KAPITOLA 11

CELOČÍSELNÉ PROGRAMOVÁNÍ: VYBRANÉ METODY ŘEŠENÍ

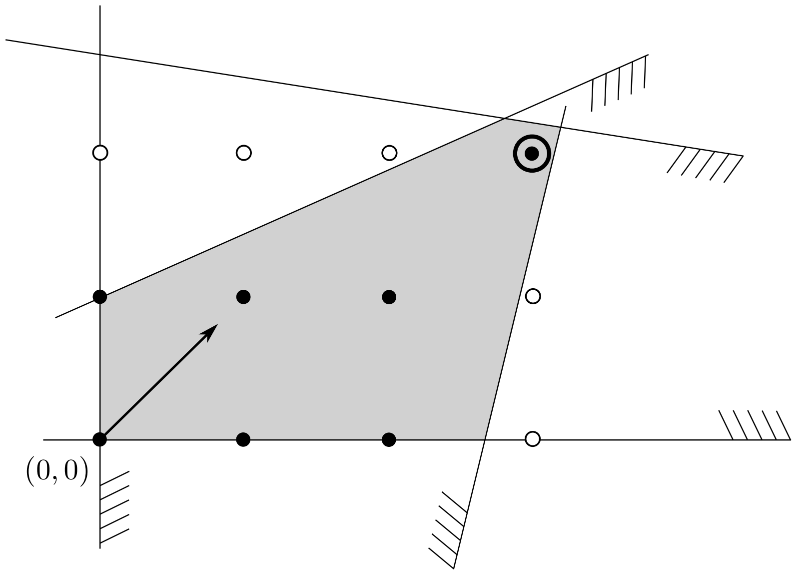
V této závěrečné kapitole se vrátíme k celočíselnému a smíšenému celočíselnému programování (ILP/MILP), které jsme dříve stručně motivovali. Nejprve krátce zopakujeme, co přesně znamená přidat celočíselné podmínky a jakou roli hraje LP-relaxace. Kapitola je dále věnována dvěma metodám používaným při řešení úloh celočíselného programování: metodě větví a mezí (*branch and bound*) a metodě Gomoryho řezů. Obě metody staví na LP-relaxaci, každá však jiným způsobem.

1 Krátké zopakování pojmů ILP/MILP

V úvodní kapitole jsme zavedli celočíselný lineární program (ILP) a smíšený celočíselný lineární program (MILP) jako lineární programy s dodatečnými celočíselnými podmínkami na vybrané proměnné. Zde připomeneme jen několik klíčových pozorování, která budou důležitá pro účel této kapitoly:

- V čistém ILP požadujeme $\mathbf{x} \in \mathbb{Z}^n$ (typicky navíc nezáporné), v smíšeném případě dělíme proměnné na celočíselné $\mathbf{y}$ a reálné $\mathbf{z}$.
- LP-relaxace vznikne prostou záměnou podmínek celočíselnosti za $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$. Optimum této relaxace dává horní/dolní odhad na optimum původní celočíselné úlohy (viz integrality gap v úvodu).
- Přípustná množina ILP je obecně diskrétní a nekonvexní (množina bodů v $\mathbb{Z}^n$). Pomocí LP-relaxace dostaneme nám dobře známý konvexní mnohostěn.

Geometricky tedy máme následující situaci: uvnitř konvexního mnohostěnu P_{LP} (přípustná množina LP-relaxace) leží řidčeji rozmístěné celočíselné body. Řešení LP-relaxace lze získat poměrně snadno pomocí obecných technik probraných v předchozích kapitolách.



Obrázek 11.1: Schématické porovnání přípustné množiny relaxované úlohy LP (šedý konvexní mnohoúhelník) a celočíselné úlohy LP (černé body uvnitř mnohoúhelníku odpovídající celočíselným řešením).

Cílem metod řešení ILP/MILP je využít „levné“ řešení získané LP-relaxací a postupně ho systematicky zpřesňovat ideálně směrem k celočíselnému optimu, nebo prokázat, že žádný vyhovující neexistuje.

2 LP-relaxace, větvení a řezy: obecné schéma

Většina známých metod pro obecné ILP/MILP stojí na dvou krocích:

1. **Uvolnění problému:** původní (diskrétní) úlohu nahradíme LP-relaxací, kterou umíme řešit efektivně a která poskytne odhad na optimum.
2. **Zpřesnění:** pokud řešení relaxace není celočíselné, úlohu vhodně zpřísníme – buď *lokálně* (větvíme) nebo *globálně* (přidáme řez).

Obecné schéma metody pro ILP

Mějme maximalizační ILP

$$\max\{\mathbf{c}^\mathsf{T}\mathbf{x} \mid \mathbf{x} \in P \cap \mathbb{Z}^n\},$$

kde $P \subset \mathbb{R}^n$ je mnohostěn zadaný lineárními omezeními. Metoda typicky udržuje:

- *relaxovaný mnohostěn* $P^{(k)}$, který obsahuje všechna celočíselná řešení příslušného (pod)problému (v případě větvení jde o relaxaci konkrétního uzlu stromu), tj. $P^{(k)} \supseteq \big(P \cap \mathbb{Z}^n \cap (\text{větvící omezení})\big)$.
- nejlepší dosud nalezené celočíselné řešení $\mathbf{x}^{\text{best}}$ (nebo informaci, že zatím žádné neznáme).

V k-tém kroku:

1. řeší LP nad $P^{(k)}$ a získá optimum $\mathbf{x}^{(k)}$ a horní odhad $z_{\text{LP}}^{(k)}$,
2. podle typu metody:
   - buď rozdělí problém na podproblémy s doplněnými celočíselnými omezeními (větvení),
   - nebo přidá do $P^{(k)}$ nové nerovnosti (řezy), které odříznou $\mathbf{x}^{(k)}$, ale zachovají všechna celočíselná řešení.

Pokud je LP-odhad pro danou větev již horší než známé celočíselné řešení, může být větev bezpečně zahozena; pokud žádná větev nezbyde, máme globálně optimální celočíselné řešení.

V následujících dvou sekcích popíšeme dvě základní realizace tohoto schématu: metoda větví a mezí, která pracuje s podproblémy v stromové struktuře, a Gomoryho řezy, které postupně zpřesňují výchozí mnohostěn vzniklý LP-relaxací pomocí „odřezávání“ jeho částí.

3 Metoda větví a mezí

3.1 Základní myšlenka

Na první pohled by se nabízelo všechny kombinace celočíselných hodnot prostě vyzkoušet. Takový hrubý přístup by však velmi rychle explodoval (pro binární vektor délky n je možností 2^n). Metoda větví a mezí (známá také jako *branch and bound*) nahrazuje naivní úplný průchod chytřejším stromovým prohledáváním, které využívá LP-relaxaci k tomu, aby řadu větví vůbec nemuselo prozkoumat.

Každý uzel stromu odpovídá ILP/MILP úloze s dodatečnými omezeními (typicky typu $x_j \leq k$ nebo $x_j \geq k+1$). V uzlu spočítáme LP-relaxaci a dostaneme jednu z následujících situací:

a) Relaxace LP je nepřípustná $\Rightarrow$ daný uzel (a celá větev) nemůže obsahovat celočíselné řešení.

b) Relaxace LP má optimum, ale optimální hodnota je horší než pro nejlepší známé celočíselné řešení $\Rightarrow$ větev se nevyplatí dál zkoumat (odřízneme ji).

c) Relaxace LP má celočíselné optimální řešení $\Rightarrow$ získáváme nové přípustné řešení ILP a případně aktualizujeme nejlepší známé řešení.

d) Relaxace LP má optimum s neceločíselnými proměnnými $\Rightarrow$ větvíme se (přidáme celočíselné omezení a dostaneme dva potomky).

3.2 Schematický algoritmus

Pro jednoduchost uvažujme maximalizační úlohu. Nechť z_{best} je hodnota nejlepšího dosud nalezeného celočíselného řešení (počátečně $-\infty$).

Metoda větví a mezí – základní schéma

1. Založ *kořenový uzel* s původní ILP/MILP úlohou (bez dodatečných větvících omezení).
2. Dokud existují nevyřešené uzly:
   i) Vyber uzel (pomocí nějakého pravidla) a spočítej LP-relaxaci.
   ii) Je-li relaxace LP nepřípustná, uzel zahodíme.
   iii) Je-li $z_{\text{LP}} \leq z_{\text{best}}$, uzel zahodíme (nemůže obsahovat lepší řešení).
   iv) Je-li LP optimum celočíselné a hodnota z_{LP} je lepší než z_{best}, aktualizujeme nejlepší řešení a uzel uzavřeme.
   v) Jinak zvolíme některou neceločíselnou proměnnou x_j a vytvoříme dva potomky s doplněnými omezeními, např.
   $$x_j \leq \lfloor \hat{x}_j \rfloor, \qquad x_j \geq \lceil \hat{x}_j \rceil,$$
   kde $\hat{x}_j$ je hodnota proměnné x_j v optimu LP-relaxace. Uzly zařadíme k dalšímu zpracování.
3. Jakmile nejsou k dispozici další uzly, z_{best} je optimální hodnota a odpovídající $\mathbf{x}^{\text{best}}$ je optimální celočíselné řešení (pokud nějaké existuje).

Poznámka 11.1: Výběr uzlu a proměnné

V praxi existuje celá řada heuristik, jak vybírat uzel (hledání do hloubky, do šířky, „best-bound", atd.) i větvící proměnnou. Volba těchto pravidel může dramaticky ovlivnit velikost prohledávaného stromu, přesto však nemění korektnost metody: všechny uzly se buď navštíví, nebo se jejich podstrom správně ořízne pomocí odhadů z LP.

3.3 Jednoduchý ilustrativní příklad

Příklad 11.2: Metoda větví a mezí ve dvou proměnných

Uvažujme úlohu

$$\begin{aligned} \textbf{max} \quad & 3x_1 + 2x_2 \\ \textbf{při} \quad & 4x_1 + 2x_2 \leq 9, \\ & 2x_1 + 4x_2 \leq 9, \\ & x_1, x_2 \in \mathbb{Z}_{\geq 0}. \end{aligned}$$

LP-relaxace (s $x_1, x_2 \geq 0$ reálnými) má optimum v průsečíku

$$4x_1 + 2x_2 = 9, \qquad 2x_1 + 4x_2 = 9,$$

tedy v bodě

$$(\hat{x}_1, \hat{x}_2) = \left(\tfrac{3}{2}, \tfrac{3}{2}\right), \qquad z_{\text{LP}} = 3 \cdot \tfrac{3}{2} + 2 \cdot \tfrac{3}{2} = \tfrac{15}{2} = 7{,}5.$$

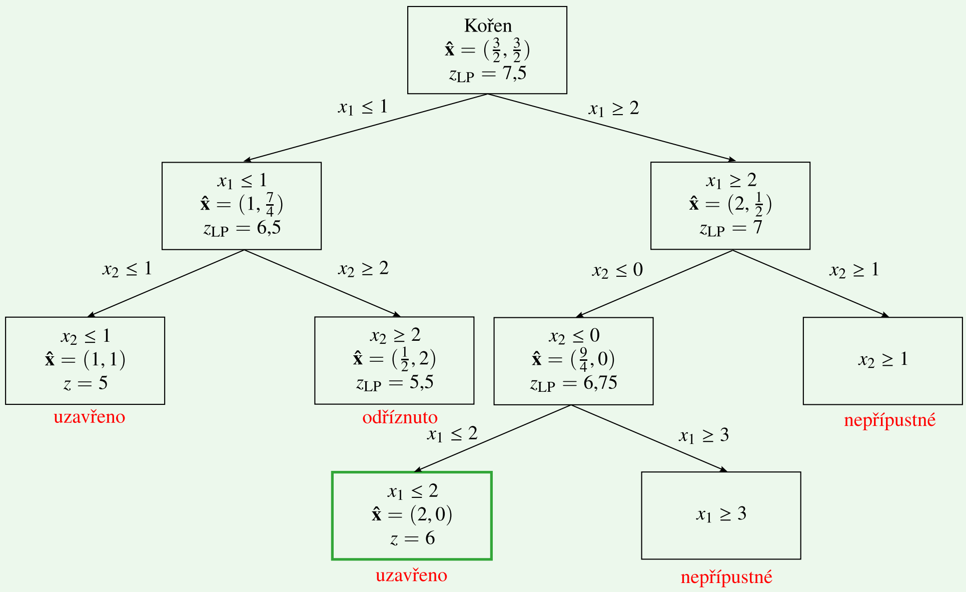
Tento bod není celočíselný, proto větvíme například podle x_1:

$$x_1 \leq 1 \quad \text{a} \quad x_1 \geq 2.$$

Při volbě uzlů např. strategií *best-bound* dostaneme následující (schematický) průběh:

- V uzlu $x_1 \geq 2$ vyjde LP optimum $(2, \frac{1}{2})$ s odhadem $z_{\text{LP}} = 7$, větvíme tedy podle x_2 na $x_2 \leq 0$ a $x_2 \geq 1$. Uzel $x_2 \geq 1$ je nepřípustný (protože z $4x_1 + 2x_2 \leq 9$ a $x_1 \geq 2$ plyne $x_2 \leq \frac{1}{2}$). V uzlu $x_2 \leq 0$ dostaneme LP optimum $(\frac{9}{4}, 0)$ s odhadem $z_{\text{LP}} = \frac{27}{4} = 6{,}75$ a větvíme podle x_1. Z větve $x_1 \leq 2$ dostaneme celočíselné řešení $(2, 0)$ s hodnotou $z_{\text{best}} = 6$.

- V uzlu $x_1 \leq 1$ vyjde LP optimum $(1, \frac{7}{4})$ s odhadem $z_{\text{LP}} = \frac{13}{2} = 6{,}5$, a tedy ještě nelze uzel odříznout (protože $6{,}5 > 6$). Větvíme podle x_2 na $x_2 \leq 1$ a $x_2 \geq 2$. Uzel $x_2 \leq 1$ dá celočíselné optimum $(1, 1)$ s hodnotou 5 (incumbent nezlepší), a uzel $x_2 \geq 2$ má horní odhad $z_{\text{LP}} = \frac{11}{2} = 5{,}5 \leq 6$, takže jej odřízneme podle odhadu.



Výsledkem je globální optimum

$$z^\star = 6 \quad \text{v bodě} \quad (x_1, x_2) = (2, 0).$$

4 Gomoryho řezy

4.1 Základní myšlenka

V metodách využívajících rovin jako řezů (v literatuře *cutting-plane methods*) pracujeme s jedinou „globální“ LP-relaxací, kterou postupně zpřísňujeme přidáváním dalších omezení. Začínáme z relaxace původní celočíselné úlohy a v každém kroku hledáme nerovnost, která

- je *platná* pro všechna celočíselná řešení (tj. nevyřazuje žádný bod z $P \cap \mathbb{Z}^n$),
- ale je *porušena* optimálním řešením aktuální LP-relaxace.

Taková nerovnost se nazývá *řez* (*cut*), protože „odřízne“ aktuální optimum, ale zachová všechny celočíselné přípustné body. Po přidání řezu úlohu znovu řešíme jako relaxovanou úlohu LP (například simplexovou metodou) a proces opakujeme, dokud nedostaneme celočíselné optimum. V praxi se může stát, že přidávání řezů začne být numericky problematické (degenerace, špatná podmíněnost, kumulace omezení apod.), proto moderní řešiče řezy obvykle kombinují s již zmíněným větvením.

Existuje mnoho typů řezů (Chvátal–Gomory, pokrývací řezy, subtour-eliminační řezy pro TSP, . . .). Zde se omezíme na klasické *Gomoryho řezy* pro ILP. Pro MILP se používají jejich zobecnění (zejména Gomoryho smíšené celočíselné řezy, GMI), to je však nad rámec tohoto textu.

4.2 Gomoryho řez

Uvažujme celočíselný program v rovnicovém tvaru

$$\begin{aligned} \textbf{max} \quad & \mathbf{c}^{\mathsf{T}}\mathbf{x} \\ \textbf{při} \quad & A\mathbf{x} = \mathbf{b}, \\ & \mathbf{x} \geq 0,\ \mathbf{x} \in \mathbb{Z}^n. \end{aligned}$$

Poznámka 11.3: Racionalita dat

Konstrukce Gomoryho řezů je založena na rozkladu čísel na celočíselnou a neceločíselnou část. Formálně proto předpokládáme, že data úlohy jsou racionální, což zaručuje racionalitu všech koeficientů simplexové tabulky.

Po vyřešení LP-relaxace máme simplexovou tabulku odpovídající optimálnímu řešení ve tvaru

$$\mathbf{x}_B = \mathbf{p} + Q\mathbf{x}_N, \qquad z = z_0 + \mathbf{r}^{\mathsf{T}}\mathbf{x}_N,$$

tj. po složkách (pro $B = \{j_1 < \cdots < j_m\}$ a $N = \{\ell_1 < \cdots < \ell_{n-m}\}$)

$$x_{j_i} = p_i + \sum_{k=1}^{n-m} q_{ik}\, x_{\ell_k}.$$

Bázické přípustné řešení odpovídající této tabulce je dáno volbou $\mathbf{x}_N = \mathbf{0}$, tedy $\mathbf{x}_B = \mathbf{p}$.

Předpokládejme, že pro některý řádek i je $p_i \notin \mathbb{Z}$. Označme necelou část jako $\{t\} = t - \lfloor t \rfloor \in [0, 1)$. Položme

$$f_i = \{p_i\} \in (0, 1), \qquad f_{ik} = \{-q_{ik}\} \in [0, 1).$$

Potom platí, že nerovnost

$$\sum_{k=1}^{n-m} f_{ik}\, x_{\ell_k} \;\geq\; f_i$$

je platná pro všechna celočíselná řešení a současné frakční bázické optimum ji porušuje (protože v něm je $\mathbf{x}_N = \mathbf{0}$, takže levá strana je $0 < f_i$). Právě touto nerovností definujeme Gomoryho řez, jak je shrnuto v následující definici.

Definice 11.4: Gomoryho řez

Nechť v simplexové tabulce odpovídající optimálnímu řešení s bází $B = \{j_1 < \cdots < j_m\}$ a jejím doplňkem $N = \{\ell_1 < \cdots < \ell_{n-m}\}$ existuje řádek s indexem i, tak že

$$x_{j_i} = p_i + \sum_{k=1}^{n-m} q_{ik}\, x_{\ell_k}, \qquad p_i \notin \mathbb{Z}.$$

Označme $f_i = \{p_i\}$ a $f_{ik} = \{-q_{ik}\}$. Potom nerovnost

$$\sum_{k=1}^{n-m} f_{ik}\, x_{\ell_k} \;\geq\; f_i$$

nazýváme *Gomoryho řez*.

Poznámka 11.5: Řezy vs. větve

Gomoryho řezy a metodu větví a mezí lze chápat jako dvě komplementární strategie:

- metoda větví a mezí dělí prostor řešení na mnoho podproblémů (větví), které se prořezávají pomocí LP-odhadů,
- řezové metody ponechávají jediný globální mnohostěn a zpřesňují jej přidáváním platných nerovností.

Moderní řešiče obvykle kombinují obě myšlenky: nejprve pomocí řezů výrazně zpřesní kořenovou relaxaci a poté v takto posílené relaxaci spouští metodu větví a mezí. Tato kombinace se nazývá *branch and cut*.

4.3 Schematický algoritmus

Opět pro jednoduchost uvažujme maximalizační úlohu ILP v rovnicovém tvaru a její LP-relaxaci. Metoda řezů udržuje posloupnost relaxací $P^{(k)}$ tak, aby vždy platilo

$$P^{(k)} \supseteq P \cap \mathbb{Z}^n,$$

tj. žádný řez nikdy nevyřadí celočíselné řešení.

Gomoryho řezová metoda – základní schéma

1. Polož $k \leftarrow 0$ a $P^{(0)} \leftarrow P_{\mathrm{LP}}$ (počáteční LP-relaxace).
2. Opakuj:
   i) Vyřeš LP nad $P^{(k)}$ simplexovou metodou a získej simplexovou tabulku odpovídající optimálnímu řešení ve tvaru
   $$\mathbf{x}_B = \mathbf{p} + Q\mathbf{x}_N, \qquad z = z_0 + \mathbf{r}^{\mathsf{T}}\mathbf{x}_N.$$
   ii) Je-li LP nepřípustné, pak (protože všechny přidané řezy jsou platné) neexistuje ani celočíselné řešení. Konec.
   iii) V bázickém přípustném řešení odpovídajícím tabulce je $\mathbf{x}_N = \mathbf{0}$, tedy $\mathbf{x}_B = \mathbf{p}$. Je-li $\mathbf{p} \in \mathbb{Z}^m$, máme celočíselné optimum. Konec.
   iv) Jinak vyber řádek i s neceločíselným p_i a sestroj Gomoryho řez (viz Definice 11.4) z tohoto řádku.
   v) Přidej řez do relaxace: $P^{(k+1)} \leftarrow P^{(k)} \cap \{\text{nový řez}\}$, polož $k \leftarrow k+1$ a pokračuj.

4.4 Ilustrativní příklad Gomoryho řezů

Příklad 11.6: Dvě iterace Gomoryho řezů

Uvažujme čistý celočíselný lineární program

$$\begin{aligned} \textbf{max} \quad & z = x_1 + x_2, \\ \textbf{při} \quad & 2x_1 + x_2 \le 4, \\ & x_1 + 2x_2 \le 4, \\ & x_1, x_2 \in \mathbb{Z}_{\ge 0}. \end{aligned}$$

Po zavedení slack proměnných $s_1, s_2 \ge 0$ dostaneme rovnicový tvar

$$2x_1 + x_2 + s_1 = 4, \qquad x_1 + 2x_2 + s_2 = 4.$$

LP-relaxace. Řešení LP-relaxace má optimum v průsečíku obou omezení,

$$(\hat{x}_1, \hat{x}_2) = \left(\tfrac{4}{3}, \tfrac{4}{3}\right), \qquad z_{\mathrm{LP}} = \tfrac{8}{3},$$

které není celočíselné.
Jedna optimální simplexová tabulka (s bází $B = \{x_1, x_2\}$ a nebází $N = \{s_1, s_2\}$) má tvar

$$\begin{aligned} x_1 &= \tfrac{4}{3} - \tfrac{2}{3}s_1 + \tfrac{1}{3}s_2, \\ x_2 &= \tfrac{4}{3} + \tfrac{1}{3}s_1 - \tfrac{2}{3}s_2, \\ z &= \tfrac{8}{3} - \tfrac{1}{3}s_1 - \tfrac{1}{3}s_2. \end{aligned}$$

Bázické přípustné řešení odpovídá volbě $s_1 = s_2 = 0$.

První Gomoryho řez. Zvolíme řádek pro proměnnou x_1, kde

$$p_1 = \tfrac{4}{3}, \qquad f_1 = \{p_1\} = \tfrac{1}{3}.$$

Koeficienty u nebázických proměnných jsou

$$q_{1,s_1} = -\tfrac{2}{3}, \qquad q_{1,s_2} = \tfrac{1}{3},$$

tedy

$$-q_{1,s_1} = \tfrac{2}{3}, \qquad -q_{1,s_2} = -\tfrac{1}{3},$$

proto

$$f_{1,s_1} = \{-q_{1,s_1}\} = \tfrac{2}{3}, \qquad f_{1,s_2} = \{-q_{1,s_2}\} = -\tfrac{1}{3} - (-1) = \tfrac{2}{3}.$$

Gomoryho řez má pak tvar

$$\tfrac{2}{3}s_1 + \tfrac{2}{3}s_2 \ge \tfrac{1}{3},$$

neboli po vynásobení třemi

$$2s_1 + 2s_2 \ge 1.$$

Po dosazení $s_1 = 4 - 2x_1 - x_2$ a $s_2 = 4 - x_1 - 2x_2$ dostáváme ekvivalentní omezení

$$2x_1 + 2x_2 \le 5.$$

Druhá iterace. Po přidání řezu a opětovném vyřešení LP-relaxace vyjde nové optimum

$$(x_1, x_2) = (1, \tfrac{3}{2}), \qquad z_{\mathrm{LP}} = \tfrac{5}{2}.$$

Jedna odpovídající optimální simplexová tabulka (např. s bází $B = \{x_1, x_2, s_1\}$ a nebází $N = \{s_2, s_3\}$, kde s_3 je slack nového řezu) má tvar

$$\begin{aligned} x_1 &= 1 + s_2 - s_3, \\ x_2 &= \tfrac{3}{2} - s_2 + \tfrac{1}{2}s_3, \\ s_1 &= \tfrac{1}{2} - s_2 + \tfrac{3}{2}s_3, \\ z &= \tfrac{5}{2} - \tfrac{1}{2}s_3. \end{aligned}$$

Z řádku pro proměnnou x_2 máme

$$q_{2,s_2} = -1, \quad q_{2,s_3} = \tfrac{1}{2},$$

tedy

$$f_{2,s_2} = \{-q_{2,s_2}\} = 0, \qquad f_{2,s_3} = \{-q_{2,s_3}\} = \tfrac{1}{2}.$$

Gomoryho řez má tvar

$$\tfrac{1}{2}s_3 \geq \tfrac{1}{2}, \quad \text{tj.} \quad s_3 \geq 1.$$

Protože $s_3 = 5 - 2x_1 - 2x_2$, dostáváme nové omezení

$$x_1 + x_2 \leq 2.$$

Po přidání tohoto řezu je LP optimum dosaženo v celočíselném bodě

$$(x_1, x_2) = (2, 0) \text{ nebo } (0, 2), \qquad z^\star = 2,$$

a metoda Gomoryho řezů končí s celočíselným optimálním řešením.