Kombinatorikus optimalizálás 3. hét

Pusztai Pál
pusztai@sze.hu

Tartalom

- Optimumkeresés véges, diszkrét halmazon
    - Az optimalizálási probléma
    - Megoldási módszerek
    - Leszámlálás
    - Korlátozás és szétválasztás
        - Általános eljárás
        - Az általános eljárás kiegészítése

Optimumkeresés véges, diszkrét halmazon

- Az optimalizálási probléma

  $$\min\{z(\mathbf{x}) : \mathbf{x} \in L\}, \text{ ahol}$$

  - L : azonos dimenziójú, egész koordinátájú, nemnegatív vektorok véges és nem üres halmaza (a lehetséges megoldások halmaza).
  - z : az optimalizálandó függvény (célfüggvény), amely értelmezett az L halmazon.
  - $\mathbf{x}$: a keresendő megoldás (egy optimális megoldás).
  - $z(\mathbf{x})$: az optimum értéke.

- Megjegyzés
  - Mivel L véges, így mindig létezik optimális megoldás.
  - Ha egy optimalizálási feladatban maximumot kell keresni, akkor vegyük a célfüggvény -1-szeresét és ezzel minimum keresési problémát kapunk.

- Megoldási módszerek
  - Leszámlálás
  - Korlátozás és szétválasztás
  - Az adott feladathoz illeszkedő, speciális algoritmusok
  - Közelítő algoritmusok

Leszámlálás

Leszámlálás: Megvizsgáljuk L összes elemét és veszünk egy olyan elemet, amelyre $z(\mathbf{x})$ a legkisebb értéket veszi fel.

Megvalósítás: Egy lehetséges módja a megoldásfa építése és bejárása.

Legyen $L \subseteq X_1 \times X_2 \times \cdots \times X_n = \Omega$, ahol $X_i \subseteq \mathbb{N}_0$ véges halmaz ($n \geq 1$, i=1, 2, …, n, $\mathbb{N}_0$={0, 1, …}).

A megoldásfa:

- 1. szint: A gyökérpontból annyi élt indítunk, ahány eleme van X_1-nek, az élekre rendre felírjuk X_1 elemeit.
- i-edik szint: Az $i-1$. szint minden pontjából annyi élt indítunk, ahány eleme van X_i-nek, és minden pontnál, minden élre rendre felírjuk X_i elemeit (i=2, …, n).

A megoldásfa minden gyökértől levélig vezető útja (az út élein lévő értékekkel) egy $\mathbf{x} \in \Omega$ elemet határoz meg, amelyek között ott vannak a lehetséges megoldások is, azaz ahol $\mathbf{x} \in L$.

A fa mélységi bejárása előállítja Ω elemeit, így L elemeit is. Az $\mathbf{x} \in L$ leveleknél kiszámoljuk $z(\mathbf{x})$ értékét, és ha szükséges (ha jobb, mint az addigi legjobb megoldás) megjegyezzük.

Megjegyzés: Az élek helyett az élek végpontjaihoz is feljegyezhetők a megfelelő X_i-beli elemek.

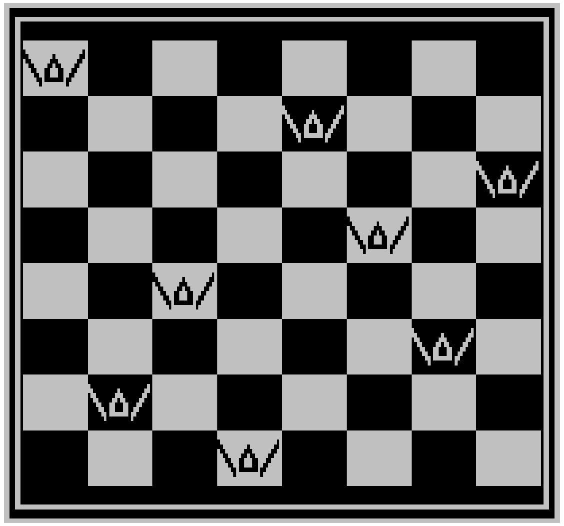
Az ilyen elven működő (megoldásfát építő, azt bejáró) algoritmusokat **visszalépéses algoritmusoknak** (Backtrack) nevezik.

Probléma: L elemszáma nagy is lehet.

Példák

- Nyolc királynő

Feladat: Helyezzünk el egy sakktáblán 8 db királynőt úgy, hogy azok ne üssék egymást, azaz ne essenek egymás ütésvonalába!



A nyolc királynő probléma egy lehetséges megoldása

Példák

- Huszár útja a sakktáblán

Feladat: Járjunk be egy $n \times n$-es méretű „sakktáblát” egy huszárral, egy adott kezdőmezőről indulva úgy, hogy minden mezőre pontosan egyszer lépünk!

	8		1	
7				2
				
6				3
	5		4	

1	20	17	12	3
16	11	2	7	18
21	24	19	4	13
10	15	6	23	8
25	22	9	14	5

A probléma egy lehetséges megoldása egy 5 × 5-ös táblán

Feladatok

- A *Nyolc királynő*, ill. a *Huszár útja* problémákban mik lesznek az n, X_i, Ω, L megfelelői?

Korlátozás és szétválasztás

A **korlátozás és szétválasztás** módszere úgy keresi meg a feladat optimális megoldását, hogy igyekszik a lehetséges megoldások közül lehetőleg minél kevesebbet megvizsgálni.

Az eljáráshoz szükséges két függvény:

- **Szétválasztási függvény**: az L halmaz tetszőleges $|L'| > 1$ részhalmazához hozzárendeli L' egy valódi osztályozását (azaz legalább két, páronként diszjunkt, olyan nem üres részhalmazokra bontja L'-t, amelyek egyesítése L').
- **Korlátozó függvény**: az L halmaz tetszőleges $L' \neq \emptyset$ halmazához hozzárendeli a $z(\bar{\mathbf{x}})$ ($\bar{\mathbf{x}} \in L'$) függvényértékek egy alsó korlátját. Speciálisan, $L' = \{\bar{\mathbf{x}}\}$ esetén a $z(\bar{\mathbf{x}})$ függvényértéket.

Tegyük fel, hogy rendelkezésre állnak ilyen függvények, és jelölje a szétválasztási függvényt φ, a korlátozó függvényt pedig γ.

Korlátozás és szétválasztás

Az eljárás során egy leszámlálási fát vagy **Branch-and-Bound fát** (B&B fát) építünk fel.

- Eljárás
  - Előkészítő rész
    - A fa gyökere legyen L. Határozzuk meg $\gamma(L)$-t és rendeljük címkeként az L szögponthoz. Legyen r =1, és folytassuk az iterációs résszel.
  - Iterációs rész (r-edik iteráció)

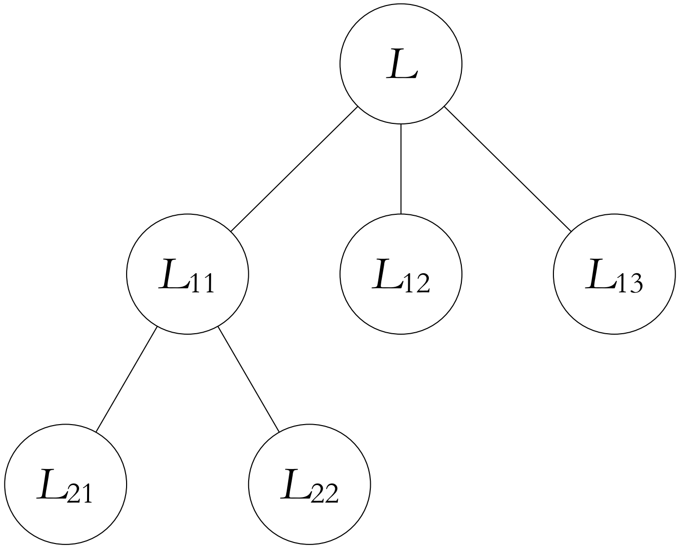
1. Az aktuális fa levelein határozzuk meg a címkék minimumát és válasszunk ki egy minimális címkéjű L' levelet.
2. Ha $L' = \{\bar{\mathbf{x}}\}$, akkor vége az eljárásnak, $\bar{\mathbf{x}}$ optimális megoldás. Ellenkező esetben a 3. lépés következik.
3. Bővítsük az aktuális fát $\varphi(L')$ elemeivel, mint L' leszármazottaival, majd az új szögpontokhoz rendre számítsuk ki a korlátokat és rendeljük az illető szögpontokhoz címkeként.

Legyen $r = r + 1$, majd folytassuk az eljárást a következő iterációs lépéssel.

Korlátozás és szétválasztás

Az alábbi ábra az eljárás két iterációs lépésében felépülő B&B fát szemlélteti, ahol

- $\varphi(L) = \{L_{11}, L_{12}, L_{13}\}$, $\gamma(L_{11}) \leq \gamma(L_{1j})$ $(j = 2{,}3)$,
- $\varphi(L_{11}) = \{L_{21}, L_{22}\}$.



B&B fa két iterációs lépés után

Korlátozás és szétválasztás

Probléma: Az eljárás alkalmazása nehézkes. A megoldandó problémák többségénél L-ről kevés információ áll rendelkezésre és nagyon nehéz az előírt tulajdonságokkal rendelkező szétválasztási függvényt találni.

Megoldás: Keresünk L-hez egy olyan véges Ω halmazt, amelyre egyrészt $L \subseteq \Omega$, másrészt viszonylag könnyen tudunk Ω-hoz szétválasztási függvényt definiálni. Így a B&B fák levelei Ω osztályozásainak egy finomodó sorozatát alkotják, és mivel $L \subseteq \Omega$, egyidejűleg (implicit módon) adódik L osztályozásainak is egy tágabb értelemben vett finomodó sorozata. Az eljárás megfelelő működéséhez a γ korlátozó függvényre vonatkozó előírásokat alkalmasan meg kell változtatni.

Sok esetben heurisztikus eljárásokkal elő lehet állítani viszonylag jó célfüggvényértékkel rendelkező **lehetséges megoldásokat**. Bizonyos feladatoknál a módszer végrehajtása során részeredményként is előállnak lehetséges megoldások. Ezek felhasználásával esetenként hatékonyabbá tehető az eljárás a következők szerint.

Jelölje $\bar{X}$ a rendelkezésre álló lehetséges megoldások halmazát. Legyen $\bar{z} = \min\{z(\mathbf{x}) : \mathbf{x} \in \bar{X}\}$ és jelölje $\mathbf{x}^*$ az $\bar{X}$ halmaz egy olyan elemét, amelyre $z(\mathbf{x}^*) = \bar{z}$ teljesül. Mivel $\bar{X} \subseteq L$, ezért $\bar{z}$ az optimum értékének egy felső korlátja.

Jelölje L' az aktuális B&B fa valamely leveléhez tartozó halmazt. Ekkor $\gamma(L')$ az L' halmazban lévő lehetséges megoldásokon felvett célfüggvényértékek alsó korlátja.

Ha $\gamma(L') \geq \bar{z}$, akkor az L' halmazba eső bármely $\tilde{\mathbf{x}}$ lehetséges megoldásra $z(\tilde{\mathbf{x}}) \geq \gamma(L') \geq \bar{z}$ teljesül, azaz a tekintett levélhez tartozó lehetséges megoldások között nincs jobb, mint $\mathbf{x}^*$. Ekkor a B&B fa ezen levelét felesleges vizsgálnunk, a fa ezen **ágát lezárjuk** (a többi levél **élő levél** marad).

Korlátozás és szétválasztás

A minimális korláttal rendelkező levél kiválasztása nem minden esetben célszerű, néha **más stratégiák** növelik az eljárás hatékonyságát.

Tegyük fel, hogy adott egy olyan Ω véges halmaz, amelyre $L \subseteq \Omega$, adott egy φ szétválasztási függvény, amely Ω tetszőleges legalább kételemű Ω' részhalmazához hozzárendeli Ω' egy valódi osztályozását, valamint adott egy γ korlátozó függvény, hogy Ω tetszőleges nem üres Ω' részhalmazára az alábbiak teljesülnek:

$$\gamma(\Omega') \leq \min\{z(\mathbf{x}) : \mathbf{x} \in \Omega' \cap L\}, \text{ ha } |\Omega'| > 1 \text{ és } \Omega' \cap L \neq \emptyset,$$

$$\gamma(\Omega') \text{ tetszőleges, ha } |\Omega'| > 1 \text{ és } \Omega' \cap L = \emptyset,$$

$$\gamma(\Omega') = \begin{cases} z(\bar{\mathbf{x}}), & \text{ha } |\Omega'| = 1 \ \& \ \Omega' \cap L = \{\bar{\mathbf{x}}\}, \\ W, & \text{ha } |\Omega'| = 1 \ \& \ \Omega' \cap L = \emptyset, \end{cases}$$

ahol W egy nagy számot jelöl (W-hez hozzáadva vagy levonva belőle egy konstans értéket, ismét W-t kapunk).

Feltesszük, hogy az Ω' halmazok (esetleg implicit) leírása olyan, hogy az $|\Omega'| = 1$, $\Omega' \cap L = \{\bar{\mathbf{x}}\}$ eset felismerhető, és $\bar{\mathbf{x}}$ explicit módon előállítható.

Tegyük fel továbbá, hogy ismertek olyan eljárások, amelyekkel a $\gamma(\Omega')$ függvényértékek meghatározhatók bármely $\emptyset \neq \Omega' \subseteq \Omega$ esetén, és a $\varphi(\Omega')$ függvényértékek meghatározhatók bármely $\Omega' \subseteq \Omega$ és $|\Omega'| > 1$ részhalmazra.

Ezen feltevések mellett egy általánosabb B&B eljárás definiálható.

Korlátozás és szétválasztás

A korábbi feltételezések mellett az optimalizálási probléma megoldható az alábbi eljárással.

- Előkészítő rész
  - Valamilyen heurisztikus módszerrel határozzunk meg egy lehetséges megoldást, jelölje ezt $\mathbf{x}_0$. Legyen a $\bar{z}$ változó értéke $z(\mathbf{x}_0)$ és az $\mathbf{x}^*$ vektorváltozó értéke $\mathbf{x}_0$. Ha lehetséges megoldás meghatározására nincsen lehetőség, akkor legyen $\bar{z} = W$, és $\mathbf{x}^* = (-1, \ldots, -1)$.
  - Határozzuk meg a $\gamma(\Omega)$ korlátot. Ha a $\gamma(\Omega)$ korlát meghatározásakor előáll egy $\bar{\mathbf{x}}$ lehetséges megoldás, akkor definiáljuk újra $\bar{z}$-t és $\mathbf{x}^*$-ot. Ha $z(\bar{\mathbf{x}}) \geq \bar{z}$, akkor $\bar{z}$ és $\mathbf{x}^*$ nem változnak, míg $z(\bar{\mathbf{x}}) < \bar{z}$ esetén $\bar{z}$-nak adjuk $z(\bar{\mathbf{x}})$ értékét, és $\mathbf{x}^*$-ot változtassuk $\bar{\mathbf{x}}$-ra.
  - Legyen $r = 0$ és

$$F_0 = \begin{cases} \{\Omega\}, & \text{ha } \gamma(\Omega) < \bar{z}, \\ \emptyset & \text{különben.} \end{cases}$$

  - Ezt követően folytassuk az eljárást az iterációs résszel.

Korlátozás és szétválasztás

- Iterációs rész (r-edik iteráció)
  1. Ha $F_r = \emptyset$, akkor vége az eljárásnak, $\mathbf{x}^*$ a feladat optimális megoldása, $\bar{z}$ az optimum értéke. Különben folytassuk a 2. lépéssel.
  2. Ha $F_r \neq \emptyset$ akkor valamilyen rögzített stratégia szerint válasszunk ki egy elemet F_r elemei közül, jelölje ezt Ω'. Alkalmazzuk a φ szétválasztási függvényt Ω'-re. Legyen

$$\varphi(\Omega') = \{\Omega_1^{(r)}, \dots, \Omega_{k_r}^{(r)}\}.$$

Határozzuk meg rendre az $\Omega_1^{(r)}, \dots, \Omega_{k_r}^{(r)}$ halmazokra a $\gamma(\Omega_1^{(r)}), \dots, \gamma(\Omega_{k_r}^{(r)})$ korlátokat.

Jelölje X_r a korlátok meghatározása során előálló lehetséges megoldások halmazát, feltéve, hogy ilyen létezik. Legyen $z_r = \min\{z(\mathbf{x}) : \mathbf{x} \in X_r\}$ és jelölje $\mathbf{x}^{(r)}$ az X_r halmaz egy olyan elemét, amelyre $z_r = z\left(\mathbf{x}^{(r)}\right)$ teljesül. Definiáljuk újra $\bar{z}$ -t és $\mathbf{x}^*$-ot a következők szerint.

Ha $z_r \geq \bar{z}$, akkor $\bar{z}$ és $\mathbf{x}^*$ nem változnak, míg $z_r < \bar{z}$ esetén $\bar{z}$-nak adjuk a $z_r$értéket és $\mathbf{x}^*$-ot változtassuk $\mathbf{x}^{(r)}$-re. ($X_r = \emptyset$ esetén $\bar{z}$ és $\mathbf{x}^*$ nem változnak.)

Ezek után legyen

$$F_{r+1} = \{\Omega_i : \Omega_i \in (F_r \setminus \{\Omega'\}) \cup \varphi(\Omega') \;\;\&\;\; \gamma(\Omega_i) < \bar{z}\}.$$

Legyen $r = r + 1$, majd folytassuk az eljárást a következő iterációs lépéssel.