УДК 519.85

В.В. БОЙКО, В.М. КУЗЬМЕНКО, Е.І. НЕНАХОВ

ДИНАМІЧНА ПОБУДОВА ГІЛОК НА ОСНОВІ НЕЛІНІЙНИХ ОЦІНОК У МЕТОДІ ГІЛОК ТА МЕЖ

Запропоновано спосіб динамічної побудови дерева розгалуження у методі гілок та меж, що означає зміну кореневої вершини та порядку інших вершин у процесі пошуку. Також запропоновано використання нелінійних оцінок. Такі зміни призводять до підвищення ефективності методу гілок та меж.

Вступ. Підхід до цілочисельної та комбінаторної оптимізації на основі ідеї гілок та меж веде до широкого класу алгоритмів, що дають можливість розв'язувати трудні задачі або точно, або в межах деяких обґрунтованих оцінок. Ці методи існують у різних видах та формах.

Використання такого підходу є доцільним, коли пошук оптимального розв'язку прямими методами є складною проблемою як в теоретичному сенсі, так і в сенсі необхідного об’єму розрахунків для задач з конкретними даними.

Багато робіт з використання таких методів присвячені розв’язку задач із розміщення виробництва [1, 2]. Також цей метод застосовується до багатьох типів комбінаторних задач – багаторівневого розміщення виробництва [3], задач кластеризації [4], задачі комівояжера [5], задач з дисконтами [6], задачі *k*-центрів [7], задачі побудови розкладів для машин [8].

Для розв'язання оптимізаційної задачі методом меж та гілок на деякій допустимій множині рішень Ω мають виконуватися такі загальні властивості задачі.

Множина допустимих розв'язків може бути задана ефективно (скажімо, системою обмежень «помірної» кількості).

Для певних підмножин допустимої множини мають «легко» розраховуватися нижні L та верхні U межі по цільовій функції та нижні x_L та верхні x_U границі для змінних.

Ми розглядатимемо задачу пошуку ε-мінімального значення цільової функції $f(x,y)$ на допустимій множині, що визначається умовами $g(x,y)\le 0$, $x\in\Omega$. Тут x та y – вектори багатовимірних просторів, умова $g(x,y)\le 0$ – узагальнене обмеження з неперервною функцією $g(\cdot,\cdot)$, а множина Ω визначає дискретну (комбінаторну) природу задачі через вектор змінних x. Вектор y є вектором неперервних змінних, які не обов'язково мають бути в задачі. Пошук ε-мінімального значення означає, що ми шукаємо таку допустиму пару векторів $(x_\varepsilon, y_\varepsilon)$, що $f(x_\varepsilon, y_\varepsilon)\le \min\{f(x,y)\,|\,g(x,y)\le 0,\ x\in\Omega\}+\varepsilon$, $\varepsilon\ge 0$.

Загальна схема застосування методу гілок та меж для цієї задачі. Початкову допустиму множину Ω назвемо допустимою множиною рівня 0 і позначимо Ω^0. Рівень 0 назвемо найвищим. Цільовій функції найкращого припустимого розв'язку дамо значення $f_R=\infty$, якщо такого розв'язку ще немає, або скінчене значення, якщо якийсь розв'язок є.

Метод починає працювати з рівня 1, послідовно розбиваючи допустимі множини верхніх рівнів Ω^{r-1} на підмножини нижчих рівнів Ω_i^r. Виконуються такі кроки:

1) розбиття поточної допустимої підмножини Ω^{r-1} на k_r підмножин (як правило дві), що не перетинаються: $\Omega^{r-1}=\bigcap_{i=1}^{k_r}\Omega_i^r$, $\Omega_i^r\cap\Omega_j^r=\varnothing$, $\forall i\ne j$, $i,j=1,\dots,k_r$, $\Omega_i^r\ne\varnothing$, $i=1,\dots,k_r$;

2) розрахунок нижніх L_i^r та верхніх U_i^r оцінок розв'язку задачі на підмножинах $\Theta_i^r=\{g(x,y)\le 0,\ x\in\Omega_i^r\}$, $i=1,\dots,k_r$. Якщо $\Theta_i^r=\varnothing$, то призначимо $L_i^r=U_i^r=\infty$;

3) оновлення рекордного (найкращого для знайдених припустимих розв'язків задачі) значення цільової функції $f_R=\min\{f_R,\ U_1^r, U_2^r, \dots,\ U_{k_r}^r\}$;

4) вибір підмножини $\Omega_{i_r}^r$ для подальшого розбиття серед тих, які можна розбити та для яких $L_i^r+\varepsilon<f_R$, $i=1,\dots,k_r$;

5) якщо така множина є, то перехід на крок 1 на наступному рівні $r+1$ для множини $\Omega_{i_r}^r$. Якщо такої множини немає, то перехід на крок 4 з поверненням на рівень $r-1$ і уточнення нижньої оцінки для множини $\Omega_{i_{r-1}}^{r-1}$: $L_{i_{r-1}}^{r-1}=\min\limits_{i=1,\dots,k_r} L_i^r$;

6) припинення роботи, якщо $r-1=0$.

При досить простій формальній схемі методу його реалізація потребує конкретизації внутрішніх процедур, від яких залежить ефективність алгоритму. Це є вибір способу розбиття та кількості підмножин, розрахунок оцінок, вибір підмножини для подальшого розбиття.

Конкретизація і підбір внутрішніх процедур залежить від типу задачі. Але мають виконуватися такі загальні умови.

Процедура розбиття має бути такою, щоб для конкретної задачі до початку роботи алгоритму була відома максимальна кількість рівнів $r_{\max}$, що буде використана.

Верхні і нижні оцінки повинні розраховуватися значно швидше ніж розв'язування задачі в цілому будь-яким іншим методом. При цьому оцінки мають бути побудовані таким чином, щоб для максимального рівня $r_{\max}$ на кроці 4 виконувалася умова $L_i^{r_{\max}} \geq f_R$, $i = 1,...,k_{r_{\max}}$, така ж нерівність має виконуватися на будь-якому рівні для підмножин, які не можна розбити. Нижні оцінки не мають бути вище за оптимальний розв'язок задачі на поточній підмножині $L_i^r \leq \min\{f(x,y) | g(x,y),\ x \in \Omega_i^r\}$, а верхні оцінки U_i^r мають бути значеннями цільової функції $f(x,y)$ на знайдених припустимих розв'язках задачі.

Якщо внутрішні процедури відповідають таким умовам, то метод повернеться на рівень 0 за скінчену кількість кроків і буде виконана нерівності $L^0 + \varepsilon \geq f_R = \min\{\textit{серед знайдених допустимих розв'язків}\}$, що означає, що найкращий припустимий розв'язок є також і ε-оптимальним розв'язком.

Метод гілок та меж генерує дерево пошуку розв'язку, яке потенційно містить всі допустимі цілочисельні значення зміних x. Але в залежності від вибраних процедур та бажаної точності ε піддерево, по якому пройде метод, може бути значно меншим, що напряму впливає на час пошуку розв'язку.

Існують різні стратегії пошуку на дереві розв'язків. А саме:

• пошук в глибину, що веде до більш швидкого зменшення рекордного значення f_R;

• пошук у ширину, що веде до швидшого скорочення дерева пошуку за рахунок збільшення мінімальної нижньої оцінки;

• вибір для розбиття в першу чергу вершини з кращими оцінками (мінімальна нижня оцінка L_i^r або мінімальна різниця $U_i^r - L_i^r$);

• інші евристики.

Одним з головних недоліків «класичного» підходу до пошуку на дереві є те, що максимальний «час», протягом якого вибраний на рівні r елемент розбиття може залишатися незмінним, є пропорційним кількості вершин дерева, що є дочірніми до цього елемента, а це – величина порядку $O(2^{r_{\max}-r})$. Тобто, чим вище рівень елемента, тим довше він не змінюється при пошуку. Це може призводити до того, що метод витрачає багато часу на пошук на множині розв'язків, серед яких немає «хорошої» верхньої оцінки.

Цей недолік пропонується подолати за рахунок динамічної побудови дерева розгалуження. А саме, за деяким правилом алгоритм, що реалізує метод, має змінювати через певну кількість кроків або через певний час порядок розбиття початкової множини Ω на підмножини. Зрозуміло, що такий порядок залежить від множини Ω та способу розбиття. Так у випадку, коли компоненти вектора x є булевими змінними, а множина Ω складається з вершин одиничного гіперкубу і розбиття здійснюється на дві підмножини шляхом фіксації окремих компонент на значеннях 0 або 1, зміною порядку розбиття може бути відміна фіксацій, що були зроблені на рівнях з 1-го по $r_{\max}/2$, якщо на рівні $r_{\max}$ був знайдений припустимий розв'язок $U^{r_{\max}}$, що дав покращення рекорду f_R. Це дасть можливість шукати наступне покращення, використовуючи знайдений рекорд.

Розглянемо тепер побудову нелінійних оцінок на прикладі задачі пошуку k медіан у неперервному просторі з евклідовою метрикою [9].

Задача полягає у пошуку множини C, що складається з k точок $\vec{y}_i \in R^n$, $i = 1,...,k$, у просторі розмірності n таких, що сума зважених евклідових відстаней від m зафіксованих точок $\vec{p}_j \in R^n$, $j = 1,...,m$, до множини C є мінімальною.

Задачу можна сформулювати таким чином

$$\min_{\vec{y}_i, x_{ij}, \rho_j} \sum_{j=1}^{m} c_j \rho_j, \tag{1}$$

за умов

$$\left\| \vec{y}_i - \vec{p}_j \right\|_2 \le \rho_j + (1 - x_{ij})M,\ i = 1,...,k,\ j = 1,...,m, \tag{2}$$

$$\sum_{i=1}^{k} x_{ij} \ge 1,\ j = 1,...,m, \tag{3}$$

$$x_{ij} \in \{0,1\},\ i = 1,...,k,\ j = 1,...,m, \tag{4}$$

$$\vec{y}_i \in R^n,\ i = 1,...,k;\ \rho_j \in R^1,\ j = 1,...,m, \tag{5}$$

де M велике число із значенням не меншим ніж $\max\limits_{i,j=1,...,m} \left\| \vec{p}_i - \vec{p}_j \right\|_2$, $c_j > 0$.

При побудові нижньої оцінки для задачі (1) – (5) на рівні розгалуження r частина булевих змінних x_{ij} є фіксованою, а нефіксовані змінні ми будемо розглядати як неперервні. В такому випадку задача (1) – (5) стає опуклою з конічними обмеженнями (2) другого порядку. Для її розв'язання можуть бути використані як загальні методи опуклого програмування [10], так і спеціально розроблені для задач з конічними обмеженнями.

Верхня оцінка отримується за рахунок побудови допустимого розв'язку з використанням евристики при збереженні значень фіксованих змінних. Наприклад, може бути використані евристики, що описані в [7] або [9].

Константа M відіграє важливе значення при розв'язуванні задачі (1) – (5). Формально її значення може бути як завгодно великим, але це погіршує оцінки знизу. При використанні значення меншого ніж вказане вище задача не втрачає сенсу. Так при значенні 0 задача перетворюється в задачу Вебера [11] пошуку одного центру для всіх точок $\vec{p}_j$, $j=1,...,m$ з мінімальною сумою відстаней.

Для демонстрації залежності розв’язку задачі (1) – (5) при булевих та неперервних змінних x_{ij} від значення константи M розв’язано серію задач для 20 точок і 3-х центрів з прикладу в [9]. Значення розв’язків наведено в табл. 1.

ТАБЛИЦЯ 1

M	Булеві змінні x_{ij}	Неперервні змінні x_{ij}
0	1.176697	1.176697
1	0.9252061	0.5983953
2	0.5065739	0.2518134
3	0.4386914	0.1088168
4	0.4074184	0.0405136
5	0.4074184	0.0
7	0.3820393	0.0

Розрахункове значення M для цієї задачі дорівнює 6.1444. Але при такому значенні нижня границя дорівнює 0, що є неприйнятним. Щоб покращити нижню оцінку введемо квадратичні штрафи за неціле значення змінних x_{ij}, а саме, добавимо до (1) штрафну складову $K\cdot\sum_{i=1}^{k}\sum_{j=1}^{m}x_{ij}(1-x_{ij})$, де $K>0$ – штрафний множник. Такий штраф робить задачу неопуклою та багато екстремальною, але при невеликих значеннях K в задачі залишається один мінімум. Залежність цільової функції (1) та штрафу від значення K при $M=7$ в результаті пошуку локального мінімуму задачі (1) – (5) з неперервними змінними x_{ij} наведено в табл. 2.

Бачимо, що при значенні $K=0.05$ цільова функція (1) не змінилася, а при $K=0.5$ її значення перевищує оптимальне значення при булевих змінних. Отже, збільшити нижню оцінку і при цьому не перевищити значення розв'язку початкової задачі та зберегти один локальний мінімум можна при незначному штрафному коефіцієнті K, контролюючи його через величину цільової функції (1).

ТАБЛИЦЯ 2

K	Цільова функція (1) + штраф	Цільова функція	Штраф без K
0.05	0.1918472	0.0	3.836944
0.1	0.3071568	0.02484152	2.823153
0.5	0.9428522	0.7168544	0.4519957
0.75	0.7836932	0.7836932	0.0

В.В. Бойко, В.Н. Кузьменко, Э.И. Ненахов

ДИНАМИЧЕСКОЕ ВЕТВЛЕНИЕ НА ОСНОВЕ НЕЛИНЕЙНЫХ ОЦЕНОК В МЕТОДЕ ВЕТВЕЙ И ГРАНИЦ

Предложен способ динамического построения дерева ветвления в методе ветвей и границ, что означает смену корневой вершины и порядка других вершин в процессе поиска. Также предложено использование нелинейных оценок. Такие изменения приводят к увеличению эффективности метода ветвей и границ.

V.V. Boyko, V.M. Kuzmenko, E.I. Nenakhov

A DYNAMIC BRANCHING BASED ON NONLINEAR ASTIMATIONS IN THE BRANCH AND BOUND METHOD

A way for dynamic building of a branching tree in the branch and bound method is proposed. This way means changing the root vertex and the order of other vertices in the search process. Also, nonlinear estimation of branches is proposed. Such changes lead to an increase of the efficiency of the branch and bound method.

Список літератури

1. Akinc U., Khumawala B.M. An efficient branch and bound algorithm for the capacitated warehouse location problem. *Management Science*. **23** (6). 1977. P. 545 – 665.
2. Bilde O., Krarup J. Sharp lower bounds and efficient algorithm for the simple plant location problem. *Annals of Discrete Mathematics*. 1. 1977. P. 79 – 97.
3. Tcha D., Lee B. A branch-and-bound algorithm for the multi-level uncapacitated facility location problem. *European Journal of Operational Research*. 18. 1984. P. 35 – 43.
4. Sherali H.D., Desai J.A Global Optimization RLT-based Approach for Solving the Hard Clustering Problem. *Journal of Global Optimization*. 2005. **32** (2). P. 281 – 306.
5. Gager G., Goldengorin B. How to make a greedy heuristic for the asymmetric traveling salesman problem competitive. *University of Groningen, Research Institute SOM (Systems, Organisations and Management), Research Report*. 2005. 15 p.
6. Goldengorin B., Keane J., Kuzmenko V., Tso MK-S. Optimal supplier choice with discounting. *Journal of the Operational Research Society*. **62** (4). 2011. P. 690 – 699. doi:10.1057/jors.2009.164.
7. Fayed A., Atiya A. A mixed breadth-depth first strategy for the branch and bound tree of Euclidean k-center problems. *Computational Optimization and Applications*. 2013. **54** (3). 29 p.
8. Batsyn M., Goldengorin B., Sukhov P., Pardalos P. Lower and Upper Bounds for the Preemptive Single Machine Scheduling Problem with Equal Processing Times. *Springer Proceedings in Mathematics and Statistics*. 59. 2013. P. 11 – 27. doi: 10.1007/978-1-4614-8588-9_2.
9. Kuzmenko V., Uryasev S. Kantorovich-Rubinstein distance minimization: application to location problems. *Large Scale Optimization Applied to Supply Chain & Smart Manufacturing: Theory & Real Applications*. Springer Optimization and Its Applications. 2019. P. 36 – 46.
10. Кузьменко В.Н., Бойко В.В. Использование PNK-метода для решения невыпуклых задач оптимизации. *Теорія оптимальних рішень*. 2012. – С. 47 – 52.
11. Fernandes I.F., Aloise D., Aloise D.J., Hansen P., Liberti L. On the Weber facility location problem with limited distances and side constraints. *Optimization Letters, Springer*. 2014. 8(2). P. 407 – 424. doi: 10.1007/s11590-012-0538-9.

Одержано 18.03.2019