t-Linearização Aplicada ao Problema da Clique Máxima Ponderada em Arestas

Pablo Luiz B. Soares
Universidade Federal do Ceará
Campus de Russas, Bloco 1, CEP 62900-000, Russas - CE, Brasil.
pablo.soares@ufc.br

Manoel Campêlo[1]
Universidade Federal do Ceará, Departamento de Estatística e Matática Aplicada
Campus do Pici, Bloco 910, CEP 60440-900, Fortaleza - CE, Brasil.
mcampelo@lia.ufc.br

RESUMO

Aplicamos a *t*–linearização ao modelo quadrático $0-1$ para o problema da clique de peso máximo em arestas. Comparamos computacionalmente o modelo obtido com três formulações lineares da literatura. Experimentos computacionais mostram que a *t*–linearização alcança um limite superior mais apertado em todas as instâncias usadas. Por outro lado, uma das formulações usa menos restrições na obtenção dos limites.

PALAVRAS CHAVE. Clique máxima ponderada em arestas, t-linearização, programação quadrática 0-1.

Tópicos (indique, em ordem de PRIORIDADE, o(s) tópicos(s) de seu artigo)

ABSTRACT

We apply the *t*–linearization to the $0-1$ quadratic model for the Maximum Edge-Weighted Clique Problem. We computationally compare the obtained model with three other linear formulations from the literature. Computational experiments show that the *t*–linearization achieves a tighter upper bound in all used instances. On the other hand, one of the formulations uses fewer constraints for obtaining the bounds.

KEYWORDS. Maximum edge-weighted clique, t-linearization, 0-1 quadratic programming.

Paper topics (indicate in order of PRIORITY the paper topic(s))

[1]Parcialmente financiado por CNPq 443747/2014-8, 305264/2016-8.

1. Introdução

O problema da m-clique ponderada máxima (Weighted Maximal m-Clique Problem – WCP) consiste em encontrar uma clique de maior peso com no máximo m vértices em um grafo completo ponderado nos vértices e nas arestas Sørensen [2004]. Uma variação do WCP pode ser obtida quando apenas as arestas são ponderadas. Essa versão é também conhecida como problema da clique de peso máximo em arestas (Maximum Edge-Weighted Clique Problem – MEWCP) Dijkhuizen e Faigle [1993], que formalmente pode ser descrito como um problema quadrático binário Kuo et al. [1993]; Alidaee et al. [2007].

Dado um grafo completo não-direcionado $G = (V, E)$, com $|V| = n$ vértices, ponderado em arestas, e um inteiro $m < n$, MEWCP consiste em encontrar uma clique em G, com no máximo m vértices, tal que a soma dos pesos das arestas seja máximo. Em outras palavras, deseja-se escolher um subconjunto $S \subseteq V$, com $|S| \leq m$, onde as arestas com ambas as extremidades em S somem o maior peso.

Diferentes versões/variações do MEWCP têm sido estudadas, originando diversas nomenclaturas, como mostra a Tabela 1. Elas se diferenciam pela restrição de cardinalidade (no máximo ou exatamente m vértices são desejados), pelo domínio dos pesos associados às arestas (reais, inteiros ou binários) e pela possibilidade do grafo ser ou não completo. Esse último ponto porém costuma ser tratado adiocionando as arestas inexistentes com custos apropriados, de modo a gerar uma instância equivalente num grafo completo.

Tabela 1: Versões do MEWCP

Nomeclatura	$\|S\|$	pesos	Referência
Maximum Edge-Weighted Clique	$\leq m$	$\in \mathbb{R}$	Macambira e Souza [2000]
Maximum Edge-Weighted Subgraph			Macambira [2002]
Heaviest Subgraph Problem	$= m$	$\in \mathbb{R}_+$	Billionnet [2005]
Maximum Diversity Problem(MDP)			Martí et al. [2010]
Maxsum, Dispersion			Ravi et al. [1994]
Dense m-Subgraph	$= m$	$\in \mathbb{B}$	Feige et al. [2001]
Maximum Edge Subgraph			Bonomo et al. [2009]

A partir de um modelo quadrático binário, apresentamos quatro formulações de programação linear inteira para MEWCP. Todas podem ser facilmente adaptadas para as variações apresentadas na Tabela 1 ou mesmo para o caso onde pesos também são considerados nos vértices. As três primeiras formulações são conhecidas da literatura; a quarta advém da aplicação da t-linearização ao modelo quadrático. Realizamos experimentos computacionais comparando as formulações, usando instâncias geradas aleatoriamente.

2. Formulações

Seja $V(G) = \{v_1, v_2, \ldots, v_n\}$ e considere $c_e \in \mathbb{R}$ o peso de cada aresta $e \in E$. Por simplicidade, usamos indistintamente $c_{ji} = c_{ij}$ para representar o peso de $e = (v_i, v_j) \in E$. A formulação quadrática binária para MEWCP é dada naturalmente por:

$$(F_1) \quad \max \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^{n} c_{ij} x_i x_j \qquad \text{s.a: } \sum_{i=1}^{n} x_i \leq m, \qquad x_i \in \{0, 1\},\ 1 \leq i \leq n.$$

onde a variável binária $x_i = 1$ se o vértice $v_i \in S$ e $x_i = 0$ se $v_i \notin S$.

Em Glover e Woolsey [1974], os autores mostram como converter um problema de programação polinomial $0-1$ em um problema de programação linear $0-1$. Esse procedimento, conhecido como linearização clássica, consiste em substituir cada produto $x_i x_j$ por uma variável não negativa y_{ij} e adicionar restrições $y_{ij} \leq x_i$, $y_{ij} \leq x_j$ e $y_{ij} \geq x_i + x_j - 1$. Logo após, Glover [1975] introduziu inequações que servem para lidar com problemas quadráticos inteiros. Usando esses procedimentos, Kuo et al. [1993] propõem duas formulações lineares (F_2 e F_3) para o MDP, que também se aplicam ao MEWCP.

A formulação (F_2) é obtida aplicando-se diretamente a linearização clássica a (F_1):

$$
\begin{aligned}
(F_2) \quad & \max \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^{n} c_{ij} y_{ij} \\
& \text{s.a:} \sum_{i=1}^{n} x_i \leq m, \\
& y_{ij} \leq x_i, \;\; y_{ij} \leq x_j, \quad 1 \leq i < j \leq n, \\
& y_{ij} \geq x_i + x_j - 1, \quad 1 \leq i < j \leq n, \\
& x \in \{0,1\}^n, \quad y \geq 0.
\end{aligned}
$$

Em lugar das variáveis y, a formulação (F_3) usa uma variável $u \in \mathbb{R}^{n-1}$ tal que $u_i = x_i \sum_{j=i+1}^{n} c_{ij} x_j$. Com o intuito de obter tal igualdade, para todo $1 \leq i \leq n-1$, defina

$$
\overline{U}_i = \sum_{j=i+1}^{n} \max(0, c_{ij}), \quad \underline{U}_i = \sum_{j=i+1}^{n} \min(0, c_{ij}).
$$

Assim obtemos:

$$
\begin{aligned}
(F_3) \quad & \max \sum_{i=1}^{n-1} u_i \\
& \text{s.a:} \sum_{i=1}^{n} x_i \leq m, \\
& u_i \leq \overline{U}_i x_i, \quad 1 \leq i \leq n-1, \\
& u_i \leq \sum_{j=i+1}^{n} c_{ij} x_j - \underline{U}_i (1 - x_i), \quad 1 \leq i \leq n-1, \\
& x \in \{0,1\}^n, \quad u \geq 0.
\end{aligned}
$$

Em Macambira e Souza [2000], os autores usam uma modificação de (F_2), reescrevendo a restrição de cardinalidade para obter:

$$
\begin{aligned}
(F_m) \quad & \max \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^{n} c_{ij} y_{ij} \\
& \text{s.a:} \sum_{j \neq i} y_{ij} - (m-1) x_i \leq 0, \quad 1 \leq i \leq n, \\
& y_{ij} \leq x_i, \quad y_{ij} \leq x_j, \quad y_{ij} \geq x_i + x_j - 1, \quad 1 \leq i < j \leq n, \\
& x_i \in \{0,1\}, \;\; 1 \leq i \leq n, \quad y_{ij} \in \{0,1\}, \;\; 1 \leq i < j \leq n.
\end{aligned}
$$

Podemos observar que, em relação a F_1, o modelo F_2 acrescenta $n(n-1)/2$ novas variáveis e $3n(n-1)/2$ restrições, enquanto que o modelo F_3 acrescenta $n-1$ variáveis e $2(n-1)$ restrições. Já o modelo F_m, além de adicionar as mesmas variáveis e restrições que F_2, também substitui a restrição de cardinalidade (que só involve x) por n restrições (que involvem x e y).

Uma outra alternativa de linearização foi proposta em Rodrigues [2010], no contexto do Problema Quadrático da Mochila (PQM). Ela consiste basicamente de duas etapas. Primeiro, substitui-se o termo quadrático da função objetivo por uma variável real t, que é limitada superiormente pela expressão quadrática, com a inclusão de uma restrição adicional. Depois, essa restrição quadrática é substituída por um conjunto exponencial de desigualdades lineares, que definem os mesmos pontos inteiros. Na verdade, tais restrições lineares definem a envoltória convexa dos pontos inteiros que satisfazem a restrição quadrática, quando os coeficientes do termo quadrático são não-negativos. Essa propriedade, válida em (PQM), é fortemente usada em Rodrigues et al. [2012].

Na Seção 3, enunciamos os principais resultados de Rodrigues [2010]; Rodrigues et al. [2012] para *t*–linearização de custo não negativos, bem como sua generalização para custos arbitrários, mostrada em Soares et al. [2017]. Na Seção 4, aplicamos esse desenvolvimento à formulação (F_1). Na Seção 5, mostramos como fortalecer as desigualdades da t-linearização usando a restrição de cardinalidade. Experimentos computacionais para MEWCP, comparando a *t*–linearização e as formulações F_2, F_3 e F_m, são apresentados na Seção 6. Conclusões resumidas fecham o artigo.

3. *t*–Linearização

Considere o problema quadrático 0-1 (PQ), base para o estudo de outros problemas dessa classe:

$$(PQ) \quad \max \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^{n} c_{ij} x_i x_j \quad \text{s.a: } x \in \{0,1\}^n$$

Inicialmente, supomos $c_{ij} \geq 0$, $1 \leq i < j \leq n$. Por conveniência, definimos os coeficientes adicionais $c_{ji} = c_{ij}$ e $c_{ii} = 0$. Com o auxílio de uma variável t, podemos reescrever (PQ) como:

$$(PQ)_t \quad \max\{t : (x,t) \in Z\}, \quad \text{onde } Z = \left\{ (x,t) \in \mathbb{B}^n \times \mathbb{R} : t \leq \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{i-1} c_{ji} x_i x_j \right\}.$$

Seja S_n o conjunto de todas as permutações de $\{1,\ldots,n\}$. O conjunto Z pode ser expresso por restrições lineares, conforme teorema abaixo Rodrigues [2010].

Teorema 1. *Se* $c_{ij} \geq 0 \; \forall i,j$, $Z = \left\{ (x,t) \in \mathbb{B}^n \times \mathbb{R} : t \leq \sum_i \sum_{j<i} c_{\pi(j)\pi(i)} x_{\pi(i)} \; \forall \pi \in S_n \right\}$.

Pelo Teorema 1, podemos transformar $(PQ)_t$ em um modelo linear. Na verdade, Rodrigues [2010] mostra que a integralidade das variáveis x pode ser descartada, pois tal descrição linear de Z define sua envoltória convexa. Mais ainda, o autor mostra que a separação dessas restrições lineares pode ser feita em tempo polinomial, como segue:

Teorema 2. *Seja* $\hat{x} \in [0,1]^n$*. A solução do problema* $\min_{\pi \in S_n} \sum_i \sum_{j<i} c_{\pi(j)\pi(i)} \hat{x}_{\pi(i)}$ *ocorre na permutação* $\hat{\pi} \in S_n$ *que ordena as componentes de* $\hat{x}$ *em ordem não-crescente, ou seja, tal que* $\hat{x}_{\hat{\pi}(i)} \geq \hat{x}_{\hat{\pi}(j)} \; \forall 1 \leq i \leq j \leq n$.

Agora, consideramos coeficientes arbitrários $c_{ij} = c_{ji}$, $1 \leq i,j \leq n$. Por conveniência, vamos multiplicar a função objetivo de (PQ) por 2, obtendo

$$(PQ) \quad \max\{F(x) : x \in \mathbb{B}^n\} \quad \text{onde} \quad F(x) = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=i+1}^{n} 2c_{ij} x_i x_j = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{i-1} 2c_{ji} x_i x_j.$$

Denote $a^+ = \max\{0,a\}$, $a^- = \min\{0,a\}$, $\forall a \in \mathbb{R}$, e $\overline{a} = 1 - a$, $\forall a \in [0,1]$. Note que

$$F(x) \;=\; \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{i-1} 2c_{ji}^{+} x_i x_j + \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{i-1} \underbrace{2c_{ji}^{-} x_i x_j}_{c_{ji}^{-} x_i (1-\overline{x}_j) + c_{ji}^{-}(1-\overline{x}_i) x_j}$$

ou melhor, $F(x) = Q(x) + L(x)$, onde

$$\begin{aligned} Q(x) &= \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{i-1} 2c_{ji}^{+}x_ix_j + \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{i-1} -c_{ji}^{-}(x_i\overline{x}_j + \overline{x}_i x_j), \\ L(x) &= \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{i-1} c_{ji}^{-}(x_i + x_j) = \sum_{i}\sum_{j<i} c_{ji}^{-}x_i + \sum_{i}\sum_{j>i} c_{ji}^{-}x_i = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} c_{ij}^{-}x_i. \end{aligned}$$

Assim, podemos reescrever (PQ) como

$$(PQ)_t \quad \max\{t + L(x) : (x,t) \in Z\} \quad \text{onde} \quad Z = \{(x,t) \in \mathbb{B}^n \times \mathbb{R} : t \leq Q(x)\}.$$

A restrição quadrática que define Z pode ser substituída por expressões lineares, conforme Teorema 3 Soares et al. [2017], onde $\mathcal{N} = \{(N_0, N_1) : N_0 \cup N_1 = N, N_0 \cap N_1 = \emptyset\}$ denota o conjunto de partições de $N = \{1, \ldots, n\}$.

Teorema 3. $Z = \{(x,t) \in \mathbb{B}^n \times \mathbb{R} : t \leq \Theta(\pi, N_0, N_1; x) \ \forall \pi \in S_n \ \forall (N_0, N_1) \in \mathcal{N}\}$, *onde*

$$\begin{aligned} \Theta(\pi, N_0, N_1; x) = &\sum_{i\in N}\sum_{\substack{\pi(j)\in N_1\\ j<i}} -c_{\pi(j)\pi(i)}^{-}(\overline{x}_{\pi(i)} + \overline{x}_{\pi(j)}) + \sum_{i\in N}\sum_{\substack{\pi(j)\in N_0\\ j<i}} -c_{\pi(j)\pi(i)}^{-}(x_{\pi(i)} + x_{\pi(j)}) \\ &+ \sum_{i\in N}\sum_{\substack{\pi(j)\in N_1\\ j<i}} 2c_{\pi(j)\pi(i)}^{+}x_{\pi(i)} + \sum_{i\in N}\sum_{\substack{\pi(j)\in N_0\\ j<i}} 2c_{\pi(j)\pi(i)}^{+}x_{\pi(j)}, \end{aligned}$$

O Teorema 3 generaliza, para coeficientes arbitrários, o resultado de Rodrigues et al. [2012]. Como consequência, podemos transformar o problema quadrático $(PQ)_t$ e, portanto (PQ), em um problema de programação linear inteira equivalente, com a adição de uma variável extra e um número exponencial de $2^n \cdot n!$ restrições. Adicionalmente, de acordo com o Teorema 4, a separação dessas desigualdades pode ser feita em tempo polinomial Soares et al. [2017].

Teorema 4. *Dado $x^* \in [0,1]^n$, a solução do problema de separação* $\min\limits_{(N_0,N_1)\in\mathcal{N}} \min\limits_{\pi\in S_n} \Theta(\pi, N_0, N_1; x^*)$ *ocorre em $(\hat{N}_0, \hat{N}_1)$ e $\hat{\pi} \in S_n$ tais que*

$$\hat{N}_0 = \left\{j \in N : \overline{x_j^*} > x_j^*\right\}, \ \hat{N}_1 = \left\{j \in N : x_j^* \geq \overline{x_j^*}\right\},$$

$$\hat{y}_{\hat{\pi}(1)} \geq \hat{y}_{\hat{\pi}(2)} \geq \ldots \geq \hat{y}_{\hat{\pi}(n)},$$

onde $\hat{y}_j = \overline{x_j^*}$, se $j \in \hat{N}_0$, e $\hat{y}_j = x_j^*$, se $j \in \hat{N}_1$.

4. Aplicação da *t*–Linearização ao MEWCP

Pelo Teorema 3, podemos reescrever (F_1) como

$$(F_1)_t^{\pi} \ \max \ t + \frac{1}{2}\sum_{i\in N}\sum_{j\in N} c_{ji}^{-}x_i \tag{1}$$

$$\begin{aligned} \text{s.a: } t \leq \ &\frac{1}{2}\sum_{i\in N}\sum_{\substack{\pi(j)\in N_1\\ j<i}} -c_{\pi(j)\pi(i)}^{-}(\overline{x}_{\pi(i)} + \overline{x}_{\pi(j)}) + \frac{1}{2}\sum_{i\in N}\sum_{\substack{\pi(j)\in N_0\\ j<i}} -c_{\pi(j)\pi(i)}^{-}(x_{\pi(i)} + x_{\pi(j)}) \\ &+ \sum_{i\in N}\sum_{\substack{\pi(j)\in N_1\\ j<i}} c_{\pi(j)\pi(i)}^{+}x_{\pi(i)} + \sum_{i\in N}\sum_{\substack{\pi(j)\in N_0\\ j<i}} c_{\pi(j)\pi(i)}^{+}x_{\pi(j)} \ \ \forall \pi \in S_n \ \forall (N_0, N_1) \in \mathcal{N}, \end{aligned} \tag{2}$$

$$\sum_{i=1}^{n} x_i \leq m, \tag{3}$$

$$(x,t) \in \mathbb{B}^n \times \mathbb{R}. \tag{4}$$

Além disso, caso os custos sejam não-negativos, o modelo pode ser simplificado para

$$\max\ t \quad \text{s.a:} \quad (3),(4),\ t \leq \sum_{i}\sum_{j<i} c_{\pi(j)\pi(i)} x_{\pi(i)}\ \forall \pi \in S_n. \tag{5}$$

Distribuindo os termos da primeira parcela da desigualdade (2), podemos reescrevê-la com uma mudança de variável como:

$$\sum_{i \in N} \sum_{\substack{\pi(j)\in N_1 \\ j<i}} -\frac{1}{2} c^-_{\pi(j)\pi(i)} \overline{x}_{\pi(i)} + \sum_{\pi(i)\in N_1} \sum_{j>i} -\frac{1}{2} c^-_{\pi(j)\pi(i)} \overline{x}_{\pi(i)}$$

Similarmente, reorganizando os termos da segunda, terceira e quarta parcelas em (2), obtemos:

$$\sum_{i\in N} \left(\sum_{\substack{\pi(j)\in N_0 \\ j<i}} -\frac{1}{2} c^-_{\pi(j)\pi(i)} + \sum_{\substack{\pi(j)\in N_1 \\ j<i}} c^+_{\pi(j)\pi(i)} \right) x_{\pi(i)} + \sum_{\pi(i)\in N_0} \sum_{j>i} \left(-\frac{1}{2} c^-_{\pi(j)\pi(i)} + c^+_{\pi(j)\pi(i)} \right) x_{\pi(i)}$$

Dessa forma, a restrição (2) evidenciando o coeficiente de cada variável e seu complemento é:

$$t \leq \sum_{\pi(i)\in N_0} \alpha_{\pi(i)} x_{\pi(i)} + \sum_{\pi(i)\in N_0} \overline{\alpha}_{\pi(i)} \overline{x}_{\pi(i)} + \sum_{\pi(i)\in N_1} \beta_{\pi(i)} x_{\pi(i)} + \sum_{\pi(i)\in N_1} \overline{\beta}_{\pi(i)} \overline{x}_{\pi(i)}, \tag{6}$$

onde

$$\alpha_{\pi(i)} = \sum_{\substack{\pi(j)\in N_0 \\ j<i}} -\frac{1}{2} c^-_{\pi(j)\pi(i)} + \sum_{\substack{\pi(j)\in N_1 \\ j<i}} c^+_{\pi(j)\pi(i)} + \sum_{j>i} \left(-\frac{1}{2} c^-_{\pi(j)\pi(i)} + c^+_{\pi(j)\pi(i)} \right), \overline{\alpha}_{\pi(i)} = \sum_{\substack{\pi(j)\in N_1 \\ j<i}} -\frac{1}{2} c^-_{\pi(j)\pi(i)}$$

$$\beta_{\pi(i)} = \sum_{\substack{\pi(j)\in N_0 \\ j<i}} -\frac{1}{2} c^-_{\pi(j)\pi(i)} + \sum_{\substack{\pi(j)\in N_1 \\ j<i}} c^+_{\pi(j)\pi(i)}, \quad \overline{\beta}_{\pi(i)} = \sum_{\substack{\pi(j)\in N_1 \\ j<i}} -\frac{1}{2} c^-_{\pi(j)\pi(i)} + \sum_{j>i} -\frac{1}{2} c^-_{\pi(j)\pi(i)}.$$

5. Fortalecimento das Restrições

A presença da restrição de cardinalinade (3) permite fortalecer as restrições da *t*-linearização. Quando os custos são não-negativos, elas podem substituídas conforme o seguinte teorema, baseado na ideia apresentada em Rodrigues [2010] para o problema quadrático da mochila.

Teorema 5. *Para* $i = 1, \ldots, n$ *e* $\pi \in S_n$*, seja* $s_{\pi(i)}$ *a soma dos* $r := \min\{i-1, m-1\}$ *maiores valores do conjunto* $\{c_{\pi(j)\pi(i)} : j = 1, \ldots, i-1\}$*. Então as desigualdades* $t \leq \sum_{i=1}^{n} s_{\pi(i)} x_{\pi(i)}$*, para todo* $\pi \in S_n$*, são válidas para* (5).

Demonstração. Seja (x,t) viável para (5). Como $\sum_{i=1}^{n} x_i = m$, se $x_{\pi(i)} = 1$, então $\sum_{j=1}^{i-1} x_{\pi(j)} \leq r$. Pelo Teorema 1, $(x,t) \in Z$ e, por conseguinte, $t \leq \sum_{i=1:x_{\pi(i)}=1}^{n} (\sum_{j=1}^{i-1} c_{\pi(j)\pi(i)} x_{\pi(j)}) x_{\pi(i)} \leq \sum_{i=1}^{n} s_{\pi(i)} x_{\pi(i)}$. $\square$

Apresentamos a seguir uma generalização do Teorema 5 para custos arbitrários.

Teorema 6. *Para* $i = 1, \ldots, n$, $\pi \in S_n$ *e* $(N_0, N_1) \in \mathcal{N}$*, sejam* $s^0_{\pi(i)}$ *e* $s^1_{\pi(i)}$*, respectivamente, a soma dos no máximo* $m-1$ *maiores valores dos conjuntos*

$$\{c^+_{\pi(j)\pi(i)} : (\pi(j) \in N_1, j < i) \text{ ou } j > i\}, \quad \{c^+_{\pi(j)\pi(i)} : \pi(j) \in N_1, j < i\}$$

e $\overline{s}^0_{\pi(i)}$ *e* $\overline{s}^1_{\pi(i)}$*, respectivamente, a soma dos no máximo* m *maiores valores dos conjuntos*

$$\{-\frac{1}{2} c^-_{\pi(j)\pi(i)} : \pi(j) \in N_1, j < i\}, \quad \{-\frac{1}{2} c^-_{\pi(j)\pi(i)} : (\pi(j) \in N_1, j < i) \text{ ou } j > i\}.$$

Então as desigualdades

$$t \leq \sum_{\pi(i)\in N_0}\left(s^0_{\pi(i)} + \sum_{\substack{\pi(j)\in N_0\\ j<i}} -\frac{1}{2}c^-_{\pi(j)\pi(i)} + \sum_{j>i} -\frac{1}{2}c^-_{\pi(j)\pi(i)}\right)x_{\pi(i)} + \sum_{\pi(i)\in N_0}\overline{s}^0_{\pi(i)}\overline{x}_{\pi(i)}$$
$$+ \sum_{\pi(i)\in N_1}\left(s^1_{\pi(i)} + \sum_{\substack{\pi(j)\in N_0\\ j<i}} -\frac{1}{2}c^-_{\pi(j)\pi(i)}\right)x_{\pi(i)} + \sum_{\pi(i)\in N_1}\overline{s}^1_{\pi(i)}\overline{x}_{\pi(i)}, \tag{7}$$

para todo $\pi \in S_n$ *e todo* $(N_0, N_1) \in \mathcal{N}$*, são válidas para* (1)-(4).

Demonstração. Seja (x,t) viável para (1)-(4). Pelo Teorema 3, $(x,t) \in Z$ e, logo, $t \leq Q(x) = \sum_i \sum_{j<i} c^+_{\pi(j)\pi(i)}x_{\pi(j)}x_{\pi(i)} + \sum_i \sum_{j<i} -\frac{1}{2}c^-_{\pi(j)\pi(i)}(\overline{x}_{\pi(j)}x_{\pi(i)} + x_{\pi(j)}\overline{x}_{\pi(i)})$. Note que

$$\begin{aligned}
Q(x) = &\sum_i \sum_{\substack{j<i\\ \pi(j)\in N_1}} c^+_{\pi(j)\pi(i)}x_{\pi(j)}x_{\pi(i)} + \sum_i \sum_{\substack{j<i\\ \pi(j)\in N_0}} c^+_{\pi(j)\pi(i)}x_{\pi(j)}x_{\pi(i)}\\
&+ \sum_{\pi(i)\in N_0}\sum_{\substack{j<i\\ \pi(j)\in N_0}} -\frac{1}{2}c^-_{\pi(j)\pi(i)}\overline{x}_{\pi(j)}x_{\pi(i)} + \sum_{\pi(i)\in N_1}\sum_{\substack{j<i\\ \pi(j)\in N_0}} -\frac{1}{2}c^-_{\pi(j)\pi(i)}\overline{x}_{\pi(j)}x_{\pi(i)} + \sum_i\sum_{\substack{j<i\\ \pi(j)\in N_1}} -\frac{1}{2}c^-_{\pi(j)\pi(i)}\overline{x}_{\pi(j)}x_{\pi(i)}\\
&+ \sum_{\pi(i)\in N_0}\sum_{\substack{j<i\\ \pi(j)\in N_1}} -\frac{1}{2}c^-_{\pi(j)\pi(i)}x_{\pi(j)}\overline{x}_{\pi(i)} + \sum_{\pi(i)\in N_1}\sum_{\substack{j<i\\ \pi(j)\in N_1}} -\frac{1}{2}c^-_{\pi(j)\pi(i)}x_{\pi(j)}\overline{x}_{\pi(i)} + \sum_i\sum_{\substack{j<i\\ \pi(j)\in N_0}} -\frac{1}{2}c^-_{\pi(j)\pi(i)}x_{\pi(j)}\overline{x}_{\pi(i)}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
= &\sum_i \sum_{\substack{j<i\\ \pi(j)\in N_1}} c^+_{\pi(j)\pi(i)}x_{\pi(j)}x_{\pi(i)} + \sum_{\pi(i)\in N_0}\sum_{j>i} c^+_{\pi(j)\pi(i)}x_{\pi(j)}x_{\pi(i)}\\
&+ \sum_{\pi(i)\in N_0}\sum_{\substack{j<i\\ \pi(j)\in N_0}} -\frac{1}{2}c^-_{\pi(j)\pi(i)}\overline{x}_{\pi(j)}x_{\pi(i)} + \sum_{\pi(i)\in N_1}\sum_{\substack{j<i\\ \pi(j)\in N_0}} -\frac{1}{2}c^-_{\pi(j)\pi(i)}\overline{x}_{\pi(j)}x_{\pi(i)} + \sum_{\pi(i)\in N_1}\sum_{j>i} -\frac{1}{2}c^-_{\pi(j)\pi(i)}x_{\pi(j)}\overline{x}_{\pi(i)}\\
&+ \sum_{\pi(i)\in N_0}\sum_{\substack{j<i\\ \pi(j)\in N_1}} -\frac{1}{2}c^-_{\pi(j)\pi(i)}x_{\pi(j)}\overline{x}_{\pi(i)} + \sum_{\pi(i)\in N_1}\sum_{\substack{j<i\\ \pi(j)\in N_1}} -\frac{1}{2}c^-_{\pi(j)\pi(i)}x_{\pi(j)}\overline{x}_{\pi(i)} + \sum_{\pi(i)\in N_0}\sum_{j>i} -\frac{1}{2}c^-_{\pi(j)\pi(i)}\overline{x}_{\pi(j)}x_{\pi(i)}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
= &\sum_{\substack{\pi(i)\in N_0\\ x_{\pi(i)}=1}}\left(\sum_{\substack{\pi(j)\in N_0\\ j<i}} -\frac{1}{2}c^-_{\pi(j)\pi(i)}\overline{x}_{\pi(j)} + \sum_{\substack{\pi(j)\in N_1\\ j<i}} c^+_{\pi(j)\pi(i)}x_{\pi(j)} + \sum_{j>i} -\frac{1}{2}c^-_{\pi(j)\pi(i)}\overline{x}_{\pi(j)} + \sum_{j>i} c^+_{\pi(j)\pi(i)}x_{\pi(j)}\right)x_{\pi(i)}\\
&+ \sum_{\substack{\pi(i)\in N_0\\ x_{\pi(i)}=0}}\left(\sum_{\substack{\pi(j)\in N_1\\ j<i}} -\frac{1}{2}c^-_{\pi(j)\pi(i)}x_{\pi(j)}\right)\overline{x}_{\pi(i)}\\
&+ \sum_{\substack{\pi(i)\in N_1\\ x_{\pi(i)}=1}}\left(\sum_{\substack{\pi(j)\in N_0\\ j<i}} -\frac{1}{2}c^-_{\pi(j)\pi(i)}\overline{x}_{\pi(j)} + \sum_{\substack{\pi(j)\in N_1\\ j<i}} c^+_{\pi(j)\pi(i)}x_{\pi(j)}\right)x_{\pi(i)}\\
&+ \sum_{\substack{\pi(i)\in N_1\\ x_{\pi(i)}=0}}\left(\sum_{\substack{\pi(j)\in N_1\\ j<i}} -\frac{1}{2}c^-_{\pi(j)\pi(i)}x_{\pi(j)} + \sum_{j>i} -\frac{1}{2}c^-_{\pi(j)\pi(i)}x_{\pi(j)}\right)\overline{x}_{\pi(i)}
\end{aligned}$$

Como $\sum_j x_j = m$, há no máximo $m-1$ ou m variáveis $x_{\pi(j)}$, $j \neq i$, iguais a 1, dependendo se $x_{\pi(i)} = 1$ ou $x_{\pi(i)} = 0$, respectivamente. Assim, calculando o máximo valor de cada termo entre parênteses na expressão de $Q(x)$ logo acima, obtemos os coeficientes da desigualdade (7). Obserque que, em cada um desses termos, todos os coeficientes são não negativos e os conjuntos de índices dos somatórios são disjuntos (em particular, os dois últimos somatórios do primeiro termo são indexados por $j > i$, porém temos $c^-_{\pi(j)\pi(i)} = 0$ ou $c^+_{\pi(j)\pi(i)} = 0$). Dessa forma, o máximo é obtido fazendo $\overline{x}_{\pi(j)} = 1$ sempre, e um subconjunto de até m (se $x_{\pi(i)} = 0$) ou $m-1$ (se $x_{\pi(i)} = 1$) variáveis $x_{\pi(j)} = 1$, correspondendo às variáveis com os maiores coeficientes. $\square$

Observe que os coeficientes em (7) não menores ou iguais aos correspondentes em (6). Logo, as desigualdades (7) são um fortalecimento daquelas em (6).

6. Experimentos Computacionais

Os experimentos computacionais foram conduzidos para testar a qualidade do limite superior LS, obtido quando relaxamos a integralidade das formulações F_2, F_3, F_m e $(F_1)^\pi_t$. Para isso utilizamos 60 instâncias geradas por Macambira e Souza [2000], a partir dos parâmetros $k \in \{1, \ldots, 5\}$, $r \in (0, 1]$, $n \in \{40, 42, 44, 45, 46, 48\}$ e $m = \lfloor n/2 \rfloor$. Eles estão divididas em dois grupos. O primeiro conjunto consiste de 30 combinações (n, k), sendo os pesos das arestas positivos, gerados aleatoriamente no intervalo $1 \leq c_{ij} \leq 1000r^k (1 \leq c_{ij} \leq 1000)$. O segundo conjunto consiste de 30 combinações (n, k), onde os pesos das arestas podem ser positivos ou negativos, gerados aleatoriamente no intervalo $-1000r^k \leq c_{ij} \leq 1000r^k (-1000 \leq c_{ij} \leq 1000)$.

Calculamos para cada uma das formulações relaxadas o (GAP = $\frac{LS-ML}{ML} \times 100$), onde ML é a solução ótima para o problema disponível em Macambira e Souza [2000], e a quantidade de restrições, NRG, geradas na obtenção de LS. Para implementar as formulações lineares relaxadas, usamos o software comercial IBM/ILOG CPLEX 12.7 integrado com Ambiente de Desenvolvimento Integrado (IDE - Integrated Development Environment) *Code::Blocks* utilizando a linguagem C++. Os experimentos foram realizados em um processador Intel® Core™ $i5-4570$ com 3.20 GHz, 16 GB RAM e sistema operacional Ubuntu 16.04 LTS.

As tabelas 2 e 3 sumarizam os resultados obtidos por cada formulação para as instâncias positivas e positivas/negativas, respectivamente, onde cada linha a partir da 3 apresenta o GAP e NRG para cada par (n, k). Destacamos em negrito os melhores resultados, conforme descrição dos experimentos. Com relação ao conjunto de instâncias mistas, os resultados mostram que a *t*–linearização obteve limites mais apertados com relação a F_m, F_2 e F_3 em todas as combinações de (n, k) do referido conjunto. Já em relação ao conjunto de instâncias com custos positivos, percebe-se uma certa competitividade na obtenção dos limites entre $(F_1)^\pi_t$ e F_m. É importante notar que usamos as restrições fortalecidas em $(F_1)^\pi_t$, conforme teoremas 5 e 6.

A Figura 1 mostra a comparação dos gap médios obtidos, quando fixamos o n e variamos o k, pelas relaxações F_m, F_2, F_3 e $(F_1)^\pi_t$ para as instâncias positivas e positivas/negativas. Os gráficos dos dois conjuntos de instâncias mostram que a relaxação $(F_1)^\pi_t$ obteve em média os melhores limites dentre as relaxações testadas nas instâncias mistas. Já a Figura 2 mostra o comparativo da quantidade de restrições entre $(F_1)^\pi_t$ e F_3. Podemos observar vantagem para $(F_1)^\pi_t$ na geração média de restrições das instâncias positivas; por outro lado, nas instâncias mistas, a relaxação $(F_1)^\pi_t$ usou quantidade maior de restrições. Esse fato está diretamente relacionado com a melhor qualidade dos limites gerados por $(F_1)^\pi_t$.

7. Conclusão

Nesse artigo, enunciamos teoremas que generalizam a técnica da *t*–linearização, inicialmente proposta por Rodrigues et al. [2012], aplicada a problemas quadráticos binários onde os coeficientes dos termos quadráticos são não-negativos. Aplicamos a técnica ao problema da clique ponderada em arestas (MEWCP), tendo em vista que o mesmo possui uma formulação com função objetivo quadrática. Mostramos como gerar restrições fortalecidas para o MEWCP, quando consideramos a restrição de cardinalidade, estendendo a técnica utilizada inicialmente por Rodrigues [2010] no problema da mochila quadrático.

Ficou claro pelos resultados que a t-linearização obteve os melhores gaps (porém ainda grandes) em todas as instâncias mistas. Também nas instâncias com custos positivos, essa formulação obteve gap médio comparável ao melhor (de F_m), usando o menor número de restrições entre todas as formulações. Vale mencionar que, para as instâncias mistas, F_3 usou o menor número de restrições, porém resultou no maior gap médio. Pretendemos estender a técnica da t–linearização para aplicá-la em um método de branch-and-bound. Para isso, vamos incorporar e desenvolver outros elementos, tais como propriedades de podas e uma boa heurística.

Tabela 2: GAP e NRG obtidos pelas relaxações F_m, F_2, F_3 e $(F_1)_t^{\pi}$ nas instâncias positivas

n	k	*Positiva*	F_m		F_2		F_3		$(F_1)_t^{\pi}$	
		Valor Ótimo	GAP(%)	NRG	GAP(%)	NRG	GAP(%)	NRG	GAP(%)	NRG
40	1	109346	**50.69**	1599	71.14	1560	71.28	78	55.69	**18**
	2	82451	**37.21**	1599	48.18	1560	49.63	78	42.95	**16**
	3	68759	**43.13**	1599	51.55	1560	51.95	78	48.64	**15**
	4	60782	**44.35**	1599	48.80	1560	50.52	78	46.72	**17**
	5	60513	**34.17**	1599	36.50	1560	40.92	78	35.39	**17**
42	1	120299	**46.12**	1763	71.68	1722	72.00	82	56.67	**21**
	2	87810	**44.12**	1763	60.03	1722	60.23	82	53.01	**18**
	3	76554	**40.72**	1763	50.65	1722	54.05	82	46.97	**18**
	4	69482	**37.05**	1763	41.08	1722	43.16	82	39.22	**16**
	5	67383	35.75	1763	36.99	1722	40.15	82	**35.01**	**20**
44	1	136525	**45.11**	1935	67.70	1892	67.80	86	52.47	**22**
	2	98186	**48.18**	1935	59.52	1892	60.42	86	53.69	**22**
	3	84675	**41.06**	1935	48.23	1892	51.18	86	44.40	**17**
	4	75274	**42.80**	1935	47.29	1892	48.98	86	45.73	**15**
	5	69540	**37.54**	1935	39.87	1892	42.02	86	38.21	**15**
45	1	138694	**51.42**	2044	74.52	1980	74.96	88	56.79	**23**
	2	98321	**51.19**	2044	62.24	1980	63.26	88	55.27	**18**
	3	82743	**44.59**	2044	53.25	1980	54.13	88	49.18	**17**
	4	77500	**44.30**	2044	48.86	1980	50.71	88	45.64	**20**
	5	69563	48.20	2044	49.28	1980	51.25	88	**46.35**	**15**
46	1	142985	**51.91**	2135	72.66	2070	73.38	90	57.79	**25**
	2	108243	**47.06**	2135	60.80	2070	62.38	90	54.05	**22**
	3	94859	**41.20**	2135	50.50	2070	52.99	90	46.28	**19**
	4	78747	**46.97**	2135	51.98	2070	52.97	90	49.03	**16**
	5	72431	47.82	2135	49.03	2070	51.32	90	**46.90**	**16**
48	1	163397	**49.22**	2303	71.38	2256	72.14	94	55.55	**24**
	2	115471	**51.43**	2303	62.91	2256	64.49	94	55.87	**23**
	3	96666	**48.39**	2303	53.29	2256	55.15	94	49.07	**18**
	4	88728	**43.32**	2303	46.16	2256	50.57	94	43.87	**20**
	5	82117	41.66	2303	41.91	2256	44.14	94	**39.31**	**19**
Média Geral			44.56	1963.2	54.26	1913.33	55.94	86.33	48.19	**18.73**

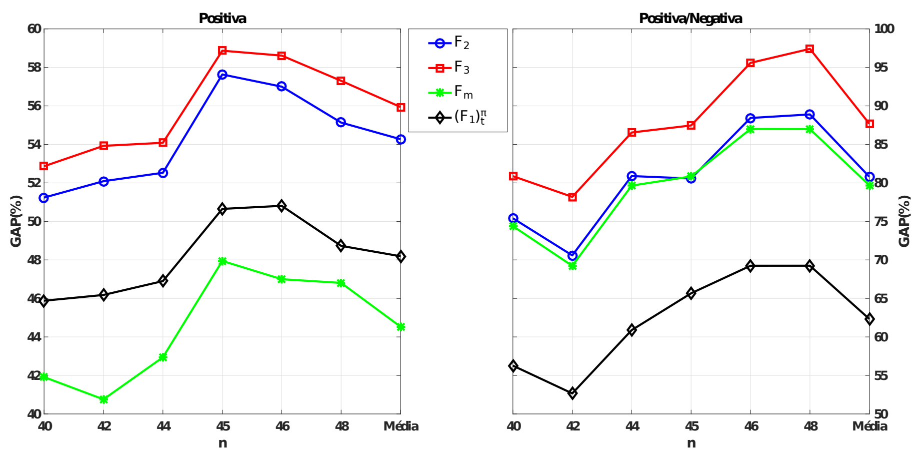

Figura 1: Comparação do GAP médio obtido por F_m, F_2, F_3 e $(F_1)_t^{\pi}$

Tabela 3: GAP e NRG obtidos pelas relaxações F_m, F_2, F_3 e $(F_1)_t^\pi$ nas instâncias posit/negat

n	k	*Posit/Negat* Valor Ótimo	F_m GAP(%)	F_m NRG	F_2 GAP(%)	F_2 NRG	F_3 GAP(%)	F_3 NRG	$(F_1)_t^\pi$ GAP(%)	$(F_1)_t^\pi$ NRG
40	1	70348	84.99	2380	90.10	2340	92.02	**78**	**83.11**	310
	2	45404	67.21	2380	67.21	2340	73.47	**78**	**52.22**	105
	3	34091	81.80	2380	81.80	2340	85.60	**78**	**60.12**	175
	4	27758	78.83	2380	78.83	2340	85.58	**78**	**53.59**	154
	5	27967	59.09	2380	59.09	2340	67.68	**78**	**32.30**	205
42	1	81633	77.68	2625	84.46	2583	87.24	**82**	**74.35**	234
	2	46828	87.64	2625	87.64	2583	93.73	**82**	**71.50**	224
	3	36689	78.53	2625	78.53	2583	86.86	**82**	**57.52**	161
	4	35987	53.45	2625	53.45	2583	61.67	**82**	**32.96**	180
	5	35460	48.83	2625	48.83	2583	61.41	**82**	**26.96**	288
44	1	90620	77.48	2882	83.42	2838	85.06	**86**	**73.00**	328
	2	56960	77.48	2882	77.74	2838	81.51	**86**	**63.90**	144
	3	40697	77.95	2882	77.95	2838	90.10	**86**	**56.44**	243
	4	32601	86.09	2882	86.09	2838	90.96	**86**	**58.77**	229
	5	29407	79.22	2882	79.22	2838	85.08	**86**	**52.29**	204
45	1	102295	68.57	3015	77.76	2970	82.15	**88**	**67.88**	132
	2	55103	91.78	3015	87.52	2970	92.24	**88**	**75.27**	117
	3	43914	69.43	3015	67.37	2970	76.74	**88**	**53.85**	115
	4	33990	83.37	3015	81.55	2970	90.80	**88**	**61.72**	126
	5	30974	91.04	3015	88.63	2970	95.35	**88**	**69.60**	155
46	1	99550	76.07	3151	82.78	3105	84.95	**90**	**73.34**	678
	2	58361	88.15	3151	88.58	3105	95.49	**90**	**73.99**	185
	3	43915	89.28	3151	89.28	3105	100.15	**90**	**68.46**	155
	4	32968	96.21	3151	96.21	3105	101.88	**90**	**71.19**	126
	5	31000	85.30	3151	85.30	3105	95.46	**90**	**59.21**	187
48	1	113478	**76.05**	3432	85.17	3384	87.60	**94**	**74.08**	549
	2	61768	95.93	3432	96.33	3384	98.39	**94**	**81.57**	220
	3	45941	82.52	3432	82.52	3384	93.62	**94**	**62.70**	148
	4	36903	85.03	3432	85.03	3384	96.29	**94**	**60.67**	206
	5	31351	95.39	3432	95.39	3384	111.10	**94**	**67.19**	165
Média Geral			79.68	2941.2	80.79	2870	87.67	**86.33**	**62.33**	214.93

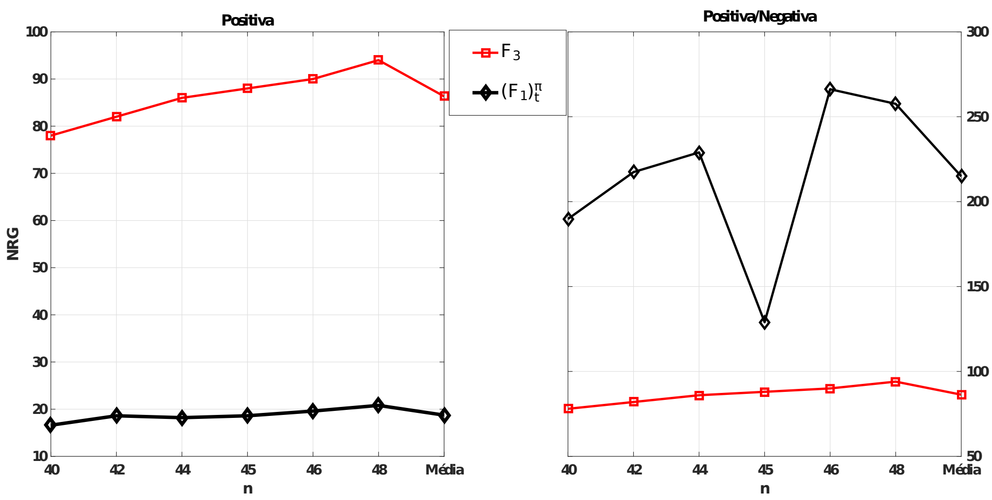

Figura 2: Comparação do NRG médio obtido por $(F_1)_t^\pi$ e F_3

Referências

Alidaee, B., Glover, F., Kochenberger, G., e Wang, H. (2007). Solving the maximum edge weight clique problem via unconstrained quadratic programming. *European Journal of Operational Research*, 181(2):592–597.

Billionnet, A. (2005). Different formulations for solving the heaviest k-subgraph problem. *INFOR: Information Systems and Operational Research*, 43(3):171–186.

Bonomo, F., Marenco, J., Sabán, D., e Stier-Moses, N. (2009). A polyhedral study of the maximum edge subgraph problem. *Electronic Notes in Discrete Mathematics*, 35:197–202.

Dijkhuizen, G. e Faigle, U. (1993). A cutting-plane approach to the edge-weighted maximal clique problem. *European Journal of Operational Research*, 69(1):121 – 130. ISSN 0377-2217. URL `http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0377221793900977`.

Feige, U., Peleg, D., e Kortsarz, G. (2001). The dense k-subgraph problem. *Algorithmica*, 29(3): 410–421.

Glover, F. (1975). Improved linear integer programming formulations of nonlinear integer problems. *Management Science*, 22(4):455–460.

Glover, F. e Woolsey, E. (1974). Converting the 0-1 polynomial programming problem to a 0-1 linear program. *Operations research*, 22(1):180–182.

Kuo, C.-C., Glover, F., e Dhir, K. S. (1993). Analyzing and modeling the maximum diversity problem by zero-one programming. *Decision Sciences*, 24(6):1171–1185.

Macambira, E. M. (2002). An application of tabu search heuristic for the maximum edge-weighted subgraph problem. *Annals of Operations Research*, 117(1-4):175–190.

Macambira, E. M. e Souza, C. C. d. (2000). The edge-weighted clique problem: valid inequalities, facets and polyhedral computations. *European Journal of Operational Research*, 123(2):346–371.

Martí, R., Gallego, M., e Duarte, A. (2010). A branch and bound algorithm for the maximum diversity problem. *European Journal of Operational Research*, 200(1):36–44.

Ravi, S. S., Rosenkrantz, D. J., e Tayi, G. K. (1994). Heuristic and special case algorithms for dispersion problems. *Operations Research*, 42(2):299–310.

Rodrigues, C. D. (2010). *Abordagens híbridas na solução de problemas de programação inteira da teoria e prática*. PhD thesis, Universidade Federal do Ceará e Université d'Avignon.

Rodrigues, C., Quadri, D., Michelon, P., e Gueye, S. (2012). 0-1 quadratic knapsack problems: an exact approach based on a t-linearization. *SIAM Journal on Optimization*, 22(4):1449–1468.

Soares, P., Campêlo, M., Rodrigues, C. D., e Michelon, P. (2017). t-linearizalização de funções quadráticas de variáveis binárias. *Anais do XLIX SBPO*, p. 2569–2580.

Sørensen, M. M. (2004). New facets and a branch-and-cut algorithm for the weighted clique problem. *European Journal of Operational Research*, 154(1):57–70.