Métodos de Apoio à Decisão

Pesquisa em árvore

João Pedro Pedroso

2023/2024

- *Aula passada:*
  - Programação inteira pura/mista
  - Relaxação linear
  - Aplicações:
    - seleção de projetos
    - problemas com custos fixos
    - restrições `ou não exclusivo`
    - restrições `se ... então`
- *Aula de hoje:*
  - Método da pesquisa em árvore (branch and bound)
  - Problemas de localização

Problema de programação inteira

$$
\begin{aligned}
\max z = \quad & c_1 x_1 + c_2 x_2 + \ldots + c_n x_n & \\
\text{sujeito a} \quad & a_{11} x_1 + a_{12} x_2 + \ldots + a_{1n} x_n & \leq b_1 \\
& a_{21} x_1 + a_{22} x_2 + \ldots + a_{2n} x_n & \leq b_2 \\
& \ldots & \\
& a_{m1} x_1 + a_{m2} x_2 + \ldots + a_{mn} x_n & \leq b_m \\
& x_1, x_2, \ldots, x_n \in \mathbb{Z}^+ &
\end{aligned}
$$

Recordemos:

- **Programação inteira pura** — todas as variáveis são inteiras.
- **Programação inteira mista** — apenas algumas das variáveis têm de ser inteiras.
- **Relaxação linear** — problema linear em que se omitem todas as restrições de integralidade das variáveis.

Pesquisa em árvore para otimização inteira

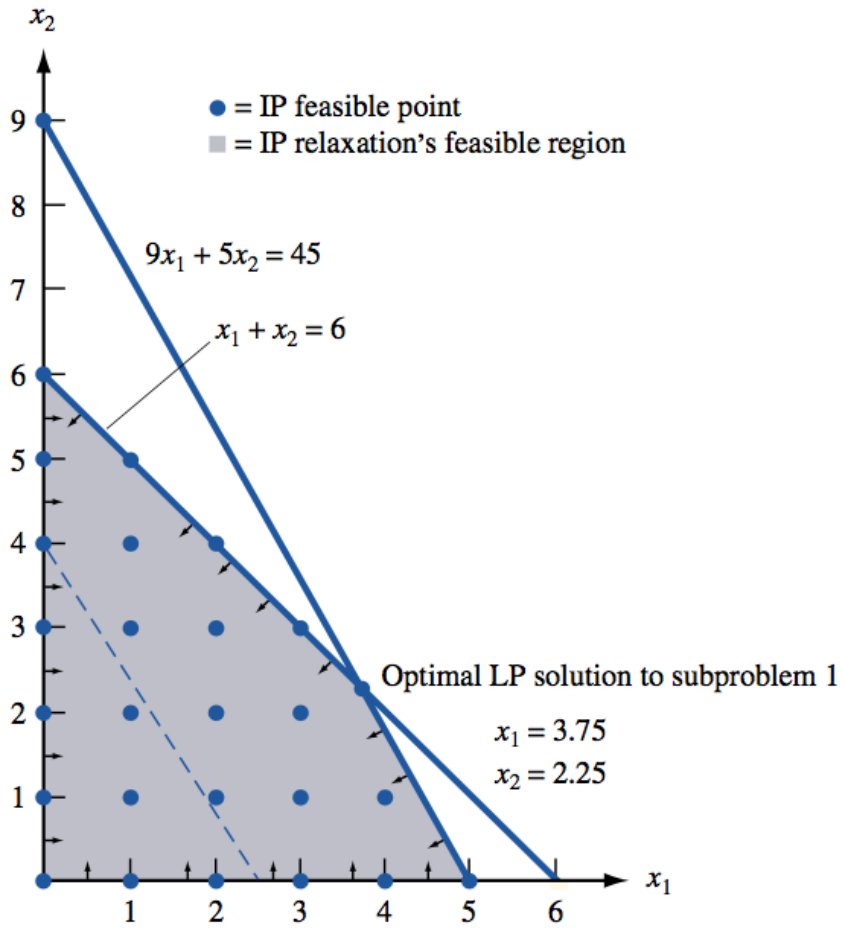
Em inglês: Branch-and-bound

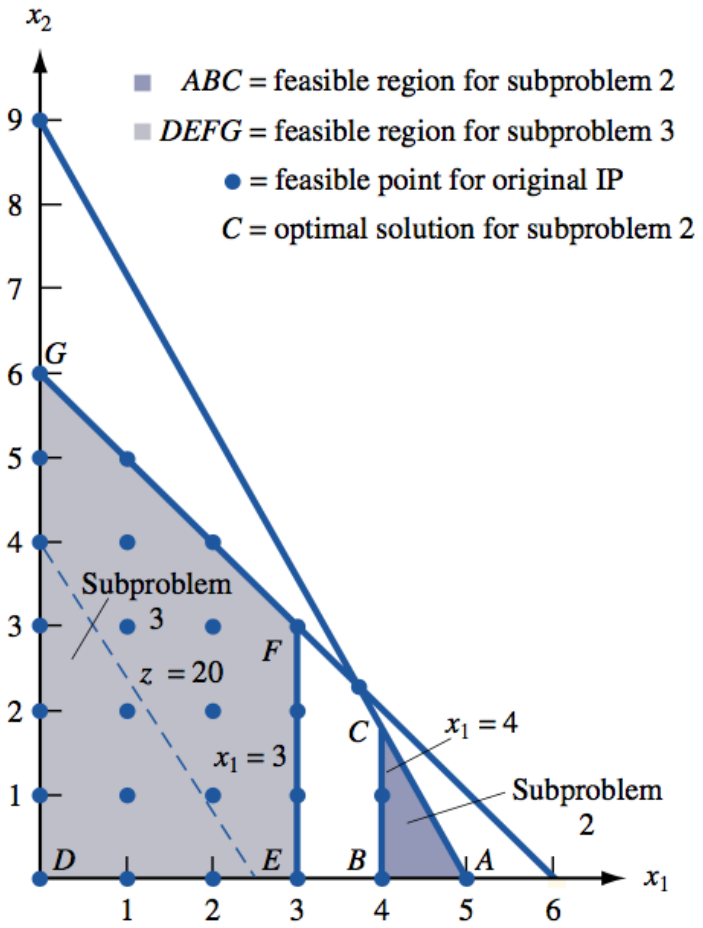
- Resolver a relaxação linear (obtendo x^{LP}, z^{LP})
- Repartir a região admissível por forma a remover a solução anterior, e.g.:
  - escolher variável x_i^{LP} com valor fracionário
  - criar dois subproblemas:
    - SP com retrição $x_i \leq \lfloor x_i^{LP} \rfloor$
    - SP com retrição $x_i \geq \lceil x_i^{LP} \rceil$
- Repetir, enquanto houver variáveis fracionárias

Pesquisa em árvore: exemplo

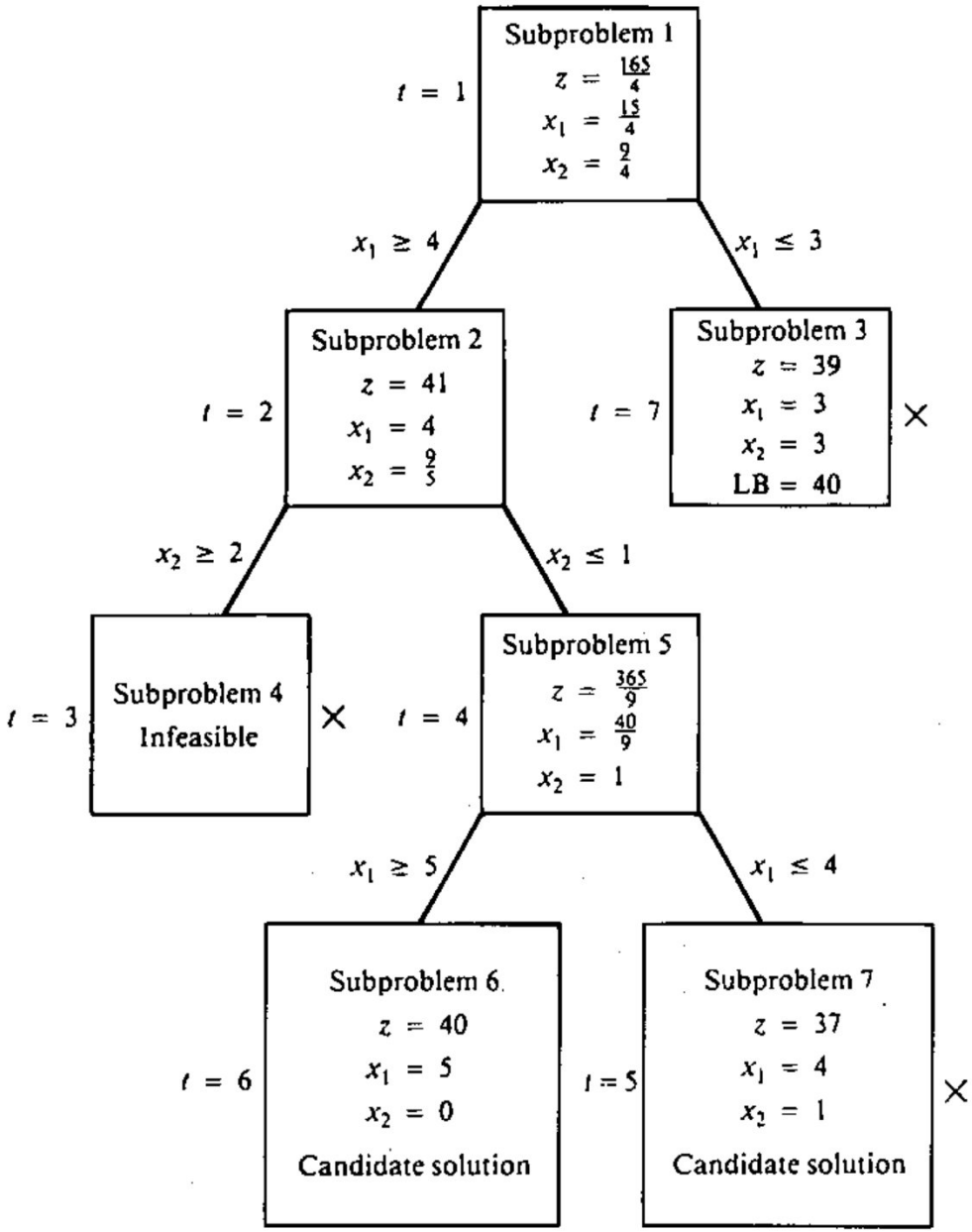
$$
\begin{aligned}
\text{maximizar } z = \quad & 8x_1 + 5x_2 \\
\text{sujeito a} \ : \quad & x_1 + x_2 \leq 6 \\
& 9x_1 + 5x_2 \leq 45 \\
& x_1, x_2 \in \mathbb{Z}^+
\end{aligned}
$$

Pesquisa em árvore: exemplo





Pesquisa em árvore: exemplo



Pesquisa em árvore: algumas alternativas

- Pesquisa não-informada:
  - em profundidade (depth-first search, DFS $\rightarrow$ usada atrás)
  - em largura (breadth-first search, BFS)
- Pesquisa informada:
  - best-first search

Pesquisa em árvore

1. Resolver a relaxação linear (obtendo x^{LP}, z^{LP})
   1. se na solução todas a variáveis forem inteiras: a solução é óptima para o problema original
   2. caso contrário: z^{LP} fornece um majorante para z^* (em maximização)
      - em minimização é um minorante
2. Repartir a região admissível, criando 2 subproblemas:
   1. escolher uma variável fracionária
   2. adicionar restrições que impeçam a variável de voltar a ter esse valor
3. Escolher um dos subproblemas
4. Repetir a partir de 2.
   - terminar quando não houver nenhum subproblema por explorar

Pesquisa em árvore: *bounding*

- Árvore:
  - Nós → subproblemas → resolvidos com relaxação linear
  - Arestas → decisões → reduzir o domínio de variáveis
  - Folhas:
    - se admissíveis → solução candidata
    - caso contrário podem ser descartadas
- Melhor candidata encontrada até ao momento → incumbent solution
- Bounding:
  - descartar nós cujo *bound* (majorante/minorante) é inferior à *incumbent*
- Quando não há mais nós para expandir: → *incumbent* é ótima

Pesquisa em árvore: alternativas

Ordem de visita é importante para tentar manter árvore pequena

Pontos em que são necessárias decisões:

- Escolha do nó da árvore de pesquisa a seleccionar:
  - pesquisa não-informada:
    - em profundidade (depth-first search, DFS)
    - em largura (breadth-first search, BFS)
  - pesquisa informada:
    - best-first search: o nó com melhor majorante/minorante
    - ...
- Escolha da variável para ramificar
  - Frequentemente: a mais fracionária, embora haja muitas heurísticas alternativas.

Problemas de localização

Problemas de localização

- Problema de otimização clássico para determinar os locais de fábricas e armazéns
  - escolher o melhor entre os sites potenciais
  - sujeito a restrições de *satisfação da procura* (encomendas) de clientes
  - objetivo: selecionar locais para instalações, de forma a minimizar os custos totais
- Estrutura de custos típica:
  - parte proporcional a distâncias dos pontos de procura às instalações de atendimento
  - parte relacionada à abertura de instalações
- As instalações podem ter capacidades limitadas
  - FLP capacitado
  - FLP não capacitado
- Veremos várias formulações e seu desempenho

Problema de localização capacitado

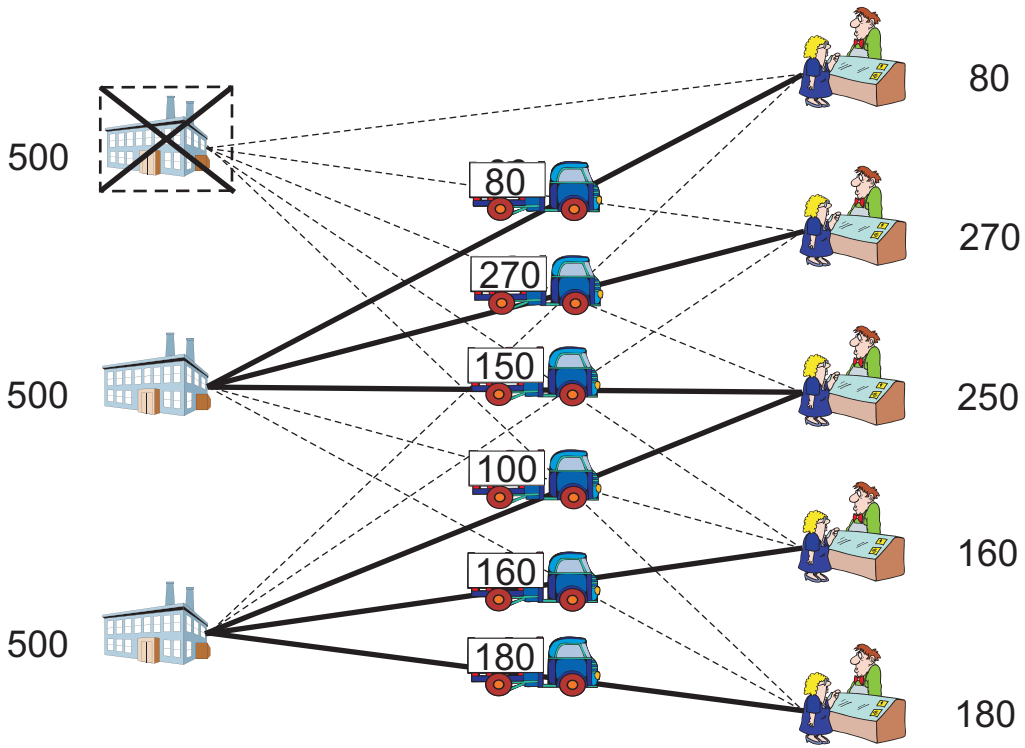
- a procura total que cada instalação pode satisfazer é limitada
- modelagem:
  - satisfação da procura
  - restrições de capacidade

Exemplo

- Uma empresa tem 3 locais onde pode instalar os seus armazéns e 5 pontos de procura
- Cada local j tem um custo de ativação anual f_j
  - e.g., custo de *leasing* anual se a empresa o usar
  - independente do volume que serve
- Volume limitado a um máximo anual M_j
- Custo de transporte c_{ij} por unidade servida do local j ao ponto de procura i

Cliente i	1	2	3	4	5		
Procura anual d_i	80	270	250	160	180		
Local j	custo c_{ij}					f_j	M_j
1	4	5	6	8	10	1000	500
2	6	4	3	5	8	1000	500
3	9	7	4	3	4	1000	500

Exemplo



Cliente i	1	2	3	4	5
Procura anual d_i	80	270	250	160	180

Local j	custo c_{ij}					f_j	M_j
1	4	5	6	8	10	1000	500
2	6	4	3	5	8	1000	500
3	9	7	4	3	4	1000	500

Formulação

- Clientes $i \in I = \{1, 2, \ldots, n\}$
- Locais para instalações $j \in J = \{1, 2, \ldots, m\}$
- Variáveis:
  - $x_{ij} \geq 0 \rightarrow$ quantidade enviada da instalação j ao cliente i
  - $y_j = 1$ se se abrir instalação no local j, $y_j = 0$ c.c.

$$\text{minimizar} \quad \sum_{j \in J} f_j y_j + \sum_{i \in I} \sum_{j \in J} c_{ij} x_{ij}$$

$$\text{sujeito a:} \quad \sum_{j \in J} x_{ij} = d_i \qquad \forall i \in I$$

$$\sum_{i=1}^{n} x_{ij} \leq M_j y_j \qquad \forall j \in J$$

$$x_{ij} \geq 0 \qquad \forall i \in I,\ j \in J$$

$$y_j \in \{0, 1\} \qquad \forall j \in J$$

- Objetivo: minimizar custos de ativação + custos de transporte
- Primeiras restrições: satisfação de procura de clientes
- Segundas restrições: quant. máxima servida por cada local
  - 0 se não for ativado
  - capacidade das instalações se forem ativadas

$$\text{minimizar} \quad \sum_{j \in J} f_j y_j + \sum_{i \in I} \sum_{j \in J} c_{ij} x_{ij}$$

$$\text{sujeito a:} \quad \sum_{j \in J} x_{ij} = d_i \qquad \forall i \in I$$

$$\sum_{i=1}^{n} x_{ij} \leq M_j y_j \qquad \forall j \in J$$

$$x_{ij} \geq 0 \qquad \forall i \in I,\ j \in J$$

$$y_j \in \{0, 1\} \qquad \forall j \in J$$

Modelo em AMPL

```
set I;
set J;
param f {J};
param c {I, J};
param d {I};
param M {J};

var x {I, J} >=0;
var y {J} binary;

subject to
Demand {i in I}: sum {j in J} x[i,j] = d[i];
Supply {j in J}: sum {i in I} x[i,j] <= M[j] * y[j];

minimize cost: sum {j in J} f[j] * y[j] +
               sum {i in I, j in J} c[i,j] * x[i,j];
```

Dados AMPL

```
data;
param: J:  M    f :=  # defines set "J" and param "M" and "f"
       1 500  1000
       2 500  1000
       3 500  1000 ;
param: I:  d :=  # defines set "I" and param "d"
       1  80
       2 270
       3 250
       4 160
       5 180;
param c (tr) :   # (tr) --> transposed
             1  2  3  4  5 :=
      1      4  5  6  8  10
      2      6  4  3  5  8
      3      9  7  4  3  4 ;
```

Formulação para o caso capacitado

- Clientes $i \in I = \{1, 2, \ldots, n\}$
- Locais para instalações $j \in J = \{1, 2, \ldots, m\}$
- Variáveis:
  - $x_{ij} \geq 0 \rightarrow$ quantidade enviada da instalação j ao cliente i
  - $y_j = 1$ se se abrir instalação no local j, $y_j = 0$ c.c.

$$\text{minimizar} \quad \sum_{j \in J} f_j y_j + \sum_{i \in I} \sum_{j \in J} c_{ij} x_{ij}$$

$$\text{sujeito a:} \quad \sum_{j \in J} x_{ij} = d_i \qquad \forall i \in I$$

$$\sum_{i=1}^{n} x_{ij} \leq M_j y_j \qquad \forall j \in J$$

$$x_{ij} \geq 0 \qquad \forall i \in I,\ j \in J$$

$$y_j \in \{0, 1\} \qquad \forall j \in J$$

Caso sem limite na capacidade

Uncapacitated facility location
Problema: restrição

$$\sum_{i=1}^{n} x_{ij} \leq M y_j \qquad \forall j \in J$$

- Como decidir valor de M?

Caso sem limite na capacidade

Uncapacitated facility location
Problema: restrição

$$\sum_{i=1}^{n} x_{ij} \leq M y_j \qquad \forall j \in J$$

- Como decidir valor de M?
- Formulação "correta": $M =$ valor da produra total

Caso sem limite na capacidade

Uncapacitated facility location
Problema: restrição

$$\sum_{i=1}^{n} x_{ij} \leq M y_j \qquad \forall j \in J$$

- Como decidir valor de M?
- Formulação "correta": $M =$ valor da produra total
- Mas podemos melhorar a formulação adicionando

$$x_{ij} \leq d_i y_j \qquad \forall i \in I,\ j \in J$$

  - majorantes nos valores das variáveis (*variable upper bounds*)
  - válida também no caso capacitado
    - redundantes, mas tornam a relaxação mais justa (*tight*)

k-Median

k-Median

Median problem

Escolher um dado número de instalações de um conjunto de pontos possíveis num grafo, de tal forma que a soma das distâncias de cada cliente para a instalação mais próxima é minimizada

- Normalmente, o número k de instalações a escolher é predeterminado
- Problema *k-median*:
  - variante do problema de localização sem capacidades
  - determina a localização de k instalações sem considerar custos fixos
  - cada ponto de procura (cliente) é servido por exatamente uma instalação
  - objectivo: servir todos os pontos de procura com o custo total mínimo

k-Median

- Notação:
  - distancia do cliente i à instalação $j \rightarrow c_{ij}$
  - conjunto de clientes $\rightarrow \{1, \ldots, n\}$
  - conjunto de locais potenciais para instalações $\rightarrow \{1, \ldots, m\}$
  - (frequentemente, instalações e clientes são o mesmo conjunto de pontos; e.g., cidades num país)
- Variáveis:

$$x_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{quando a procura do cliente } i \text{ é satisfeita pela instalação } j \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases}$$

$$y_j = \begin{cases} 1 & \text{se instalação } j \text{ for aberta} \\ 0 & \text{c.c.} \end{cases}$$

The k-Median problem

$$\text{minimizar} \quad \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m} c_{ij}x_{ij}$$

$$\text{sujeito a:} \quad \sum_{j=1}^{m} x_{ij} = 1 \text{ para } i = 1, \cdots, n$$

$$\sum_{j=1}^{m} y_j = k$$

$$x_{ij} \leq y_j \text{ para } i = 1, \cdots, n; j = 1, \cdots, m$$

$$x_{ij} \in \{0, 1\} \text{ para } i = 1, \cdots, n; j = 1, \cdots, m$$

$$y_j \in \{0, 1\} \text{ para } j = 1, \cdots, m$$

- cada cliente i é atribuído a exatamente uma instalação j

$$\sum_{j=1}^{m} x_{ij} = 1 \text{ for } i = 1, \cdots, n$$

- são abertas exatamente k instalações

$$\sum_{j=1}^{m} y_j = k$$

- obrigar instalação j a abrir se servir algum ponto de procura i

$$x_{ij} \leq y_j \text{ for } i = 1, \cdots, n; j = 1, \cdots, m$$

  - formulação mais fraca se substituirmos estas nm restrições pelas n seguintes

$$\sum_{i=1}^{n} x_{ij} \leq y_j, \text{ for } j = 1, \cdots, m$$

  $\rightarrow$ piores valores para a relaxação linear

AMPL model

```
param n;  # number or customers
param m;  # number or facilities
param c {1..n, 1..m};
param k;

var x {1..n, 1..m} binary;
var y {1..m} binary;

minimize cost: sum {i in 1..n, j in 1..m} c[i,j] * x[i,j];

subject to
Serve {i in 1..n}: sum {j in 1..m} x[i,j] = 1;
Kfacil: sum {j in 1..m} y[j] = k;
Activate {i in 1..n, j in 1..m}: x[i,j] <= y[j];
```

AMPL data

```
data;
param n := 5;
param m := 3;
param k := 2;
param c (tr) :    # (tr) --> transposed
             1  2  3  4  5 :=
      1      4  5  6  8  10
      2      6  4  3  5  8
      3      9  7  4  3  4 ;
```

k-Center

k-Center

Center problem

Escolher um dado número de instalações de conjunto de pontos possíveis num grafo, de tal forma que a distância máxima de um cliente para a instalação mais próxima é minimizada.

- variante do problema *k-median*
- escolher subconjunto de vértices como locais para instalações
  - objetivo: deixar cada cliente "próximo" de uma instalação
- número de instalações k predeterminado

k-Center

- Notação (como para *k-median*):
  - distancia do cliente i à instalação $j \rightarrow c_{ij}$
  - conjunto de clientes $\rightarrow \{1, \ldots, n\}$
  - conjunto de locais potenciais para instalações $\rightarrow \{1, \ldots, m\}$
- Variáveis:

$$x_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{quando a procura do cliente } i \text{ é satisfeita pela instalação } j \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases}$$

$$y_j = \begin{cases} 1 & \text{se instalação } j \text{ for aberta} \\ 0 & \text{c.c.} \end{cases}$$

- Distância/custo para o cliente mais distante de uma instalação ativada
  - variável contínua adicional z

k-Center

$$
\begin{aligned}
\text{minimizar} \quad & z \\
\text{sujeito a:} \quad & \sum_{j=1}^{m} x_{ij} = 1 && \text{para } i = 1, \cdots, n \\
& \sum_{j=1}^{m} y_j = k \\
& x_{ij} \leq y_j && \text{para } i = 1, \cdots, n; j = 1, \cdots, m \\
& \sum_{j=1}^{m} c_{ij} x_{ij} \leq z && \text{para } i = 1, \cdots, n \\
& x_{ij} \in \{0, 1\} && \text{para } i = 1, \cdots, n; j = 1, \cdots, m \\
& y_j \in \{0, 1\} && \text{para } j = 1, \cdots, m
\end{aligned}
$$

- Nova restrição:

$$\sum_{j=1}^{m} c_{ij} x_{ij} \leq z \quad \text{for } i = 1, \cdots, n$$

- Determinar z de forma a ter pelo menos o valor c_{ij}
  - para todas as instalações j e todos os clientes i atribuídos a j
  - versão mais fraca (mas talvez mais natural):

$$c_{ij} x_{ij} \leq z, \text{ for } i = 1, \cdots, n; j = 1, \cdots, m$$

  - intuição: na formulação forte estamos a adicionar mais termos ao lado esquerdo $\rightarrow$ região admissível mais estreita
- Novo objetivo: z
  - minimizar o valor máximo $\rightarrow$ objetivo min-max
  - tipo de problemas em que resolutores para otimização matemática tipicamente têm desempenho inferior
  - vem substituir o objetivo de *k-median*

$$\text{minimize} \quad \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{m} c_{ij} x_{ij}$$

AMPL model

```
param n;  # number or customers
param m;  # number or facilities
param c {1..n, 1..m};
param k;

var x {1..n, 1..m} binary;
var y {1..m} binary;
var z >= 0;

minimize maxcost: z;

subject to
Serve {i in 1..n}: sum {j in 1..m} x[i,j] = 1;
Kfacil: sum {j in 1..m} y[j] = k;
Activate {i in 1..n, j in 1..m}: x[i,j] <= y[j];
MinZ {i in 1..n}: sum {j in 1..m} c[i,j] * x[i,j] <= z;
```

Programação: semelhante ao k-median

- Observe diferenças no desempenho
- Observe diferenças na solução

- "Minimização do valor máximo" pode ser reduzido a otimização linear *standard*
  - criar nova variável
  - fazer essa variável pelo menos tão grande como cada um dos valores a minimizar
- Assumindo que queremos minimizar o valor máximo de duas expressões lineares
  - $3x_1 + 4x_2$
  - $2x_1 + 7x_2$.
  - minimizar nova variável z sujeita a:

$$3x_1 + 4x_2 \leq z$$
$$2x_1 + 7x_2 \leq z$$

Tópico relacionado: minimização do valor absoluto

Minimização do valor absoluto $|x|$ de uma variável real x:

- Expressão não linear
- Para a linearizar: adicionar variáveis não negativas y e z
  - $x = y - z \rightarrow$ valor de x em termos de y e z
  - $|x|$ pode ser escrito como $y + z$
- Assim:
  - ocorrências de x na formulação $\rightarrow$ substituídas por $y - z$
  - $|x|$ na função objetivo $\rightarrow$ substituído por $y + z$.
- Outra possibilidade:
  - adicionar variável z
  - impor $z \geq x$ e $z \geq -x$
  - z substitui $|x|$ na função objetivo

Modeling tip

Se possível, deve-se evitar uma função objetivo que minimiza o máximo de valores.

- Otimização inteira $\rightarrow$ resolução com *branch-and-bound*
- Se o objetivo minimizar o máximo valor de um conjunto de variáveis:
  - tendência a ter valores elevados para a diferença entre o minorante e o majorante do objetivo (duality gap)
  - tempo de resolução aumenta
  - se interrompermos *branch-and-bound*, solução *incumbent* costuma ser fraca

Formulações fortes e fracas

Formulações fortes e fracas

- Consideremos o caso sem capacidades
  - qualquer quantidade pode ser servida de qualquer instalação
  - problema de localização sem capacidades
- Uma forma de modelar: arbitrar M muito elevado em

$$\sum_{i \in I} x_{ij} \leq M_j y_j \quad \forall j \in J$$

- Se removermos as restrições redundantes

  $x_{ij} \leq d_i y_j, \quad \forall i \in I, j \in J$
  - problema fica difícil de resolver
    - em especial quando M aumenta
    - *big M pitfall*

Big M

$$\sum_{i \in I} x_{ij} \leq M_j y_j \quad \forall j \in J$$

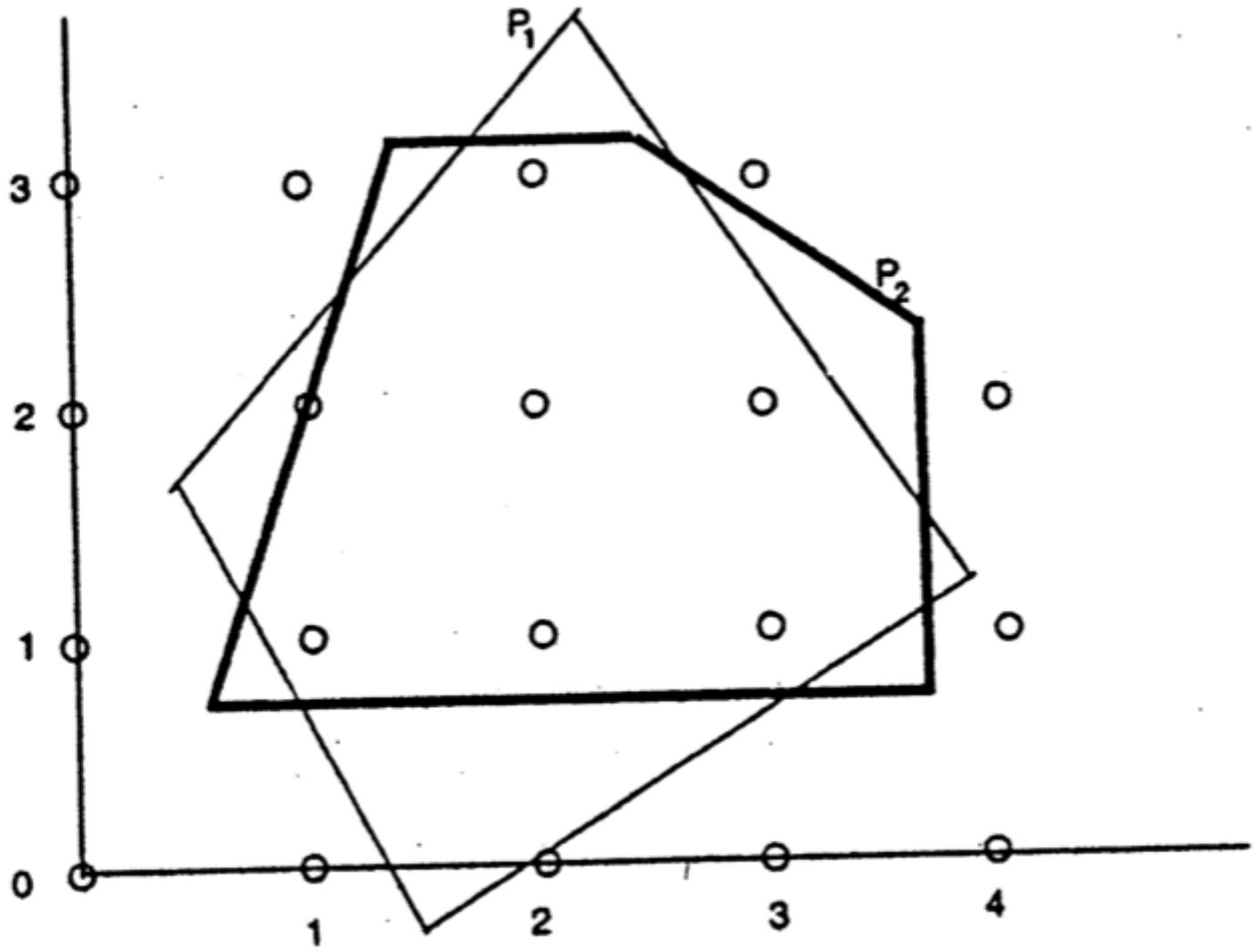
- Ideia: modelar *"se não ativarmos instalação, não podemos transportar nada de lá"*
- Parametro M representa um valor suficientemente grande
  - restrição deve ser limitante se $y_j = 0$
  - não deve ser limitante no caso contrário

Definição: formulações fortes e fracas

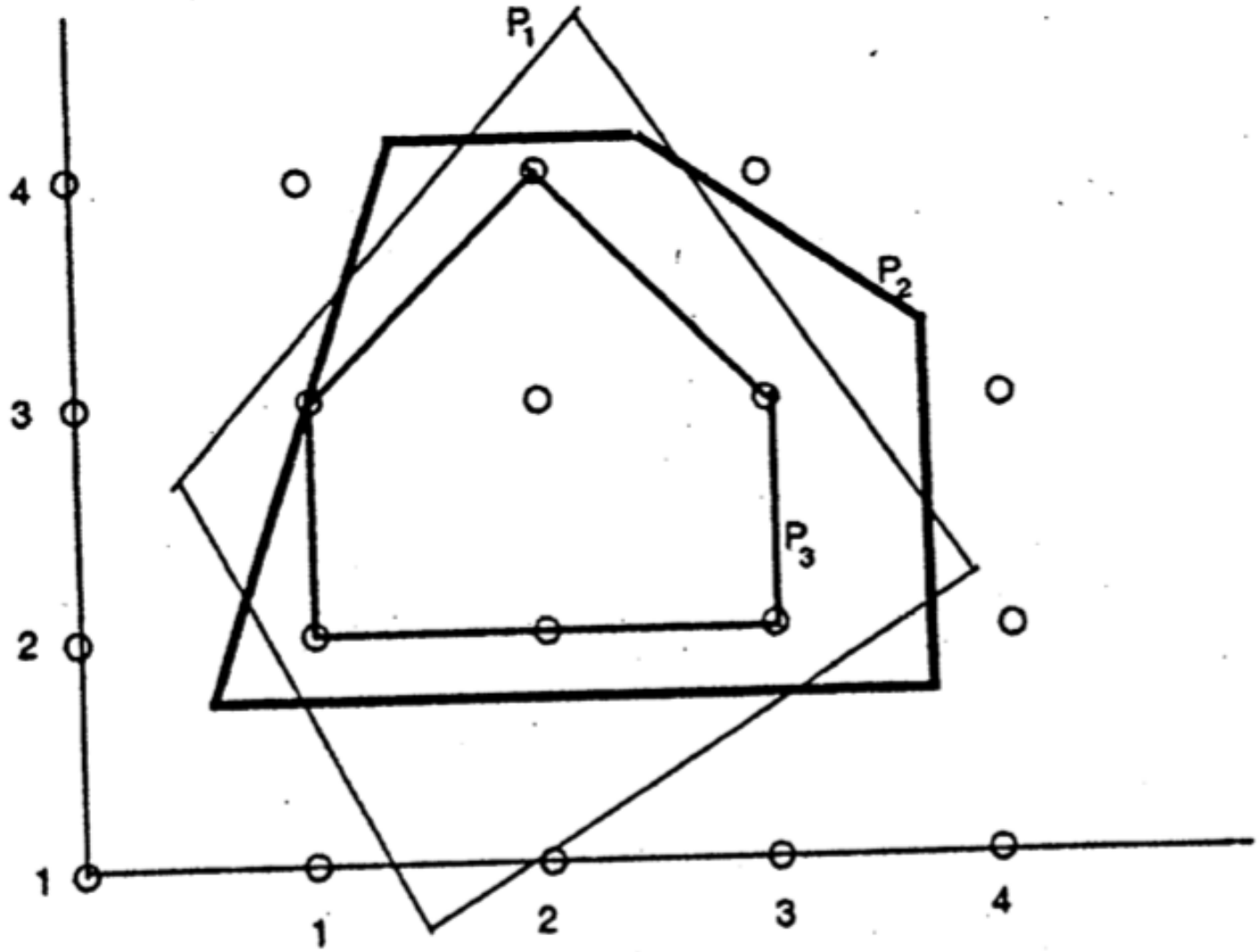
- Para um mesmo problema: duas formulações A e B
- Relaxação linear:
  - excluir restrições de integralidade
- Sejam as regiões admissíveis correspondentes P_A e P_B
- Se $P_A \subset P_B \rightarrow$ formulação A é mais forte do que B
  - B é mais fraca do que A

Intuitivamente, se P_A é mais justa do que P_B, o majorante/minorante dado pela relaxação linear fica mais próximo do ótimo do problema inteiro

Formulações diferentes



Formulação ideal



Caso de estudo: problema de localização

- Considere as formulações:
  - $A \rightarrow$ com restrições $x_{ij} \leq d_i y_j$
  - $B \rightarrow$ usando apenas $\sum_{i=1}^{n} x_{ij} \leq \left(\sum_{i=1}^{n} d_i\right) y_j$
- A é mais forte do que B
- Como verificamos:
  - $P_A, P_B \rightarrow$ regiões admissíveis de A e B
  - restrições de B obtêm-se adicionando as de A
  - isso implica que $P_A \subseteq P_B$

Observações

- Para mostrarmos que formulação é mais forte:
  - $P_A \subset P_B$, ou
  - verificar que a solução da relaxação linear de B não está incluída em P_A
- "É sempre preferível usar uma formulação mais forte?"
  - não há uma resposta teórica
  - parte da arte de modelação matemática

Perceção dos efeitos de uma formulação mais forte

- Geralmente, formulação mais forte têm mais restrições e variáveis
  - exemplo anterior:
    - formulação forte: nm restrições
    - fraca: apenas n restrições
- Tempo para resolver a relaxação linear:
  - depende do número de restrições e variáveis
  - provavelmente, mais longo para a formulação mais forte
- Trade-off entre
  - tempos mais curtos para solução das relaxações, em formulações fracas
  - maior número de nós na árvore de pesquisa (branch-and-bound)

Guideline: *como o tamanho da árvore de enumeração aumenta muito rapidamente quando a escala do problema aumenta, mesmo com mais variáveis e restrições as formulações mais fortes são geralmente preferíveis*

Próxima aula:

- Mais exemplos
  - otimização inteira
  - localização sem capacidades
  - qualidade das formulações