Proposta de um algoritmo Hill-Climbing para resolução do Problema de Designação Quadrática

Yasmin Figueiredo Ramos, Stephanie Luri Kacuta, Douglas Martins de Souza Rosa, Daniele Gonçalves de Toledo Luchetta Raminelli, Rafael Henrique Palma Lima

Resumo: Este trabalho propõe um algoritmo Hill-Climbing para a resolução do Problema de Designação Quadrática (QAP). O QAP tem como objetivo a alocação de n instalações em um conjunto de possíveis localidades já conhecidas, a fim de minimizar o custo total de todas as movimentações entre as instalações. O algoritmo proposto se baseia no método de busca na vizinhança, que se inicia com uma solução aleatória e, em seguida, executa buscas na vizinhança até que um ótimo local seja encontrado. O algoritmo foi implementado na linguagem Microsoft VBA. O método de geração de vizinhança implementado para o QAP foi o de troca de três pontos, o qual gera cinco soluções vizinhas para cada solução candidata. O algoritmo foi testado em 29 instâncias encontradas na literatura e o desempenho foi satisfatório quando comparado com os melhores valores conhecidos para essas instâncias. Em 9 instâncias foi obtida a solução ótima e o GAP médio considerando todas as 29 instâncias foi de 8,0%. O *gap* máximo encontrado foi de 35,8% em relação à melhor solução conhecida. Os desvios mais altos foram encontrados nas instâncias de tamanho 20 e 25, porém, foi possível observar que não houve relação direta entre o desempenho do algoritmo e o tamanho da instância.

Palavras chave: Hill Climbing, Designação Quadrática, QAP.

Proposal of a Hill-Climbing Algorithm for Quadratic Designation Problem Resolution

Abstract: This work proposes a Hill-Climbing algorithm for solving the quadratic designation problem (QAP). The QAP has as its objective the allocation of n facilities in a set of possible known localities, in order to minimize the total cost of all movements between installations. The proposed algorithm is based on the neighborhood search method, which starts with a random solution and then executes searches in the vicinity until a great location is found. The algorithm was implemented in the Microsoft VBA language. The neighborhood generation method implemented for the QAP was the three-point exchange, which generates five neighboring solutions for each candidate solution. The algorithm was tested in 29 instances found in the literature and the performance was satisfactory when compared to the best-known values for these instances. In 9 instances, the optimal solution was obtained and the mean GAP considering all 29 instances was 8.0%. The maximum *gap* found was 35.8% in relation to the best-known solution. The highest deviations were found in size 20 and 25. However, it was possible to observe that there is no direct relationship between the performance of the algorithm and the size of the instance.

Keywords: Hill Climbing, Quadratic Assignment, QAP.

1. Introdução

O objetivo do Problema de Designação Quadrática (QAP) é alocar n instalações em um conjunto de n possíveis localidades previamente conhecidas, minimizando o custo total com movimentações entre as instalações. Os fluxos entre todos os pares de instalações são conhecidos e chamados de fij. As distâncias (custos de movimentação unitários) entre as n localidades são conhecidos e chamados de dij. Para tal problema ainda não se conhece um algoritmo eficiente que apresente uma resolução exata. Essa dificuldade o classifica como NP-difícil (GAREY & JOHNSON, 1979).

Os métodos que utilizam a metaheurística para solução de problemas tem sido cada vez mais utilizados, inclusive problemas com significados práticos reais, abrangendo ramos dentro de planejamento de recursos, telecomunicações, parte de problemas com gerenciamento, análises biomédicas, fabricação flexível, exploração de minérios, dentre outras aplicações. Podemos citar como exemplos de metaheurísticas os métodos de Simulated Annealing, Tabu Search, Algoritmos Genéticos e os Algoritmos de Busca Local que será o método utilizado para análise deste estudo. O método de Busca Local engloba técnicas de otimização de soluções como o Hill Climbing, Iterated Local Search (ILS), Variable Neighborhood Search (VNS). Como técnica de Busca Local, neste trabalho foram analisados o Hill Climbing e os métodos para aplicação de algoritmos de geração de vizinhança para alcançar as soluções ótimas das instâncias dadas.

A proposta inicial para solucionar o problema foi feita por Koopmans & Beckmann (1957) em uma abordagem de atividades econômicas. É tida como a formulação clássica do problema e baseia-se em programação linear inteira. Visto que encontrar a solução ótima para o problema QAP mostra-se como um grande desafio e que os métodos de solução exatos apresentam elevados custos computacionais, a abordagem por meio de heurísticas e metaheurísticas é mais conveniente. Karish (1995) apresentou abordagens não lineares para o QAP, as quais fornecem os limites inferiores mais fortes para instâncias de problemas cuja matriz de distância contém distâncias de uma grade retangular e para problemas gerais de tamanhos menores. Já em 2006, Stützle apresentou e analisou a aplicação da ILS (Iterated local search) para o problema de designação quadrática (STÜTZLE, 2006). Outros exemplos e técnicas foram utilizados ao longo dos anos.

O objetivo do presente trabalho é o de desenvolver um algoritmo em Microsoft VBA partindo do Hill-Climbing. Também é objetivo testar o desempenho do algoritmo utilizando algumas instâncias comumente citadas na literatura.

A estrutura do trabalho está organizada da seguinte maneira:

- A seção 2 fornece uma breve explicação sobre o que seria o problema de QAP, a ilustração do que é o problema, qual é a solução ótima buscada, a modelagem matemática do problema e suas explicações;
- A seção 3 descreve o método utilizado para resolver o problema, o algoritmo proposto, os caminhos que foram necessários para a conclusão do algoritmo, quais as formas de representação da solução, o método para a geração da solução inicial, como foi realizado o método da avaliação da qualidade e qual foi o método implementado para a geração de vizinhança;
- Na seção 4 tem-se os resultados computacionais gerados pelas iterações e uma breve discussão para a conclusão das análises realizadas.

2. Problema de Designação Quadrática (ou QAP de Quadratic Assignment Problem)

O Problema de Designação Quadrática (ou QAP, de Quadratic Assignment Problem) consiste em encontrar o posicionamento ótimo em casos de designação de instalações a localidades pré-definidas, levando-se em conta as distâncias entre as localidades e os níveis de interação entre as instalações. Originalmente, Koopmans e Beckmann (1957) propuseram discussões matemáticas referentes aos problemas de alocação de recursos indivisíveis no contexto econômico.

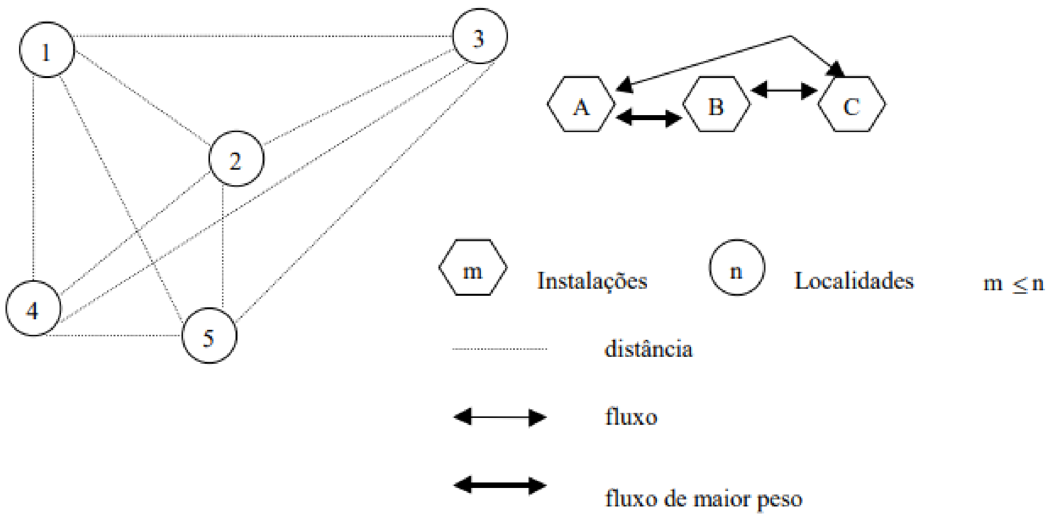
Por meio do QAP (*Quadratic Assignment Problem*) diversas aplicações práticas e importantes podem ser modeladas. Entre elas, temos os seguintes exemplos:

- Elshafei (1977) em um projeto arquitetural de planejamento hospitalar;
- Francis et al. (1992) com um *framework* para a atribuição de facilidades e locações;
- Heffley (1980) em problemas econômicos;
- Hubert (1986) em análises estatísticas.

Uma motivação adicional para a pesquisa e o desenvolvimento de técnicas para a resolução do QAP é o fato de que este problema faz parte da classe NP-difícil (GAREY & JOHNSON, 1979). Tal classe é composta de problemas para os quais é improvável a existência de um algoritmo eficiente que os resolva exatamente. Instâncias da ordem de N > 30 facilidades não podem, em geral, ser resolvidas de forma exata em um tempo computacional aceitável utilizando máquinas comerciais.

2.1 Ilustração do QAP

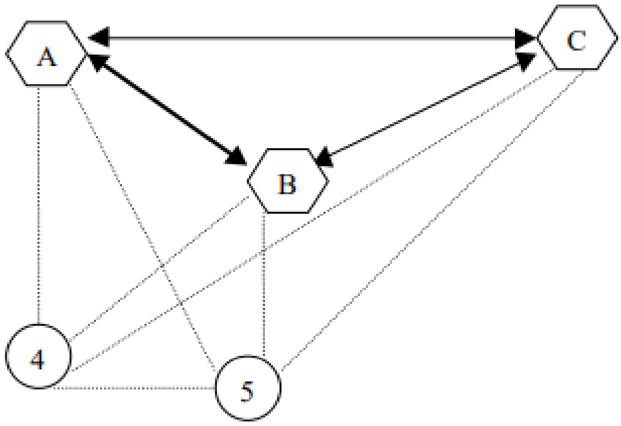
O Problema de Designação Quadrática pode ser ilustrada como no exemplo presente na Figura 1 abaixo, onde o número n de localizações são iguais a cinco, com três instalações necessárias e três fluxos de diferentes proporções que estão representadas por flechas, sendo que a sua espessura expressa o seu peso.



Fonte: Maia (2001)

Figura 1 - Ilustração de um exemplo QAP

Tendo em vista que as possibilidades para a alocação das instalações nos locais em questão são diversas, podemos utilizar como exemplo de uma solução factível a solução ilustrada pela Figura 2.



Fonte: Maia (2001)

Figura 2 - Ilustração de uma solução factível para a Figura 1

Na Figura 2 é possível observar que, na solução factível, as instalações A, B e C foram alocadas respectivamente nos locais 1, 2 e 3 juntamente aos seus fluxos de acordo com as suas instalações. Embora a solução seja factível, o QAP entra com o objetivo não só de encontrar as soluções factíveis mas sim de encontrá-las e otimizar as suas soluções de modo que o custo total envolvida na designação das instalações seja minimizada até alcançar a sua solução ótima.

2.2 Modelagem do Problema

A formulação do Quadratic Assignment Problem (QAP) original, desenvolvida em 1957 por Koopmans e Beckman, relaciona o fluxo (fik) e as distâncias (djn), as duas informações conhecidas. O objetivo é posicionar as ”n“ instalações que produzem produtos diferentes de forma a reduzir o custo final, visto que o cálculo é realizado de forma a considerar o fluxo pela distância percorrida, fazendo a somatória entre as matrizes de fluxo e distância encontramos o custo total do problema.

Equacionando o problema encontramos que o fik de cada local i para cada local k, com k diferente de i, e com djn de cada de cada local j para cada local n, com n diferente de j, o QAP atribui cada facilidade i a um local diferente j encontrando assim:

$$min \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} \sum_{\substack{k=1 \\ k\neq i}}^{N} \sum_{\substack{n=1 \\ n\neq j}}^{N} fik\,.djn.xij.xkn \qquad (1)$$

$$s.a. \quad \sum_{i=1}^{N} xij = 1 \;\; \forall\, j = 1, \dots, N \qquad (2)$$

$$\sum_{j=1}^{N} xij = 1 \;\; \forall\, i = 1, \dots, N \qquad (3)$$

$$xij \;\; \in \{0,1\} \;\forall\;\; i = 1, \dots, N; \;\; j = 1, \dots, N \qquad (4)$$

Na equação 1, o termo quadrático representa o custo entre as facilidades i e k, alocadas nos locais j e n, A equação 2 restringe a alocação de uma facilidade apenas para um local e a equação 3 limita a ocupação de um local para uma facilidade.

3. Algoritmo Proposto

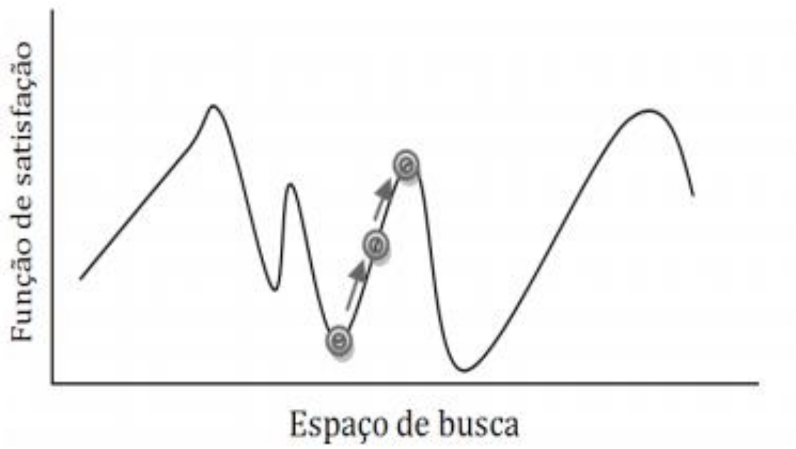
3.1 Método de Solução

O QAP está classificado como NP-difícil, dessa forma sua dificuldade e sua complexidade influenciam na criação de algoritmos eficientes o suficiente para resolver de forma exata os problemas encontrados de grande magnitude. Sendo assim nossa busca será na criação de um algoritmo tendo como base o Hill Climbing para aplicação nas instâncias que variam de ordem de doze elementos até trinta elementos.

A técnica de otimização denominado por Hill Climbing é uma técnica de busca local que baseia-se em otimizar as soluções através de iterações (BLUM & ROLI, 2003). A cada iteração almeja-se uma melhora, e se o novo ponto apresenta uma melhor solução, ele torna-se o ponto atual. O método se encerra quando nenhuma melhora significativa é encontrada ou após algum critério de parada ser atingido.

O algoritmo padrão utilizado pode ser descrito nos passos:

- Geração de uma solução aleatória inicial (na região factível do problema);
- Avaliação da qualidade da solução aplicada ao ponto atual, selecionando-se um dos vizinhos e comparando se houve melhora;
- Caso haja melhora, o ponto selecionado torna-se o atual.



Fonte: Freitas et al (2010)

Figura 3 - Gráfico de representação de Hill Climbing

3.2 Formas de representação da solução

A solução do algoritmo em questão foi representada por um vetor com n posições, composto pela permutação das n instalações, conforme exemplificado na Tabela 1 abaixo.

Exemplificação de Solução
5
4
6
12
2
10
1
11
7
9
8
3

Fonte: Dos Autores

Tabela 1 - Ilustração de solução para um problema com 12 instalações

A posição no vetor indica em qual localização uma determinada instalação foi alocada. Neste exemplo de solução para um problema de tamanho 12, a instalação 5 foi alocada na localização 1, a instalação 4 foi alocada na localização 2, a instalação 6 foi alocada na localização 3 e, assim sucessivamente, até a alocação da instalação 3 na localização 12.

3.3 Método para geração da solução inicial

Inicialmente, o algoritmo realiza a abertura da instância, que é composta por duas matrizes. A primeira se refere aos fluxos entre as n instalações e a segunda aponta a distância entre as n localidades. Ainda no algoritmo de abertura da instância, o tamanho da instância (qtdPontos) é lido com base na quantidade de instalações.

Para geração de uma solução aleatória, inicialmente é armazenado o maior valor que pode ser sorteado (iMax), que corresponde ao tamanho da instância. Em sequência, se cria um vetor de solução com n posições, para o qual é atribuído um número de forma ordenada. Dentro de um laço de repetição, um número aleatório idx é gerado, multiplicado por iMax e somado a uma unidade. Uma variável auxiliar recebe somente a parte inteira deste cálculo.
A posição da solução para o qual o contador do laço aponta recebe o valor da solução da posição idx. Na variável iMax se subtrai uma unidade. Este laço é executado até que todo o vetor tenha sido aleatorizado.

3.4 Método de avaliação da qualidade da solução

Para se realizar a avaliação da qualidade da solução, é necessário executar a leitura das matrizes de fluxos versus instalações (matFlux), distâncias versus localidades (matDist) e do vetor de solução em questão. Em sequência, se criou uma função para converter a matriz de distâncias versus localidades em distâncias versus instalações, para a qual foi atribuído o nome de matMap.

A função de avaliação de solução se inicia por meio da criação de uma variável de custo total igual a zero. Por se tratar de um cálculo matricial, as iterações ocorrem em base em dois

contadores i e j, para os quais se atribui de um até a quantidade de pontos do problema. Neste laço, o custo total recebe o produto entre matFlux(i, j) e matMap(i, j) somado ao custo total acumulado até a iteração anterior.
Para melhoria da visualização dos resultados, também foi elaborada uma função para cálculo dos custos unitários e um botão que executa a escrita desta matriz na planilha após a geração de uma solução aleatória.

3.5 Estrutura de Vizinhança

Para execução da heurística de Hill Climbing, inicialmente a solução corrente recebe uma solução aleatória gerada com base na quantidade de pontos do problema. Em sequência, a função que traça o mapeamento das distâncias versus instalações para esta determinada solução é chamada. O custo corrente recebe o custo total desta solução com base na solução corrente, na matriz de mapeamento de distâncias e na matriz de fluxos entre instalações.

Até que um ótimo local seja encontrado, uma função que encontra o melhor vizinho é chamada e o custo deste vizinho é novamente calculado. A vizinhança é percorrida com base em três contadores: i, que inicia em 1 e termina em qtdPontos - 2; j, que inicia em i + 1 e termina em qtdPontos - 1 e k, que inicia em j + 1 e termina em qtdPontos - 3.
Neste conjunto de loops, a função *'Troca3Pontos'* é chamada. Esta função gera cinco vizinhos possíveis com base na troca de posições coordenadas pelos contadores i, j e k. Abaixo, segue a exemplificação de cinco vizinhos gerados a partir dos contadores i = 1, j = 2 e k = 3.

Solução Original	Vizinho 1	Vizinho 2	Vizinho 3	Vizinho 4	Vizinho 5
5	5	4	4	6	6
4	6	5	6	5	4
6	4	6	5	4	5
12	12	12	12	12	12
2	2	2	2	2	2
10	10	10	10	10	10
1	1	1	1	1	1
11	11	11	11	11	11
7	7	7	7	7	7
9	9	9	9	9	9
8	8	8	8	8	8
3	3	3	3	3	3

Fonte: Dos Autores

Tabela 2 - Exemplificação de geração de vizinhos por meio do algoritmo Troca 3-Pontos

Esta função retorna somente o vizinho que apresentou custo inferior. Na função *'EncontraMelhorVizinho',* o custo deste vizinho é atribuído e comparado continuamente ao melhor custo obtido até o determinado momento. Esta função é executada até que os limitadores dos três contadores (i, j, k) sejam atingidos e retorna somente o melhor vizinho após execução de todo o conjunto de iterações. A geração de vizinhança proposta foi inspirada na estrutura 2-exchange, mas com uma alteração da quantidade de pontos a ser utilizada para a permutação.

Caso o custo deste vizinho seja inferior ao custo corrente, esta solução se torna a corrente. Deste modo, passará a ser utilizada para geração de vizinhança. Quando o ótimo local for encontrado, se compara ao melhor custo obtido até o momento. Caso seja inferior, a melhor solução global recebe a solução corrente e o melhor custo global recebe o custo corrente.

Todos estes passos descrevem uma iteração do Hill Climbing. O algoritmo foi programado para executar as iterações do Hill Climbing em um tempo previsto de 90 segundos. Desta forma, as iterações foram executadas de forma contínua até que fosse atingido o critério de parada.

4. Resultados Computacionais

A quantidade de iterações a ser executada foi calculada com base em um tempo médio de execução do algoritmo por iteração para aquela determinada instância simulado a partir de uma pequena quantidade de iterações. Foi realizado um cálculo para executar iterações por aproximadamente 90 segundos, mas houve uma oscilação dos valores reais de tempo devido a esta estimativa.

Os resultados obtidos para as 29 instâncias propostas estão apresentados na Tabela 3 a seguir.

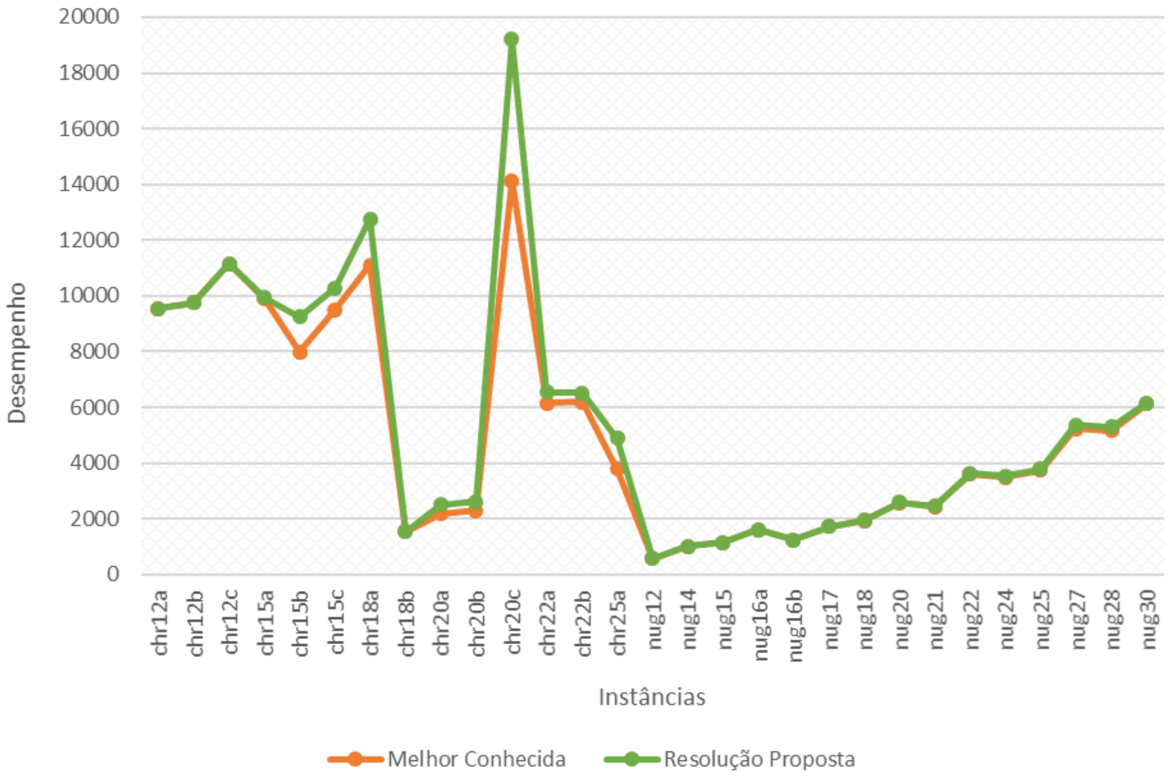
Instância	Melhor Conhecida	Tempo (s)	Valor Objetivo	Gap (%)	Iterações
chr12a	9552	159,03	9552	0,00%	241
chr12b	9742	89,08	9742	0,00%	135
chr12c	11156	149,91	11156	0,00%	244
chr15a	9896	172,18	9936	0,40%	70
chr15b	7990	165,38	9242	15,70%	65
chr15c	9504	293,16	10282	8,20%	119
chr18a	11098	237,55	12768	15,00%	30
chr18b	1534	225,09	1534	0,00%	30
chr20a	2192	245,95	2496	13,90%	30
chr20b	2298	227,07	2628	14,40%	30
chr20c	14142	352,66	19204	35,80%	20
chr22a	6156	296,04	6550	6,40%	10
chr22b	6194	261,50	6518	5,20%	10
chr25a	3796	542,10	4878	28,50%	15
nug12	578	95,55	578	0,00%	160
nug14	1014	113,81	1014	0,00%	70
nug15	1150	196,16	1150	0,00%	70
nug16a	1610	123,20	1612	0,10%	50
nug16b	1240	219,69	1240	0,00%	50
nug17	1732	236,62	1732	0,00%	40
nug18	1930	209,98	1944	0,70%	40
nug20	2570	138,14	2586	0,60%	15
nug21	2438	216,55	2464	1,10%	15
nug22	3596	348,46	3622	0,70%	10
nug24	3488	300,73	3528	1,10%	10
nug25	3744	287,24	3798	1,40%	7
nug27	5234	341,18	5372	2,60%	5

nug28	5166	417,38	5308	2,70%	5
nug30	6124	748,69	6156	0,50%	5

Fonte: Dos Autores

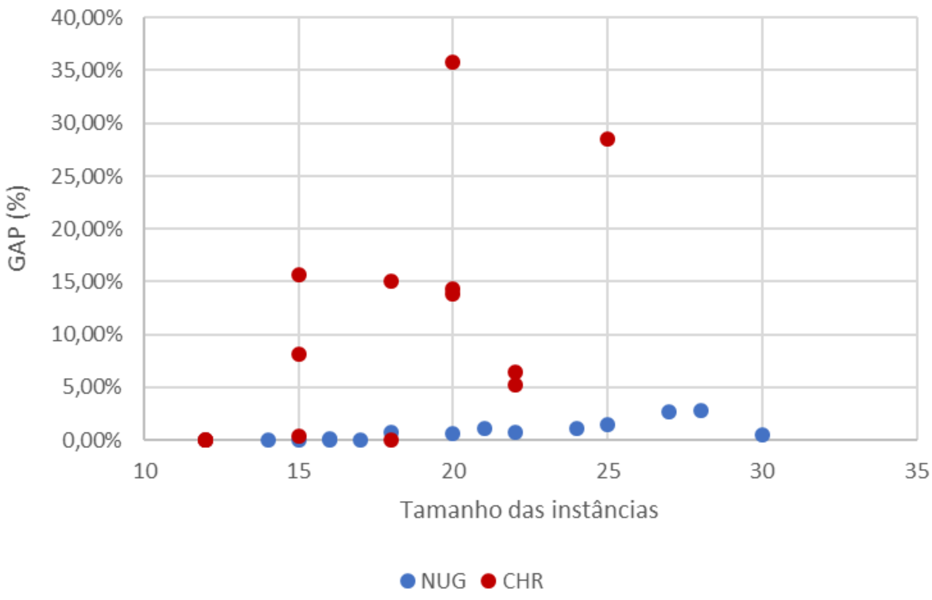
Tabela 3 - Resultados obtidos a partir da execução do algoritmo Hill Climbing com estrutura de vizinhança de Troca de 3 Pontos comparados à melhor solução conhecida

Também é possível visualizar estes dados graficamente, conforme consta nas Figuras 4 e 5 abaixo.



Fonte: Dos Autores

Figura 4 - Resultados obtidos a partir da execução do algoritmo Hill Climbing proposto comparados à melhor solução conhecida



Fonte: Dos Autores

Figura 5 – GAP decimal da solução proposta em relação aos tipos e tamanhos das instâncias

É possível observar que o método proposto atingiu o valor da melhor solução conhecida para 9 (31%) dentre as 29 instâncias sob avaliação, 11 instâncias apresentaram resultado de gap entre 0,1 e 3,0% e somente 2 instâncias apresentaram gap superior a 20%. Para estes casos, o baixo número de iterações não permitiu que a região de soluções viáveis fosse explorada suficientemente.

Vale pontuar que devido à complexidade da estrutura de vizinhança e da avaliação de qualidade deste tipo de problema, o tempo de execução do algoritmo por iteração foi significativamente alto. Isto levou a um baixo número de iterações executadas por instância, mas ainda assim, o algoritmo mostrou um grau relevante de eficácia.

Para que seja possível reduzir o tempo de execução deste algoritmo, se recomenda que a função de avaliação de qualidade seja ajustada para receber as matrizes de fluxos e distâncias originais, sem que haja necessidade de chamar, a cada geração de novo vizinho, a função de mapeamento de distâncias versus instalações.

Além disso, para se obter uma melhoria de performance, também se recomenda que seja implementada uma geração de solução aleatória mais complexa, que contemple uma probabilidade de sorteio com base nas matrizes de fluxos e distâncias lidas.

5. Conclusões

O estudo que teve como objetivo uma avaliação de meta-heurística para a resolução de Problemas de Designação Quadrática (QAP) foi alcançado de forma satisfatória. A avaliação foi realizada e o algoritmo proposto obteve uma performance melhor do que o esperado. A geração de vizinhança implementada possibilitou uma busca aprofundada de soluções vizinhas a cada iteração. Foi possível realizar a aplicação da técnica de otimização de Hill Climbing para a resolução do problema, nos levando a resultados que mostraram que dentre as 29 instâncias analisadas, o algoritmo proposto apresentou gap máximo de 35,8% em relação à melhor solução conhecida. Para 9 instâncias, apresentou GAP igual a 0% e o GAP médio considerando todas as instâncias foi de 8,0%. As instâncias que obtiveram maior desvio foram as de tamanho 20 e 25, porém, não houve relação direta entre a performance do algoritmo com o tamanho da instância.

Concluiu-se também que o desvio para a melhor solução conhecida ocorreu com maior distanciamento nas instâncias chr enquanto que nas instâncias nug os GAPs foram todos abaixo de 3,0%. Observa-se que este ponto possui relação com a complexidade das instâncias selecionadas.

Referências

BLUM, C., ROLI, A., **Metaheuristics in combinatorial optimization:** Overview and conceptual analysis, ACM Computing Surveys, Vol. 35, N 3, Setembro de 2003, pp. 268-308.

ELSHAFEI, A. N., Hospital layout as a quadratic assignment problem. **Journal of The Operational Research Society**, v. 28, n. 1, p. 167–179, 1977.

FRANCIS, R. L., McGINNIS, L. F. e White, J. A. **Facility layout and location: an analytical approach**. Prentice Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1992.

FREITAS,F. G. et al. Otimização em Teste de Software com Aplicação de Metaheurísticas. **Revista de Sistemas de Informação da FSMA**, Fortaleza, n.5, p. 3-13, 2010.

GAREY, M. R. e JOHNSON, D. S., **Computers and Intractability:** A Guide to the Theory of NP-Completeness, W. H. Freeman, 1979.

GOMES, A. **Uma Introdução a Busca Tabu.** São Paulo, 2009. Instituto de Matemática e Estatística.

HEFFLEY, D. R. Decomposition of the koopmans-beckmann problem. **Regional Science and Urban Economics**, v. 10, n. 4, p. 571–580, 1980.

HUBERT, L. **Assignment methods in combinatorial data analysis**. M. Dekker, New York, N.Y. ISBN0824776178 9780824776176, 1986.

KARISH, S. E. **Nonlinear Approaches for Quadratic Assignment and Graph Partition Problems**, Ph.D. Thesis, Technical University Graz, Austria, 1995.

KOOPMANS, T. C. e Beckmann, M.J., Assignment problems and the location of economic activities. **Econometrica**, 25, 53-76, 1957.

MAIA, T. D. **Uma avaliação de meta-heurísticas para o problema de designação quadrática**. São Carlos, 2001. Dissertação (Mestrado) - Universidade de São Paulo.

STÜTZLE, T. **Iterated local search for the quadratic assignment problem**, European Journal of Operational Research , Volume 174, Issue 3, 1 November 2006.

TJALLING, C., KOOPPMANS & MARTIN J. BECKMANN., "**Assignment Problems and the Location of Economic Activities,"** Cowles Foundation Discussion Papers 4, Cowles Foundation for Research in Economics, Yale University, 1955.