas cópias. Logo, o PQL pode ser reescrito da seguinte forma:

$$PQLI^n: v(PQLI^n) = \text{Max} \sum_{k=1}^n \left(\sum_{i \in V_k} \frac{q_{ii}}{c_i} x_i + \sum_{\substack{\exists(i,j), i \in V_k; \\ j \in X_k}} \frac{q_{ij}}{c_j} x_j^k + \sum_{(i,j) \in (P \cup N) \cap A_k} 2q_{ij} w_{ij} + \sum_{\substack{(i,j) \in P \cup N; \\ i \in V_k; j \in X_k}} q_{ij} w_{ij} + \sum_{\substack{(i,j) \in P \cup N; \\ i \in V_k; j \in X_k}} q_{ij} w_{ij}^k \right) \quad (9)$$

Sujeito a

$$w_{ij} \leq x_i \quad (i, j) \in P \cap A_k, k = 1, \dots, n \quad (10)$$

$$w_{ij} \leq x_j \quad (i, j) \in P \cap A_k, k = 1, \dots, n \quad (11)$$

$$x_i + x_j - w_{ij} \leq 1 \quad (i, j) \in N \cap A_k, k = 1, \dots, n \quad (12)$$

$$w_{ij} \geq 0 \quad (i, j) \in N \cap A_k, k = 1, \dots, n \quad (13)$$

$$w_{ij}^k \leq x_i \quad (i, j) \in P, i \in V_k, j \in X_k, k = 1, \dots, n \quad (14)$$

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

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

$$w_{ij}^k \geq 0 \quad (i, j) \in N, i \in V_k, j \in X_k, k = 1, \dots, n \quad (17)$$

$$x_j = x_j^k \quad j \in X_k, k = 1, \dots, n \quad (18)$$

$$w_{ij} = w_{ij}^k \quad (i, j) \in P \cup N, i \in V_k, j \in X_k, k = 1, \dots, n \quad (19)$$

$$x_i \in \{0,1\} \quad i \in V_k, k = 1, \dots, n \quad (20)$$

Nesse modelo, as variáveis x_j^k representam as cópias do vértice j no *cluster* k , e as variáveis w_{ij}^k representam as arestas entre os vértices i e a cópia de j no *cluster* k . c_i indica a quantidade de cópias do vértice i existente nos n *clusters*.

As restrições (10)-(13) tratam apenas as arestas (i,j) cujos vértices são internos ao *cluster* (subgrafo) k (arestas *intra-cluster*). Já as restrições (14)-(17) tratam as arestas (i,j) cujos vértices estão em *clusters* distintos (arestas *inter-clusters* – arestas de ligação). As restrições (18) e (19) são as restrições de cópia, que garantem a igualdade entre as variáveis originais e suas cópias.

A Figura 2 apresenta os *clusters* gerados por esse modelo aplicado ao grafo descrito na Figura 1. Nessa figura, os vértices em cinza representam as cópias necessárias para a decomposição do problema original. As arestas tracejadas são cópias das arestas originais.

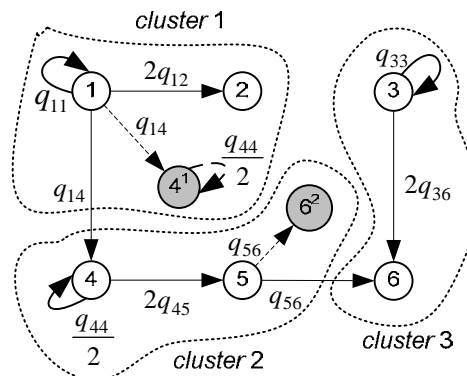


Figura 2 – Grafo gerado na 1ª abordagem.

Relaxando as restrições (18)-(19) no sentido Lagrangeano através de vetores de multiplicadores α e β , respectivamente, o problema $PQLI^n$ (indiretamente o PQ) pode ser dividido em n subproblemas independentes. Logo, para $k = 1, \dots, n$, tem-se:

$$DecL_{\alpha\beta}PQLI_k: \quad v(DecL_{\alpha\beta}PQLI_k) = \mathbf{Max}$$

$$\sum_{i \in V_k} \left(\frac{q_{ii}}{c_i} - \sum_{d \neq k} \alpha_i^d \right) x_i + \sum_{\exists (i,j), i \in V_k; j \in X_k} \left(\frac{q_{jj}}{c_j} + \alpha_j^k \right) x_j^k \quad (21)$$

$$+ \sum_{(i,j) \in (P \cup N) \cap A_k} 2q_{ij} w_{ij} + \sum_{(i,j) \in P \cup N; i \in V_k; j \in X_k} (q_{ij} - \beta_{ij}) w_{ij} + \sum_{(i,j) \in P \cup N; i \in V_k; j \in X_k} (q_{ij} + \beta_{ij}) w_{ij}^k$$

Sujeito a

$$w_{ij} \leq x_i \quad (i, j) \in P \cap A_k \quad (22)$$

$$w_{ij} \leq x_j \quad (i, j) \in P \cap A_k \quad (23)$$

$$x_i + x_j - w_{ij} \leq 1 \quad (i, j) \in N \cap A_k \quad (24)$$

$$w_{ij} \geq 0 \quad (i, j) \in N \cap A_k \quad (25)$$

$$w_{ij}^k \leq x_i \quad (i, j) \in P, i \in V_k, j \in X_k \quad (26)$$

$$w_{ij}^k \leq x_j^k \quad (i, j) \in P, i \in V_k, j \in X_k \quad (27)$$

$$x_i + x_j^k - w_{ij}^k \leq 1 \quad (i, j) \in N, i \in V_k, j \in X_k \quad (28)$$

$$w_{ij} \in \{0,1\} \quad (i, j) \in P \cup N, i \in V_k, j \in X_k \quad (29)$$

$$w_{ij}^k \in \{0,1\} \quad (i, j) \in P \cup N, i \in V_k, j \in X_k \quad (30)$$

$$x_j^k \in \{0,1\} \quad j \in X_k \quad (31)$$

$$x_i \in \{0,1\} \quad i \in V_k \quad (32)$$

As restrições (29), (30) e (31) são inseridas no modelo para manter a viabilidade das soluções dos subproblemas. Por fim, a solução da relaxação do problema $PQLI$ (que é equivalente a PQ) em n subproblemas (*clusters*), é dada pela expressão (33), e o seu dual Lagrangeano é apresentado pela expressão (34).

$$DecL_{\alpha\beta}PQLI^n: \quad v(DecL_{\alpha\beta}PQLI^n) = \sum_{k=1}^n DecL_{\alpha\beta}PQLI_k \quad (33)$$

$$DDecL_{\alpha\beta}PQLI^n: \quad v(DDecL_{\alpha\beta}PQLI^n) = \mathbf{Min} \{ DecL_{\alpha\beta}PQLI^n \}, \quad \alpha, \beta \text{ irrestritos} \quad (34)$$

4.2 2ª abordagem

Seguindo a 1ª abordagem, surge a ideia de substituir as variáveis w_{ij} ($i \in V_k$ e $j \in X_k$) pelas variáveis w_{ij}^k , e não dividir o valor associado às arestas. Logo, o PQL pode ser escrito da seguinte forma:

$$PQL2^n: v(PQL2^n) = \mathbf{Max} \sum_{k=1}^n \left(\sum_{i \in V_k} q_{ii} x_i + \sum_{(i,j) \in (P \cup N) \cap A_k} 2q_{ij} w_{ij} + \sum_{(i,j) \in P \cup N; i \in V_k; j \in X_k} 2q_{ij} w_{ij}^k \right) \quad (35)$$

Sujeito a (10), (11), ..., (18) e (20)

Nesse modelo, não existe a restrição de cópia (19) das variáveis w_{ij} ($i \in V_k$ e $j \in X_k$), pois essas são substituídas diretamente pelas variáveis w_{ij}^k . Relaxando a restrição de cópia (18) no sentido Lagrangeano através do vetor de multiplicadores α , o problema pode ser dividido em n subproblemas independentes, sendo:

$$DecL_\alpha PQL2_k: v(DecL_\alpha PQL2_k) = \mathbf{Max} \sum_{i \in V_k} \left(q_{ii} - \sum_{d \neq k} \alpha_i^d \right) x_i + \sum_{\exists (i,j), i \in V_k; j \in X_k} \alpha_j^k x_j^k + \sum_{(i,j) \in (P \cup N) \cap A_k} 2q_{ij} w_{ij} + \sum_{(i,j) \in P \cup N; i \in V_k; j \in X_k} 2q_{ij} w_{ij}^k \quad (36)$$

Sujeito a (22), (23), ..., (28), (31) e (32)

$$w_{ij}^k \geq 0 \quad (i, j) \in N, i \in V_k, j \in X_k \quad (37)$$

A restrição (37) é inserida no modelo, e nesse caso ela não precisa ser binária para manter a viabilidade das soluções dos subproblemas. A solução da relaxação do problema em n subproblemas (*clusters*), é dada pela expressão (38), e o seu dual Lagrangeano pela expressão (39).

$$DecL_\alpha PQL2^n: v(DecL_\alpha PQL2^n) = \sum_{k=1}^n DecL_\alpha PQL2_k \quad (38)$$

$$DDecL_\alpha PQL2^n: v(DDecL_\alpha PQL2^n) = \mathbf{Min} \{ DecL_\alpha PQL2^n \}, \alpha \text{ irrestrito} \quad (39)$$

Os *clusters* gerados nessa abordagem são apresentados na Figura 3. Nesse caso, as arestas *inter-clusters* são substituídas diretamente pelas arestas tracejadas.

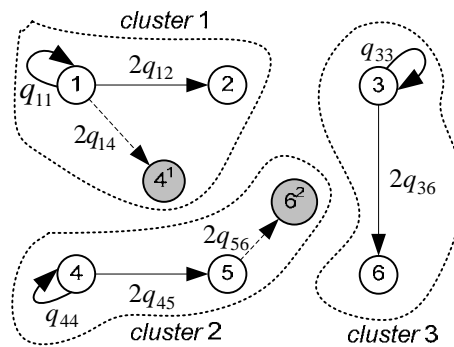


Figura 3 – Grafo gerado na 2ª abordagem.

4.3 3ª abordagem

Seguindo a 2ª abordagem, e as ideias apresentadas por Billionnet *et al.* (1999) e Chardaire & Sutter (1995), surge a ideia de utilizar toda a matriz \mathbf{Q} no modelo linear do PQ (PQL). Logo, o PQL pode ser escrito da seguinte forma:

$$PQL3^n: v(PQL3^n) = \mathbf{Max} \sum_{k=1}^n \left(\sum_{i \in V_k} q_{ii} x_i + \sum_{i \in V_k; j \in V_k; i \neq j} q_{ij} w_{ij} + \sum_{i \in V_k; j \in X_k; i \neq j} q_{ij} w_{ij}^k \right) \quad (40)$$

Sujeito a

$$w_{ij} \leq x_i \quad i \in V_k, j \in V_k, i \neq j, q_{ij} > 0, k = 1, \dots, n \quad (41)$$

$$w_{ij} \leq x_j \quad i \in V_k, j \in V_k, i \neq j, q_{ij} > 0, k = 1, \dots, n \quad (42)$$

$$x_i + x_j - w_{ij} \leq 1 \quad i \in V_k, j \in V_k, i \neq j, q_{ij} < 0, k = 1, \dots, n \quad (43)$$

$$w_{ij} \geq 0 \quad i \in V_k, j \in V_k, i \neq j, q_{ij} < 0, k = 1, \dots, n \quad (44)$$

$$w_{ij}^k \leq x_i \quad i \in V_k, j \in X_k, i \neq j, q_{ij} > 0, k = 1, \dots, n \quad (45)$$

$$w_{ij}^k \leq x_j^k \quad i \in V_k, j \in X_k, i \neq j, q_{ij} > 0, k = 1, \dots, n \quad (46)$$

$$x_i + x_j^k - w_{ij}^k \leq 1 \quad i \in V_k, j \in X_k, i \neq j, q_{ij} < 0, k = 1, \dots, n \quad (47)$$

$$w_{ij}^k \geq 0 \quad i \in V_k, j \in X_k, i \neq j, q_{ij} < 0, k = 1, \dots, n \quad (48)$$

$$x_j = x_j^k \quad j \in X_k, k = 1, \dots, n \quad (49)$$

$$w_{ij}^k = w_{ji}^k \quad i \in V_k, j \in X_k, j > i, k = 1, \dots, n \quad (50)$$

$$x_i \in \{0, 1\} \quad i \in V_k, k = 1, \dots, n \quad (51)$$

A partir das ideias expostas nessa abordagem, pode-se definir o grafo dos subproblemas (*clusters*) assim como apresentado na Figura 4.

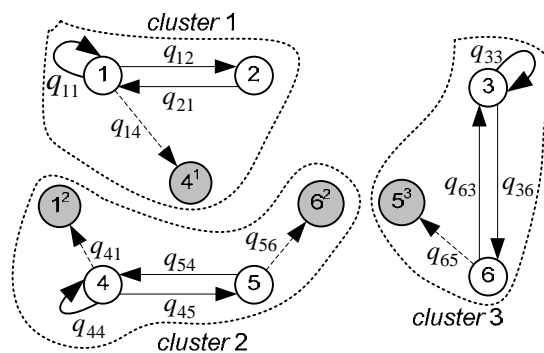


Figura 4 – Grafo gerado na 3ª abordagem.

Relaxando as restrições (49) e (50) no sentido Lagrangeano, através dos vetores de multiplicadores α e β , o problema pode ser dividido em n subproblemas independentes, sendo:

$$DecL_{\alpha\beta}PQL3_k: \quad v(DecL_{\alpha\beta}PQL3_k) = \mathbf{Max}$$

$$\sum_{i \in V_k} \left(q_{ii} - \sum_{d \neq k} \alpha_i^d \right) x_i + \sum_{j \in X_k} \alpha_j^k x_j^k + \sum_{i \in V_k, j \in V_k; j \neq i} q_{ij} w_{ij} + \sum_{i \in V_k, j \in X_k; j > i} (q_{ij} - \beta_{ij}) w_{ij}^k + \sum_{i \in V_k, j \in X_k; j < i} (q_{ij} + \beta_{ji}) w_{ij}^k \quad (52)$$

Sujeito a

$$w_{ij} \leq x_i \quad i \in V_k, j \in V_k, i \neq j, q_{ij} > 0 \quad (53)$$

$$w_{ij} \leq x_j \quad i \in V_k, j \in V_k, i \neq j, q_{ij} > 0 \quad (54)$$

$$x_i + x_j - w_{ij} \leq 1 \quad i \in V_k, j \in V_k, i \neq j, q_{ij} < 0 \quad (55)$$

$$w_{ij} \geq 0 \quad i \in V_k, j \in V_k, i \neq j, q_{ij} < 0 \quad (56)$$

$$w_{ij}^k \leq x_i \quad i \in V_k, j \in X_k, i \neq j, q_{ij} > 0 \quad (57)$$

$$w_{ij}^k \leq x_j^k \quad i \in V_k, j \in X_k, i \neq j, q_{ij} > 0 \quad (58)$$

$$x_i + x_j^k - w_{ij}^k \leq 1 \quad i \in V_k, j \in X_k, i \neq j, q_{ij} < 0 \quad (59)$$

$$w_{ij}^k \in \{0,1\} \quad i \in V_k, j \in X_k, i \neq j, q_{ij} < 0 \quad (60)$$

$$x_j^k \in \{0,1\} \quad j \in X_k \quad (61)$$

$$x_i \in \{0,1\} \quad i \in V_k, k = 1, \dots, n \quad (62)$$

As restrições (60) e (61) são inseridas no modelo para manter a viabilidade das soluções dos subproblemas. Por fim, a solução da relaxação do problema $PQL3$ em n subproblemas, é dada pela expressão (63), e o seu dual Lagrangeano é apresentado na expressão (64).

$$DecL_{\alpha\beta}PQL3^n: \quad v(DecL_{\alpha\beta}PQL3^n) = \sum_{k=1}^n DecL_{\alpha\beta}PQL3_k \quad (63)$$

$$DDecL_{\alpha\beta}PQL3^n: \quad v(DDecL_{\alpha\beta}PQL3^n) = \mathbf{Min} \{ DecL_{\alpha\beta}PQL3^n \}, \alpha, \beta \text{ irrestritos} \quad (64)$$

4.4 Comparação entre as abordagens apresentadas

As três abordagens apresentadas nessa seção possuem ideias semelhantes, porém cada uma apresenta características próprias.

A 1ª abordagem (Figura 2) copia as arestas formadas por vértices pertencentes a *clusters* distintos e seus respectivos vértices – o vértice 4 e as arestas (1,4) e (4,4) são copiados para o *cluster* 1, e o vértice 6 e a aresta (5,6) são copiados para o *cluster* 2. Além disso, o valor associado a cada aresta é dividido entre as originais e suas cópias: q_{14} , q_{44} e q_{56} . Nessa

abordagem, as arestas (1,4) e (5,6) são apresentadas na Figura 2 apenas para ilustrar que as variáveis w_{14} e w_{56} serão utilizadas na formulação, assim como suas cópias w_{14}^1 e w_{56}^2 .

A 2ª abordagem (Figura 3) substitui as variáveis w_{ij} ($i \in V_k$ e $j \in X_k$) diretamente pelas variáveis w_{ij}^k , ou seja, as arestas (i,j) pelas arestas (i,j) no *cluster* k – w_{14} por w_{14}^1 e w_{56} por w_{56}^2 . Além disso, o valor associado às arestas não é dividido nessa abordagem.

Já na 3ª abordagem (Figura 4), toda a matriz \mathbf{Q} é utilizada – o vértice 4 é copiado no *cluster* 1, os vértices 1 e 6 são copiados no *cluster* 2, e o vértice 5 é copiado no *cluster* 3. Nesse caso, os valores associados às arestas são mantidos no *cluster* do vértice de origem.

4.5 Outros limitantes para o PQ

O valor da solução da relaxação linear do PQL (substituir a restrição (8) por $0 \leq x_i \leq 1$) é um limitante trivial para o PQ (Billionnet & Calmels, 1996). Como apresentado em Adams e Dearing (1994), esse limitante é conhecido como *roof dual*. 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 (65).

$$x_i + x_j + x_k - w_{ij} - w_{jk} - w_{ik} \leq 1 \quad (i, j), (j, k), (i, k) \in P \cup N \quad (65)$$

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, o limitante obtido 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/ou (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.
- $Lag_{\gamma}PQL$: restrição (6) relaxada no sentido Lagrangeano.
- $Lag_{\alpha\beta}PQL$: restrições (4) e (5) relaxadas no sentido Lagrangeano.
- $Lag_{\alpha\gamma}PQL$: restrições (4) e (6) relaxadas no sentido Lagrangeano.
- $Lag_{\beta\gamma}PQL$: restrições (5) e (6) relaxadas no sentido Lagrangeano.
- $Lag_{\alpha\beta\gamma}PQL$: restrições (4), (5) e (6) relaxadas no sentido Lagrangeano.

Para cada um desses modelos, pode-se obter um limitante para o PQ através da minimização do seu dual Lagrangeano correspondente ($DLag_{\alpha}PQL$, $DLag_{\beta}PQL$, etc).

5. Experimentos computacionais

Foram realizados inúmeros experimentos computacionais envolvendo um conjunto de 45 instâncias disponíveis na OR-Library (Beasley, 1990). Essas instâncias foram criadas através do gerador proposto por Pardalos & 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 \mathbf{Q}). Os problemas das classes A, B e C foram apresentados em Pardalos & Rodgers (1990a), e os demais em Glover *et al.* (1998). Devido a suas características, essas instâncias estão entre as mais difíceis encontradas na literatura (Glover *et al.*, 1998). 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++.

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

O dual Lagrangeano dos modelos apresentados na seção anterior foi otimizado através do algoritmo de subgradiente apresentado em Narciso & Lorena (1999), que aproxima as soluções do problema no sentido euclidiano de distância (Parker & Rardin, 1988). O CPLEX (Ilog, 2006) também foi utilizado para resolver de forma exata os modelos dos problemas e subproblemas (no caso das decomposições) a cada iteração do algoritmo de subgradiente. O tempo limite para execução desse algoritmo também foi de 1 hora.

A divisão do grafo G foi realizada através da heurística METIS (Karypis & 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, ou seja, reduzindo o número de arestas *inter-clusters*.

Na Tabela 1, os *gaps* apresentados são calculados de acordo com a expressão (66), na qual $v(OPT)$ é o valor da melhor solução conhecida (Glover *et al.*, 1998) para as instâncias utilizadas, e $v(Solução)$ é o valor do limitante obtido pelas abordagens propostas.

$$gap = \frac{v(Solução) - v(OPT)}{v(OPT)} \times 100 \quad (66)$$

A coluna *Dsde* apresenta a densidade da matriz \mathbf{Q} de cada instância, e a coluna *Lag* apresenta os melhores *gaps* obtidos pelas relaxações Lagrangeanas tradicionais. A coluna ($DDL_{\alpha\beta}PQL3^n$)* apresenta os resultados obtidos pela 3ª abordagem proposta, porém com a divisão do grafo do problema de forma aleatória, assim como apresentado em Billionnet *et al.* (1999) e Chardaire & Sutter (1995). Os melhores resultados estão destacados em negrito.

Tabela 1 – Gaps (%) obtidos pelos métodos propostos.

| Inst. | m | Dsde (%) | n | \overline{PQL} | PQLC | Lag | $DDL_{\alpha}PQL1^n$ | $DDL_{\alpha}PQL2^n$ | $DDL_{\alpha}PQL3^n$ | $(DDL_{\alpha}PQL3^n)^*$ |
|---------------------------|-----|----------|----|------------------|---------------|----------------|----------------------|----------------------|----------------------|--------------------------|
| 1a | 50 | 10 | 2 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0,14 | 0 | 0 |
| 2a | 60 | 10 | 2 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 3a | 70 | 10 | 2 | 6,77 | 6,36 | 3,37 | 0,31 | 0,32 | 0 | 0,31 |
| 4a | 80 | 10 | 2 | 0,10 | 0,10 | 0,10 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 5a | 50 | 20 | 2 | 16,12 | 11,59 | 4,17 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 6a | 30 | 40 | 2 | 28,38 | 20,67 | 8,48 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 7a | 30 | 50 | 2 | 28,51 | 10,58 | 7,69 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 8a | 100 | 6,25 | 2 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 1b | 20 | 100 | 2 | 193,98 | 95,99 | 194,66 | 15,66 | 15,65 | 0 | 0 |
| 2b | 30 | 100 | 2 | 328,51 | 185,67 | 329,68 | 21,61 | 21,60 | 6,21 | 7,66 |
| 3b | 40 | 100 | 2 | 429,24 | 252,82 | 429,66 | 29,48 | 29,49 | 8,24 | 22,06 |
| 4b | 50 | 100 | 2 | 537,60 | 325,06 | 538,65 | 36,97 | 36,96 | 4,82 | 16,15 |
| 5b | 60 | 100 | 2 | 532,67 | 321,78 | 534,36 | 21,19 | 21,19 | 3,31 | 7,88 |
| 6b | 70 | 100 | 2 | 678,77 | 419,18 | 680,98 | 29,43 | 29,42 | 9,61 | 12,00 |
| 7b | 80 | 100 | 2 | 687,50 | 425,00 | 690,11 | 19,84 | 19,87 | 0 | 5,03 |
| 8b | 90 | 100 | 2 | 890,00 | 560,00 | 892,05 | 35,18 | 35,20 | 20,79 | 22,05 |
| 9b | 100 | 100 | 2 | 1109,12 | 706,08 | 1109,76 | 49,41 | 49,44 | 27,21 | 27,97 |
| 10b | 125 | 10 | 2 | 1175,97 | 750,65 | 1176,72 | 39,76 | 39,75 | 23,14 | 33,46 |
| 1c | 40 | 80 | 2 | 65,57 | 21,31 | 17,27 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 2c | 50 | 60 | 2 | 63,79 | 25,51 | 20,43 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 3c | 60 | 40 | 2 | 44,04 | 22,27 | 14,24 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 4c | 70 | 30 | 2 | 36,62 | 20,03 | 9,11 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 5c | 80 | 20 | 2 | 21,64 | 16,35 | 6,90 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 6c | 90 | 10 | 2 | 1,48 | 0,30 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 7c | 100 | 10 | 2 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 1d | 100 | 10 | 2 | 11,53 | 8,27 | 1,73 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 2d | 100 | 20 | 2 | 86,91 | 64,31 | 44,96 | 15,48 | 5,74 | 5,94 | 8,57 |
| 3d | 100 | 30 | 2 | 94,94 | 58,08 | 57,69 | 41,69 | 9,07 | 6,47 | 13,23 |
| 4d | 100 | 40 | 2 | 134,52 | 73,17 | 92,15 | 92,47 | 21,34 | 9,67 | 15,16 |
| 5d | 100 | 50 | 2 | 164,34 | 86,05 | 112,79 | 111,53 | 41,67 | 10,2 | 16,62 |
| 6d | 100 | 60 | 2 | 162,79 | 80,52 | 113,68 | 118,33 | 27,81 | 1,57 | 11,23 |
| 7d | 100 | 70 | 2 | 205,14 | 110,48 | 162,54 | 143,54 | 35,02 | 3,92 | 4,94 |
| 8d | 100 | 80 | 2 | 207,24 | 105,85 | 151,40 | 135,74 | 20,24 | 4,32 | 6,13 |
| 9d | 100 | 90 | 2 | 252,13 | 134,76 | 194,06 | 167,14 | 28,93 | 1,26 | 2,05 |
| 10d | 100 | 100 | 2 | 234,16 | 132,04 | 183,00 | 161,87 | 25,61 | 4,29 | 5,30 |
| 1e | 200 | 10 | 4 | 44,27 | 35,26 | 28,26 | 13,05 | 5,65 | 7,17 | 8,92 |
| 2e | 200 | 20 | 5 | 119,48 | 83,86 | 94,4 | 149,98 | 60,42 | 51,75 | 58,41 |
| 3e | 200 | 30 | 8 | 188,73 | 110,69 | 144,66 | 88,61 | 72,61 | 85,83 | 88,39 |
| 4e | 200 | 40 | 10 | 186,88 | 98,50 | 187,58 | 94,40 | 73,55 | 93,33 | 94,29 |
| 5e | 200 | 50 | 15 | 263,42 | 148,84 | 228,72 | 118,53 | 134,41 | 154,52 | 159,06 |
| 1f | 500 | 10 | 20 | 159,28 | 126,12 | 124,66 | 95,68 | 93,44 | 92,52 | 98,46 |
| 2f | 500 | 25 | - | 297,20 | 164,58 | 297,34 | - | - | - | - |
| 3f | 500 | 50 | - | 474,68 | - | 19,33 | - | - | - | - |
| 4f | 500 | 75 | - | 587,96 | - | 11,08 | - | - | - | - |
| 5f | 500 | 100 | - | 500,32 | - | 9,41 | - | - | - | - |
| Tempo médio (seg.) | | | | 173,96 | 371,90 | 2725,84 | 2044,23 | 1838,67 | 2313,50 | 2333,44 |

A última linha dessa tabela apresenta os tempos médios necessários para resolver cada instância através do método correspondente.

As instâncias da classe B são formadas por matrizes \mathbf{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, os resultados apresentados (coluna *Lag*) foram obtidos através da $Lag_{\lambda}PQL$, pois $Lag_{\lambda}PQL = Lag_{\alpha\lambda}PQL = Lag_{\beta\lambda}PQL = Lag_{\alpha\beta\lambda}PQL$. Já para as instâncias das demais classes, os melhores resultados das relaxações Lagrangeanas tradicionais (coluna *Lag*) foram obtidos através das relaxações de apenas uma aresta positiva ($Lag_{\alpha}PQL$ ou $Lag_{\beta}PQL$).

Para as instâncias das classes A e C, os *gaps* obtidos pelas decomposições propostas foram iguais à zero em quase todos os casos, e de melhor qualidade em relação aos demais métodos. Já para as instâncias da classe B, que apresentam grandes *gaps* de dualidade, os *gaps* obtidos pelas decomposições foram significativamente distantes do *roof dual* e menores que os demais métodos. Entre as decomposições propostas, a 3ª abordagem apresentou melhores resultados.

Os *gaps* obtidos pelas decomposições, para as instâncias da classe D, também foram menores que os demais. Entre as abordagens propostas, a 3ª apresentou os melhores resultados, seguido pela 2ª e posteriormente pela 1ª, e mais uma vez, todas apresentaram *gaps* distantes do *roof dual*.

Para as instâncias da classe E, a 2ª e a 3ª abordagem apresentaram novamente *gaps* menores do que os demais e distantes do *roof dual*. A 1ª abordagem também apresentou *gaps* pequenos, porém para a instância 2e, o *gap* apresentado foi pior do que o *roof dual*. Para essas instâncias, foram testados vários números de *clusters* (n), e os melhores resultados foram obtidos com números maiores de *clusters* para as instâncias com maiores densidades (*Dsde*).

Já para as instâncias da classe F, as decomposições apresentaram resultados apenas para a instância 1f (com 10% de densidade), e esses resultados também foram melhores que os demais. Para as demais instâncias, foram testados vários números de *clusters* (10, 20 e 50) e em nenhum caso foram obtidas soluções em um tempo aproximado de 1 hora de processamento.

Comparando as duas últimas colunas da Tabela 1, percebe-se uma piora nos limitantes obtidos utilizando o particionamento aleatório do grafo dos problemas ($DDL_{\alpha\beta}PQL3^n$)*, o que é justificado pelo fato de que a METIS particiona o grafo visando reduzir o número de arestas *inter-clusters*, e conseqüentemente, como pode ser observado nas Figuras 2, 3 e 4, e nos respectivos modelos, gera uma relaxação mais forte para o problema original.

6. Conclusões

Novas formas de decomposição Lagrangeana para obtenção de limitantes para o problema de programação quadrática binária irrestrita foram apresentadas neste trabalho. Instâncias de difícil solução e com diferentes características foram utilizadas para avaliar os métodos propostos.

As decomposições propostas apresentaram excelentes resultados para as instâncias com até 200 variáveis, com várias densidades, e para a instância com 500 variáveis com baixa

densidade. Já para as instâncias com 500 variáveis e alta densidade, tais métodos não apresentaram soluções, pois o CPLEX não foi capaz de resolver os subproblemas dentro de um tempo aceitável.

As decomposições apresentadas tratam o PQ através de modelos lineares representados através de grafos, e copiam apenas as variáveis de decisão necessárias em cada subproblema. Além disso, a divisão do problema é realizada através da heurística de particionamento de grafos METIS (Karypis & Kumar, 1998), e os subproblemas são resolvidos através do CPLEX (Ilog, 2006). Essas características permitem a resolução de problemas com até 500 variáveis e com várias densidades, e diferenciam as decomposições propostas das já existentes na literatura para problemas quadráticos (Billionnet *et al.*, 1999 e Chardaire & Sutter, 1995), que utilizam modelos pseudolineares, não utilizam a representação em grafos, a METIS e o CPLEX, e são limitadas a problemas com até 100 variáveis.

Os métodos propostos não foram comparados diretamente com a decomposição proposta por Chardaire & Sutter (1995) devido à indisponibilidade das instâncias utilizadas por esses autores. Entretanto, os resultados apresentam indícios de que as decomposições propostas são superiores à decomposição proposta por Chardaire & Sutter (1995), pois os modelos propostos através da representação em grafos, com o auxílio de uma heurística para particionar esses grafos gerando um pequeno número de arestas *inter-clusters*, resulta uma relaxação mais forte para o problema original, e conseqüentemente uma maior independência entre os subproblemas, o que permite a resolução de problemas maiores (com densidades variadas) com *gaps* de boa qualidade. Além disso, como pode ser observado nos resultados apresentados, os limitantes obtidos pelas decomposições propostas dominam os obtidos pelas relaxações lagrangeanas tradicionais e pelos demais métodos descritos na Seção 4.5.

Os resultados obtidos indicam que os limitantes apresentados contribuem com a exploração do PQ , e apresentam novas alternativas de decomposição para problemas representados por grafos. Além disso, acredita-se que uma técnica mais eficiente para resolução dos subproblemas pode resultar em melhores soluções para as instâncias tratadas neste trabalho e possivelmente para instâncias maiores. Uma alternativa para otimizar a resolução dos subproblemas é a utilização de processamento paralelo.

Agradecimentos

Os autores agradecem aos revisores deste trabalho pelos comentários e sugestões, e 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.

Referências Bibliográficas

- (1) Adams, W.P.; Forrester, R.J. & Glover, F.W. (2004). Comparisons and enhancement strategies for linearizing mixed 0-1 quadratic programs. *Discrete Optimization*, **1**, 99-120.
- (2) Adams, W.P. & 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.

- (3) Beasley, J.E. (1998). Heuristic algorithms for the unconstrained binary quadratic programming problem. Technical Report – Management School, Imperial College, London, UK.
- (4) Beasley, J.E. (1990). Or-library: Distributing test problems by electronic mail. *Journal of the Operational Research Society*, **41**(11), 1069-1072.
- (5) Billionnet, A. & Calmels, F. (1996). Linear programming for the 0-1 quadratic knapsack problem. *European Journal of Operational Research*, **92**(2), 310-325.
- (6) Billionnet, A. & Elloumi, S. (2007). Using a mixed integer quadratic programming solver for the unconstrained quadratic 0-1 problem. *Mathematical Programming*, **109**, 55-68.
- (7) Billionnet, A.; Faye, A. & Soutif, E. (1999). A new upper bound for the 0-1 quadratic knapsack problem. *European Journal of Operational Research*, **112**, 664-672.
- (8) Billionnet, A. & Sutter, A. (1994). Minimization of a quadratic pseudo-boolean function. *European Journal of Operational Research*, **78**, 106-115.
- (9) Boros, E.; Crama, Y. & Hammer, P.L. (1990). Upper bounds for quadratic 0-1 maximization. *Operations Research Letters*, **9**, 73-79.
- (10) Boros, E.; Crama, Y. & Hammer, P.L. (1992). Chvatal cuts and odd cycle inequalities in quadratic 0-1 optimization. *SIAM – Journal on Discrete Mathematics*, **5**(2), 163-177.
- (11) Chardaire, P. & Sutter, A. (1995). A decomposition method for quadratic zero-one programming. *Management Science*, **41**(4), 704-712.
- (12) Forrester, R. & Greenberg, H. (2008). Quadratic binary programming models in computational biology. *Algorithmic Operations Research*, **3**(2), 110-129.
- (13) Glover, F.; Kochenberger, G.A. & Alidaee, B. (1998). Adaptive memory tabu search for binary quadratic programs. *Management Science*, **44**(3), 336-345.
- (14) Glover, F. & Woolsey, E. (1974). Converting a 0-1 polynomial programming problem to a 0-1 linear program. *Operations Research*, **22**, 180-182.
- (15) Gulati, V.P.; Gupta, S.K. & Mittal, A.K. (1984). Unconstrained quadratic bivalent programming problem. *European Journal of Operational Research*, **15**, 121-155.
- (16) Hammer, P.L.; Hansen, P. & Simeone, B. (1984). Roof duality, complementation and persistency in quadratic 0-1 optimization. *Mathematical Programming*, **28**, 121-195.
- (17) Hansen, P. & Meyer, C. (2008). Improved compact linearizations for the unconstrained quadratic 0-1 minimization problem. *Discrete Applied Mathematics*, in press.
- (18) Hicks, I.V.; Warren, J.S.; Warrier, D. & Wilhelm, W.E. (2005). A branch-and-price approach for the maximum weight independent set problem. *Networks*, **46**(4), 198-209.
- (19) Ilog (2006). *ILOG CPLEX 10.0: user's manual*. France, 478 p.
- (20) Karypis, G. & Kumar, V. (1998). Multilevel k-way partitioning scheme for irregular graphs. *Journal of Parallel and Distributed Computing*, **48**, 96-129.
- (21) Krarup, J. & Pruzan, P.A. (1978). Computer aided layout design. *Mathematical Programming Study*, **9**, 75-94.

- (22) Laughunn, D.J. (1970). Quadratic binary programming with application to capital budgeting problems. *Operations Research*, **18**, 454-461.
- (23) McBride, R.D. & Yormark, J.S. (1980). An implicit enumeration algorithm for quadratic integer programming. *Management Science*, **26**, 282-296.
- (24) Narciso, M.G. & Lorena, L.A.N. (1999). Lagrangean/surrogate relaxation for generalized assignment problems. *European Journal of Operational Research*, **114**, 165-177.
- (25) Palubeckis, G. (1995). A heuristic-based branch and bound algorithm for unconstrained quadratic 0-1 programming. *Computing*, **54**(4), 283-301.
- (26) Palubeckis, G. (2004). Multistart tabu search strategies for the unconstrained binary quadratic optimization problem. *Annals of Operations Research*, **131**(1), 259-282.
- (27) Pardalos, P.M. & Phillips, A.T. (1990). A global optimization approach for solving the maximum clique problem. *International Journal of Computer Mathematics*, **33**, 209-216.
- (28) Pardalos, P.M. & Rodgers, G.P. (1990a). Computational aspect of a branch and bound algorithm for quadratic 0-1 programming. *Computing*, **45**, 131-144.
- (29) Pardalos, P.M. & 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.
- (30) Pardalos, P.M. & Rodgers, G.P. (1992). A branch and bound algorithm for the maximum clique problem. *Computers & Operations Research*, **19**, 363-375.
- (31) Pardalos, P.M. & Jha, S. (1992). Complexity of uniqueness and local search in quadratic 0-1 programming. *Operations Research Letters*, **11**, 119-123.
- (32) Pardalos, P.M. & Xue, J. (1994). The maximum clique problem. *Journal of Global Optimization*, **4**, 301-328.
- (33) Pardalos, P.M.; Chaovalitwongse, W.; Iasemidis, L.D.; Sackellares, J.C.; Shiau, D.S.; Carney, P.R.; Prokopyev, O.A. & Yatsenko, V.A. (2004). Seizure warning algorithm based on optimization and nonlinear dynamics. *Mathematical Programming*, **101**(2), 365-385.
- (34) Parker, R.G. & Rardin, R.L. (1988). *Discrete Optimization*. Academic Press, New York, USA.
- (35) Phillips, A.T. & Rosen, J.B. (1994). A quadratic assignment formulation of the molecular conformation problem. *Journal of Global Optimization*, **4**, 229-241.