

OTIMIZAÇÃO POR CHAVES ALEATÓRIAS PARA PROGRAMAÇÃO QUADRÁTICA BINÁRIA

Érico Frohlich, Marcelo de Souza

INTRODUÇÃO

O problema da otimização quadrática binária irrestrita (ou QUBO, do inglês *Quadratic Unconstrained Binary Optimization*) constitui um modelo de otimização combinatória capaz de representar diversos problemas clássicos, como MaxCut, coloração de grafos e particionamento de conjuntos (Glover; Kochenberger; Du, 2019). Por se tratar de um problema NP-difícil, métodos exatos podem apresentar elevado custo computacional em instâncias de grande porte, tornando o emprego de metaheurísticas uma alternativa relevante para a obtenção de soluções de alta qualidade em tempo computacional aceitável (Kochenberger et al., 2014).

Entre os paradigmas de otimização aplicados a problemas combinatórios, a otimização por chaves aleatórias (RKO) realiza a busca em um espaço contínuo de valores reais, chamados de chaves aleatórias, enquanto um decodificador transforma cada vetor contínuo em uma solução do problema. Essa separação entre o mecanismo de busca e o conhecimento específico do problema permite integrar diferentes otimizadores sem modificar a estrutura do decodificador (CHAVES et al., 2025).

Nesse contexto, este trabalho propõe o RK-QUBO, um framework baseado em otimização por chaves aleatórias para a solução do QUBO. O objetivo é avaliar a capacidade do framework de obter soluções competitivas por meio da combinação de diferentes estratégias de decodificação e mecanismos de busca, comparando seu desempenho com algoritmos de referência da literatura.

DESENVOLVIMENTO

A pesquisa consistiu no desenvolvimento e na avaliação experimental do *framework* RK-QUBO, um resolutor baseado em chaves aleatórias para QUBO. Cada solução é representada por um vetor contínuo de chaves aleatórias, no qual parte dos valores codifica a solução candidata e os demais valores representam parâmetros usados na configuração do processo de decodificação. Dessa forma, o processo de otimização realiza simultaneamente a busca por soluções e pela configuração das estratégias empregadas na decodificação.

Foram implementadas três heurísticas construtivas: *Greedy by Marginal Cost* iniciando com uma solução nula (GMC0), *Greedy by Marginal Cost* iniciando da solução composta por todos os elementos selecionados (GMC1) e uma construção probabilística, cujas probabilidades para cada variável são dadas pelos valores das chaves aleatórias. Essas heurísticas foram combinadas em nove estratégias de decodificação, incluindo versões que empregam exclusivamente a construção da solução e versões que incorporam uma busca local com vizinhança 1-flip para seu refinamento.

A avaliação foi realizada usando dois mecanismos de otimização contínua: o RKO, que combina diferentes metaheurísticas em um processo cooperativo; e o NGOpt, disponibilizado pela plataforma Nevergrad (Rapin; Teytaud, 2018). A exploração das mesmas estratégias de decodificação nos dois mecanismos permitiu analisar a influência do otimizador contínuo sobre o desempenho da abordagem proposta e dos decodificadores.

Foram adotadas instâncias de *benchmark* da OR-Library (Beasley, 1990) com 1000 e 2500 variáveis. Cada algoritmo foi executado 20 vezes de forma independente, com limite de 60 segundos por execução. As métricas utilizadas foram a taxa de sucesso, correspondente à proporção de execuções que encontraram o melhor valor conhecido, e o desvio absoluto médio em relação à melhor solução conhecida. Os experimentos foram executados em um computador Dell OptiPlex

5080, equipado com processador Intel Core i7-10700, 16 GB de memória RAM e sistema operacional Ubuntu 24.04 LTS.

RESULTADOS

O RK-QUBO foi comparado com o algoritmo de busca local iterativa ILSBQP (Souza; Ritt, 2022) e com a heurística híbrida HHBQP (Souza; Ritt, 2018), além de serem comparadas as implementações baseadas nos otimizadores RKO e NGOpt. Os resultados detalhados são apresentados nas Tabelas 1 e 2, disponíveis nos anexos. Nas instâncias com 1000 variáveis, o RK-QUBO associado ao RKO apresentou desempenho superior ao ILSBQP e à implementação baseada no NGOpt, obtendo menores desvios em relação aos melhores valores conhecidos e encontrando essas soluções em diversas execuções. A versão baseada no NGOpt apresentou desempenho inferior, indicando que o mecanismo de otimização contínua exerce influência significativa sobre a qualidade das soluções produzidas.

Nas instâncias com 2500 variáveis, o aumento da dimensão reduziu a taxa de sucesso das abordagens avaliadas. Apesar disso, o RK-QUBO associado ao RKO manteve desempenho superior ao NGOpt e ao ILSBQP, apresentando menores desvios em relação aos melhores valores conhecidos. Entretanto, a heurística híbrida HHBQP permaneceu superior ao *framework* proposto na maior parte das instâncias avaliadas.

Os resultados indicam que o RK-QUBO é capaz de produzir soluções competitivas para instâncias de médio e grande porte, mantendo a vantagem de uma arquitetura modular. Por outro lado, a diferença de desempenho em relação ao HHBQP mostra uma limitação das estratégias de decodificação utilizadas e aponta para a necessidade de mecanismos mais especializados de construção e refinamento das soluções.

CONSIDERAÇÕES FINAIS

Este trabalho apresentou o RK-QUBO, um *framework* baseado no paradigma de otimização por chaves aleatórias para a solução do problema QUBO. A abordagem concentra o conhecimento específico do problema no decodificador e permite a integração de diferentes mecanismos de otimização contínua, proporcionando uma estrutura modular para a exploração do espaço de soluções.

Os experimentos demonstraram que o RK-QUBO associado ao RKO superou o algoritmo ILSBQP nas instâncias avaliadas, enquanto a comparação com o NGOpt permitiu verificar a influência do mecanismo de otimização sobre o desempenho do *framework*. Apesar desses resultados, a heurística HHBQP apresentou desempenho superior na maior parte das instâncias, indicando espaço para melhorias na abordagem proposta.

Como continuidade da pesquisa, destacam-se o desenvolvimento de decodificadores mais especializados, o aprimoramento dos procedimentos de busca local e a investigação de novas estratégias híbridas. Essas melhorias podem aumentar a competitividade do RK-QUBO e ampliar sua aplicabilidade a diferentes problemas de otimização binária.

Palavras-chave: otimização combinatória; metaheurísticas; otimização quadrática binária irrestrita.

ANEXOS

Tabela 1. Desempenho dos otimizadores nas instâncias com 1000 variáveis.

Instance	RK-QUBO + RKO		RK-QUBO + NGOpt		ILSBQP		HHBQP	
	success	adev	success	adev	success	adev	success	adev
bqp1000.1	5/20	99.95	3/20	992.55	1/20	528.05	20/20	0.00
bqp1000.2	12/20	29.70	4/20	655.55	1/20	1042.75	20/20	0.00
bqp1000.3	6/20	123.95	4/20	1152.60	2/20	1090.65	20/20	0.00
bqp1000.4	10/20	46.70	2/20	878.80	0/20	665.40	20/20	0.00
bqp1000.5	2/20	144.20	0/20	576.75	0/20	1100.20	19/20	0.20
bqp1000.6	1/20	205.00	0/20	1444.10	0/20	1207.40	20/20	0.00
bqp1000.7	6/20	134.95	1/20	1353.10	0/20	992.70	20/20	0.00
bqp1000.8	0/20	219.90	0/20	2445.40	0/20	1465.80	19/20	1.15
bqp1000.9	1/20	110.65	1/20	1055.15	1/20	1419.80	20/20	0.00
bqp1000.10	0/20	220.40	1/20	1084.40	1/20	939.70	20/20	0.00
Average	—	133.54	—	1163.84	—	1045.25	—	0.14

Tabela 2. Desempenho dos otimizadores nas instâncias com 2500 variáveis.

Instance	RK-QUBO + RKO		RK-QUBO + NGOpt		ILSBQP		HHBQP	
	success	adev	success	adev	success	adev	success	adev
bqp2500.1	0/20	4147.00	0/20	3710.55	0/20	9995.65	20/20	0.00
bqp2500.2	0/20	4131.00	0/20	4161.15	0/20	9342.95	18/20	20.50
bqp2500.3	0/20	3418.55	0/20	4728.50	0/20	10242.60	20/20	0.00
bqp2500.4	0/20	3198.95	0/20	3540.90	0/20	6971.75	20/20	0.00
bqp2500.5	0/20	2839.85	0/20	5674.40	0/20	7144.05	20/20	0.00
bqp2500.6	0/20	3350.50	0/20	3421.55	0/20	6459.15	20/20	0.00
bqp2500.7	0/20	4216.00	0/20	4630.45	0/20	9744.00	20/20	0.00
bqp2500.8	0/20	2454.25	0/20	2650.00	0/20	6719.30	20/20	0.00
bqp2500.9	0/20	3027.50	0/20	3942.60	0/20	8190.25	20/20	0.00
bqp2500.10	0/20	4421.05	0/20	5285.55	0/20	9777.55	18/20	26.00
Average	—	3520.47	—	4174.57	—	8458.73	—	4.65

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

BEASLEY, J. E. OR-library: Distributing test problems by electronic mail. *Journal of the Operational Research Society*, v. 41, n. 11, p. 1069–1072, 1990.

CHAVES, A. A.; RESENDE, M. G. C.; SCHUETZ, M. J. A.; BRUBAKER, J. K.; KATZGRABER, H. G.; DE ARRUDA, E. F.; SILVA, R. M. A. A random-key optimizer for combinatorial optimization. *Journal of Heuristics*, v. 31, n. 4, p. 32, 2025.

GLOVER, F.; KOCHENBERGER, G.; DU, Y. Quantum bridge analytics I: A tutorial on formulating and using QUBO models. *4OR*, v. 17, n. 4, p. 335–371, 2019.

KOCHENBERGER, G.; HAO, J.-K.; GLOVER, F.; LEWIS, M.; LÜ, Z.; WANG, H.; WANG, Y. The unconstrained binary quadratic programming problem: A survey. *Journal of Combinatorial Optimization*, v. 28, n. 1, p. 58–81, 2014.

RAPIN, J.; TEYTAUD, O. Nevergrad: A gradient-free optimization platform. 2018. Disponível em: <https://github.com/FacebookResearch/Nevergrad>. Acesso em: 14 ago. 2026.

SOUZA, Marcelo; RITT, Marcus. Automatic grammar-based design of heuristic algorithms for unconstrained binary quadratic programming. In: *European Conference on Evolutionary Computation in Combinatorial Optimization*. Cham: Springer International Publishing, 2018. p. 67-84.

SOUZA, Marcelo; RITT, Marcus. Improved regression models for algorithm configuration. In: *Proceedings of the genetic and evolutionary computation conference*. 2022. p. 222-231.