Optimierung – Branch-and-Bound

Algorithmen und Datenstrukturen VU 186.866, 5.5h, 8 ECTS, 2023S Letzte Änderung: 22. Mai 2023 Quiz

Vorlesungsfolien



Kombinatorische Optimierung

Kombinatorische Optimierung: Es geht bei der kombinatorischen Optimierung darum, aus einer (großen) Menge von diskreten Elementen (Gegenstände, Orte usw.) eine Teilmenge zu konstruieren,

- die gewissen Nebenbedingungen entspricht
- und bezüglich einer Kostenfunktion optimal ist (kleinstes Gewicht, kürzeste Strecken, . . .).

Kombinatorische Optimierungsaufgaben

Kombinatorische Optimierungsaufgaben: Wir haben bereits mehrere kombinatorische Optimierungsaufgaben in der Vorlesung betrachtet, z.B.

- Minimaler Spannbaum eines Graphen
- Kürzeste Wege in einem Graphen
- Minimales Vertex oder Set Cover
- Maximales Independent Set
- Minimale Knotenfärbung

manches davon NP-schuce anderes polynomiel los bas

Algorithmen-Paradigmen: Wir haben Methoden für das Lösen solcher Aufgaben kennengelernt, z.B. Greedy- Konstruktionsverfahren.

Hinweis: Greedy-Konstruktionsverfahren funktionieren aber nicht bei allen Problemen!

Optimierung: Schwere Probleme

Schwere Probleme: In dieser LVA wurden schon einige Probleme besprochen, für die es unwahrscheinlich ist, dass Lösungsverfahren existieren, die alle möglichen Instanzen eines bestimmten Problems in polynomieller Zeit lösen.

eines bestimmten Problems in polynomieller Zeit lösen.

Anwendung: In dieser und den nachfolgenden Einheiten werden wir uns mit Verfahren beschäftigen, die bei solchen Problemen grundsätzlich angewendet werden können.

Verfahren für Optimierungsprobleme:

- Branch-and-Bound
- Dynamische Programmierung
- Approximation(salgorithmen)
- Heuristische Verfahren

underschiedl. trade-offs

Optimierung: Roadmap

Branch-and-Bound: Beschränke eine auf Divide-and-Conquer basierende systematische Durchmusterung aller Lösungen mit Hilfe von Methoden, die untere und obere Schranken liefern, und ermittle eine optimale Lösung.

Dynamische Programmierung

hente trade-off: Verzicht auf Polynomial-

Approximation(salgorithmen)

Heuristische Verfahren

Überblick

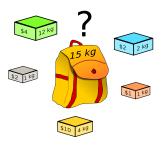
Rucksackproblem

Branch-and-Bound für das Rucksackproblem

Branch-and-Bound für Minimales Vertex Cover

Rucksackproblem

Gegeben: n Gegenstände mit positiven rationalen Gewichten g_1, \ldots, g_n und Werten w_1, \ldots, w_n und eine Kapazität G (auch positiv rational).



Gesucht: Teilmenge S der Gegenstände mit Gesamtgewicht $\leq G$ und maximalem Gesamtwert.

Rucksackproblem: Mathematische Formulierung

Entscheidungsvariablen: Wir führen 0/1-Entscheidungsvariablen für die Wahl der Gegenstände ein:

$$x_1,\dots,x_n, \text{ wobei } x_i = egin{cases} 0 & \text{falls Gegenstand } i \text{ nicht gewählt wird} \\ 1 & \text{falls Gegenstand } i \text{ gewählt wird} \end{cases}$$

Mathematische Formulierung: Für *n* Gegenstände:

$$\sum_{i=1}^{n} w_i x_i$$
, = Wart des edryepachten
Creyenstände / Zie (fant).

wobei

$$\sum_{i=1}^n g_i x_i \leq G, \quad x_i \in \{0,1\}$$
 Nebenbed., dass ka pazi tat ingel. wird

Rucksackproblem: Enumeration (Backtracking)

Enumeration: Eine Enumeration aller zulässigen Lösungen für das Rucksackproblem entspricht der Aufzählung aller Teilmengen der n-elementigen Menge (bis auf diejenigen Teilmengen, die nicht in den Rucksack passen). -5 Sind 2^n mößt. Teilm.

Lösungsvektor und Zielfunktion: Zu jedem aktuellen Lösungsvektor $\vec{x} = (x_1, \dots, x_n)$ gehört ein Zielfunktionswert (Gesamtwert von \vec{x}) $w_{\rm curr}$ und ein Gesamtgewicht $g_{\rm curr}$. Die bisher beste gefundene Lösung wird in dem globalen Vektor $\vec{x}_{\rm best}$ und der zugehörige Lösungswert in der globalen Variablen $w_{\rm max}$ gespeichert.

Prinzip: Wir folgen wiederum dem Prinzip des Divide-and-Conquer.

Rucksackproblem: Enumerationsalgorithmus

Eingabe: Anzahl z der fixierten Variablen in \vec{x} ; Gesamtwert w_{curr} ; Gesamtgewicht q_{curr} ; aktueller Lösungsvektor \vec{x} .

```
Enum(z, w_{\text{curr}}, g_{\text{curr}}, \vec{x}):
if g_{\text{curr}} \leq G // ist noch Platz?
                                                      (1_{i}0, ^{\lambda_{i}}, ^{\lambda_{i}}1_{i}\cdot) \quad (^{\lambda_{i}}0, ^{\lambda_{i}}, ^{\lambda_{i}}0, ^{\lambda_{i}})
```

- Hinweis:
 - w_{max} und \vec{x}_{best} sind globale Variablen.
 - Initialisierung: $w_{\text{max}} = 0$ und $\vec{x}_{\text{best}} = 0$

Enum (0,0,0,0)

Rucksackproblem: Enumerationsalgorithmus

Ablauf: Der Algorithmus wird mit dem Aufruf Enum $(0,0,0,\vec{0})$ gestartet.

- In jedem rekursiven Aufruf wird die aktuelle Lösung \vec{x} bewertet.
- Danach werden die Variablen x_1 bis x_2 als fixiert betrachtet.
- Der dadurch beschriebene Teil des gesamten Suchraums wird weiter unterteilt: Wir betrachten alle möglichen Fälle, welche Variable x_i (mit i = z + 1 bis i = n) als nächstes auf 1 gesetzt werden kann.
- Die Variablen x_{z+1} bis x_{i-1} werden gleichzeitig auf 0 fixiert.
- Alle so erzeugten kleineren Unterprobleme werden durch rekursive Aufrufe gelöst.

Komplexität: Es gibt bis zu 2^n rekursive Aufrufe und der Aufwand pro Aufruf (exklusive Rekursion) ist konstant. Daher liegt die Laufzeit in $O(2^n)$.



Branch-and-Bound

Rucksackproblem: Verbesserung der Enumeration

ldee zur Verbesserung: Uberprüfen von Zwischenlösungen mit z < n fixierten Variablenwerten.

- Man überprüft, ob es noch möglich sein kann, aus dieser Lösung durch Hinzufügen weiterer Gegenstände eine zu erzeugen, die besser ist als die bisher beste gefundene.
- Wenn es offensichtlich ist, dass keine neue beste Lösung abgeleitet werden kann, dann sind weitere rekursive Aufrufe nicht sinnvoll.
- Das frühzeitige Abbrechen führt zu einer Beschneidung des rekursiven Aufrufbaums.
- Das kann eine erhebliche Beschleunigung bewirken.

Branch-and-Bound: Rucksackproblem (Maximierung)

Ansatz:

- Berechne obere Schranke U', und führe den Aufruf nur durch, wenn der Wert $U'>w_{\max}$.

 Listing to know die Lsg. in die Schranke noch wesden?
- Sortiere die Gegenstände nach nicht-steigenden Werten $\frac{w_i}{g_i}$.

```
Vet-Gevichts-Quotient
Enum(z, w_{\text{curr}}, q_{\text{curr}}, \vec{x}):
if q_{\rm curr} < G
       if w_{\rm curr} > w_{\rm max}
                                                  Resthap. bestmood. Gregerstand byl. West acwicht
              w_{\text{max}} \leftarrow w_{\text{curr}}
              \vec{x}_{\text{best}} \leftarrow \vec{x}
       for i \leftarrow z+1 bis_n
              if U' > w_{\text{max}}
                      x_i \leftarrow 1
                      Enum(i, w_{\text{curr}} + w_i, g_{\text{curr}} + g_i, \vec{x})
                      x_i \leftarrow 0
```

Branch-and-Bound: Rucksackproblem

Obere Schranke:
$$U' \leftarrow w_{\text{curr}} + (G - g_{\text{curr}}) \cdot \frac{w_i}{g_i}$$

Erklärung:

- $w_{\rm curr}$ enthält den Wert der bisherigen Zuteilung.
- $G g_{\text{curr}}$ ist die verbleibende Kapazität im Rucksack.
- Die verbleibende Kapazität wird mit dem aktuell untersuchten Gegenstand *i* komplett (vielleicht auch mehrmals) aufgefüllt. Hierbei kann es auch zu teilweisen Zuteilungen kommen (z.B. Gegenstand *i* wird 1,7 mal eingepackt).
- Da die Gegenstände nach nicht-steigenden Werten $\frac{w_i}{g_i}$ sortiert sind, haben alle Gegenstände i+1, i+2, ..., n einen relativen Wert kleiner als der von i.
- Damit wird die obere Schranke U' garantiert größer gleich dem Wert der optimalen Lösung sein (für dieses Teilproblem).

Prinzip von Branch-and-Bound: Maximierungsproblem

Branching: Wie bei der Enumeration üblich wird das Problem rekursiv in kleinere Teilprobleme partitioniert $\rightarrow Divide-and-Conquer-Prinzip$.

Bounding: Für jedes Teilproblem wird

ounding: Für jedes Teilproblem wird

eine lokale obere Schranke U' (upper bound) und

eine lokale untere Schranke L' (lower bound)

Worst case

berechnet. = Wmax

Abbruch: Teilprobleme mit $U' \leq L$ (L entspricht einer globalen unteren Schranke) brauchen nicht weiter verfolgt werden!

Schranken:

- Der Wert jeder gültigen Lösung ist eine untere Schranke.
- Obere Schranken werden i. A. separat mit einer sogenannten Dualheuristik hier im Bsp. A. Millen mit besten agenstand ermittelt.

Rucksackproblem: Verbesserte untere Schranke

Sortierung: Die Gegenstände werden nicht-steigend nach ihren Werten $\frac{w_i}{g_i}$ sortiert.

Untere Schranke: Man durchläuft alle Gegenstände, deren Variablen noch nicht festgelegt sind, in der sortierten Reihenfolge und packt den jeweils aktuellen Gegenstand ein, falls noch Platz im Rucksack ist. (Greedy-Algorithmus)

gältige, aben nicht notw. Gebe Lösung

Rucksackproblem: Verbesserte obere Schranke

Einfache obere Schranke wurde weiter vorne beschrieben.

Mögliche Verbesserung:

- Alle Gegenstände, deren Variablen noch nicht festgelegt sind, werden in der sortierten Reihenfolge durchlaufen.
- Man packt alle Gegenstände ein, bis man zu dem ersten Gegenstand kommt, der nicht mehr in den Rucksack passt.
- 4:2 0 = 9; 4
- Sei r die noch freie Kapazität des Rucksacks. Dann zählt man $r \cdot w_i/g_i$ noch zu dem Wert der Gegenstände im Rucksack dazu.
 - Der letzte Gegenstand wird daher nur teilweise eingepackt.
 - Alle verbleibenden Gegenstände werden ignoriert.

Lösung:

- Diese Vorgehensweise liefert in der Regel eine Schranke, der keine gültige Lösung des Rucksackproblems entspricht.
- Falls diese Vorgehensweise zu einer gültigen Lösung führt, dann ist die Lösung (für das betrachtete Teilproblem) optimal.

Maximierungsproblem: Vorgehen

Allgemeines Vorgehen:

- Das Problem wird z.B. durch das Fixieren von Variablen oder Hinzufügen von Randbedingungen in Unterprobleme zerteilt, d.h. der Lösungsraum wird partitioniert.
- Ist für eine (oder mehrere) dieser Teilmengen die für sie berechnete obere Schranke U' nicht größer als die beste überhaupt bisher gefundene untere Schranke L (= Wert der bisher besten Lösung), braucht man die Lösungen in dieser Teilmenge nicht mehr beachten.
- Ist die obere Schranke größer als die beste gegenwärtige untere Schranke, muss man die Teilmengen weiter zerkleinern. hound besser (sq. qube.
- Man fährt solange mit der Zerteilung fort, bis für alle Lösungsteilmengen die obere Schranke nicht mehr größer ist als die (global) beste untere Schranke.

Maximierungsproblem: Allgemeiner Algorithmus

Eingabe: Instanz I

```
Branch-and-Bound-Max(I):
L \leftarrow -\infty oder Wert einer initialen heuristischen Lösung
\Pi \leftarrow \{I\} I Mense d. To: I probleme
while \exists I' \in \Pi
    Entferne I' aus \Pi \leftarrow veldes?
    Berechne für I^\prime lokale obere Schranke U^\prime mit Dualheuristik
    if U'>L wile suder?
        Berechne für I' gültige heuristische Lösung 
ightarrow untere Schranke L'
        Partitioniere I' in Teilinstanzen I_1, \ldots, I_k
            \Pi = \Pi \cup \{I_1, \dots, I_k\}
return beste gefundene Lösung mit Wert L
```

- \blacksquare Bounding Fall U' < L nicht weiter interessant.
- Branching.

Maximierungsproblem: Allgemeines Verfahren

Allgemeines Verfahren:

- Branch-and-Bound ist ein allgemeines Prinzip (Metaverfahren).
- Es kann auf verschiedenste diskrete Optimierungsprobleme angewendet werden.
- Entscheidend für die Effizienz ist
 - vor allem die Wahl der Heuristiken für U' und L',
 - wie das Branching erfolgt und
 - welche Teilinstanz ausgewählt wird.

Gegeben: 4 Gegenstände, Rucksackkapazität = 100

Gegenstand	1	2	3	4
Gewicht g_i	32	16	21	50
Wert w_i	80	20	63	100
Verhältnis w_i/g_i	2.5	1.25	3	2

2. 4. 1. 3.

Sortierung:

- \blacksquare Für jeden Gegenstand i das Verhältnis w_i/g_i berechnen.
- Sortierte Reihenfolge der Gegenstände: 3 (3), 1 (2.5), 4 (2), 2 (1.25)



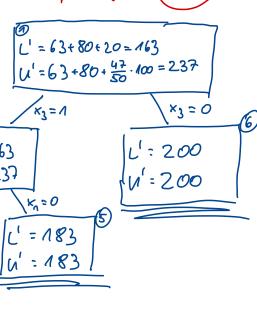
Branch-and-Bound-Baum:

4 Gegenstände, Rucksackkapazität = 100

Gegenstand	1	2	3	4
Gewicht g_i	32	16	21	50
Wert w_i	80	20	63	100
Verhältnis w_i/g_i	2.5	1.25	3	2

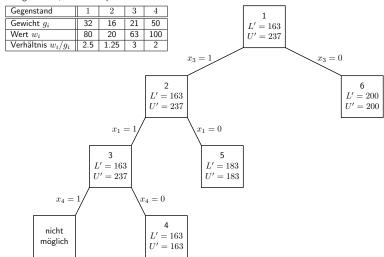
2. 4. 0. 3.

x, =1



Branch-and-Bound-Baum:

4 Gegenstände, Rucksackkapazität = 100



Erklärung:

- In 1 (Start) sind noch keine Variablen fixiert.
- In 2 geht man davon aus, dass Gegenstand 3 (x_3) fixiert ist und nur die anderen Gegenstände ausgewählt werden können.
- Eine Fixierung von Gegenstand 3, 1 und 4 führt zu einer unmöglichen Lösung (würde eine Kapazität von 103 benötigen)
- Bei 4 und 5 ist L=U und daher brauchen in diesem Unterbaum keine weiteren Gegenstände hinzugefügt werden (Beschneiden des rekursiven Aufrufbaums).
- Bei 6 ist auch L=U (der Unterbaum braucht nicht mehr untersucht werden) und L ist hier am größten. Daher werden Gegenstand 1, 2 und 4 eingepackt ($x_3=0$).

Quiz

Frage 1: In welchen Fällen kann man die Branch-and-Bound Suche für eine Teilinstanz bei einem Maximierungsproblem abbrechen?

- Lokale untere Schranke ist größer als globale untere Schranke
- Lokale obere Schranke entspricht lokaler unterer Schranke
- Globale untere Schranke ist größer als lokale obere Schranke
- Lokale untere Schranke ist kleiner als globale untere Schranke

Quiz Auflösung

Frage 1: In welchen Fällen kann man die Branch-and-Bound Suche für eine Teilinstanz bei einem Maximierungsproblem abbrechen?

- × Lokale untere Schranke ist größer als globale untere Schranke
- ✓ Lokale obere Schranke entspricht lokaler unterer Schranke
- ✓ Globale untere Schranke ist größer als lokale obere Schranke
- × Lokale untere Schranke ist kleiner als globale untere Schranke

Branch-and-Bound: Auswahl des nächsten Teilproblems

Auswahl des nächsten Teilproblems:

- Welches Teilproblem aus der Liste der offenen Probleme jeweils als nächstes ausgewählt und bearbeitet wird, ist für die grundsätzliche Funktionsweise und Korrektheit von Branch-and-Bound egal.
- Die Auswahl hat jedoch mitunter starke Auswirkungen auf die praktische Laufzeit.

Beispiele für Strategien:

- Best-first
- Depth-first

Branch-and-Bound: Auswahl der Probleme

Best-first:

- Es wird jeweils ein Teilproblem mit der besten dualen Schranke (also der größten oberen Schranke) ausgewählt.
- Dadurch wird immer die kleinstmögliche Anzahl an Teilproblemen abgearbeitet.

Depth-first:

- Es wird jeweils ein zuletzt erzeugtes Teilproblem weiter bearbeitet (vergleiche Tiefensuche bei der Durchmusterung von Graphen).
- Man erhält meist am raschesten eine vollständige und gültige Näherungslösung.
- Häufig wird auch mit einer Depth-first Strategie begonnen und nach Erhalt einer gültigen Lösung mit Best-first fortgesetzt um die Vorteile zu kombinieren.

Minimierungsproblem: Allgemeiner Algorithmus

Eingabe: Instanz I

```
Branch-and-Bound-Min(I):
U \leftarrow \infty oder Wert einer initialen heuristischen Lösung
\Pi \leftarrow \{I\}
                                           2 best case
while \exists I' \in \Pi
    Entferne I' aus \Pi
     Berechne für I^\prime lokale untere Schranke L^\prime mit Dualheuristik
    if L' < U
         Berechne für I' gültige heuristische Lösung 	o obere Schranke U'
         if U' entspricht einer gültigen Lösung für I'
              if U' < U
                   U \leftarrow U'
         if L' < U
              Partitioniere I' in Teilinstanzen I_1, \ldots, I_k
              \Pi \leftarrow \Pi \cup \{I_1, \ldots, I_k\}
{f return} beste gefundene Lösung mit Wert U
```

lacksquare Bounding - Fall $L' \geq U$ nicht weiter interessant. lacksquare Branching.

Eingabe: Graph G = (V, E) und Knotenmenge $C = \emptyset$

```
MinVertexCover-BranchAndBound(G, C):
U \leftarrow |V| - 1 trivide Schrenke
\Pi \leftarrow \{(G,C)\}
while \exists I' \in \Pi
    Entferne I' aus \Pi
    Berechne für I' = (G', C') lokale untere Schranke L' mit Matchingheuristik
    if L' < U
          Berechne für I^\prime gültige heuristische Lösung mit Greedyheuristik
               \rightarrow obere Schranke U'
          if U' < U
               II \leftarrow II'
         if L' < U
               u_{\max} \leftarrow \text{Knoten mit maximalem Grad in } G'
               Erzeuge Teilinstanzen I_1 = (G' - \{u_{\max}\}, C \cup \{u_{\max}\}) und
                   I_2 = (G' - \{u_{\text{max}}\} - N(u_{\text{max}}), C \cup N(u_{\text{max}}))
               \Pi \leftarrow \Pi \cup \{I_1, I_2\}
                                                                niam elle Nachb. von uma.
{f return} beste gefundene Lösung mit Wert U
```

 \blacksquare alle Nachbarknoten von u_{\max}

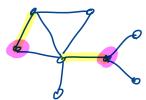
Untere Schranke: Wird mit Hilfe eines Matchings bestimmt.

- Sei ein Graph G = (V, E) gegeben.
- \blacksquare Eine Menge $M\subseteq E$ heißt Matching, wenn keine zwei Kanten aus M einen Knoten gemeinsam haben.

Nicht erweiterbares Matching:

- Nicht erweiterbares Matching (maximales Matching) bedeutet, dass es keine Kante $e \in E \setminus M$ gibt, sodass $\{e\} \cup M$ ein gültiges Matching ist.
- Das ist nicht notwendigerweise ein größtes Matching.
- Nicht erweiterbares Matching kann mit einem Greedy-Verfahren gefunden werden.

besits voster gewählte Kroten



Berechnung der unteren Schranke L' für die Instanz (G', C'):

 \blacksquare Man wählt für L' die Größe eines nicht erweiterbaren Matchings.

- Dabei wird zunächst eine beliebige Kante e=(u,v) gewählt und dann die Knoten u und v und ihre inzidenten Kanten aus G' entfernt.

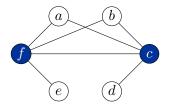
 Man fährt mit dieser Prozedur fort, bis keine Kante mehr vorhanden ist.

 Die Anzahl der gewählten Kanten entspricht der Größe des Matchings.

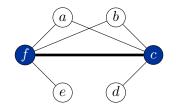
 - Kanten in einem Matching haben keine Knoten gemeinsam.
 - Ein Vertex Cover muss zumindest einen Knoten für jede Kante in einem Matching wählen.
 - Daher ist die Größe eines Matchings von G' plus die Größe von C' eine untere Schranke für die Größe eines Vertex Covers des Eingabegraphen G.

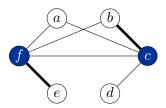
Branch-and-Bound: Beispiel für untere Schranke

Vertex Cover: Vertex Cover mit k=2



Greedy-Matching: 2 Beispiele für Greedy-Matching (fett eingezeichnet Kanten).





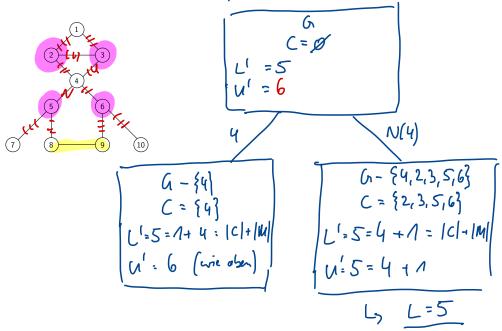
Obere Schranke U': Wird mit Hilfe eines Greedy-Algorithmus bestimmt.

- Sei ein Graph G' = (V', E') und eine Knotenmenge C' gegeben.
- Initialisiere eine Menge $S \leftarrow \emptyset$.
- Sortiere die Knoten nicht-steigend nach dem Knotengrad.
- **Durchlaufe** V' in dieser Reihenfolge solange der Graph noch Kanten enthält.
 - Füge den Knoten u mit höchstem Knotengrad zu S hinzu.
 Entferne u und alle seine inzidenten Kanten aus G'.

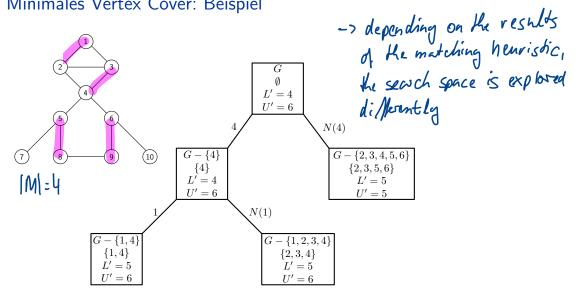
 Who Fengrad

 - Passe die Reihenfolge der verbleibenden Knoten an.
- Die Menge S ist ein Vertex Cover für G'.
- Daher ist |C'| + |S| eine obere Schranke für die Größe eines minimalen Vertex Covers des Eingabegraphen G.

Minimales Vertex Cover: Beispiel



Minimales Vertex Cover: Beispiel



Quiz

Frage 2: Welche Aussagen zu Branch-and-Bound sind korrekt?

- Branch-and-Bound für ein Minimierungsproblem funktioniert umso besser, je kleiner die lokalen oberen Schranken sind.
- Branch-and-Bound für ein Minimierungsproblem funktioniert umso besser, je kleiner die lokalen unteren Schranken sind.
- Wenn ein Branch-and-Bound Algorithmus das nächste Teilproblem schlecht auswählt, kann es sein, dass keine optimale Lösung gefunden wird.
- Wenn ein Branch-and-Bound Algorithmus für Vertex Cover Laufzeit in $O(n^3)$ hat, so gilt P = NP.

Quiz Auflösung

Frage 2: Welche Aussagen zu Branch-and-Bound sind korrekt?

- ✓ Branch-and-Bound für ein Minimierungsproblem funktioniert umso besser, je kleiner die lokalen oberen Schranken sind.
- × Branch-and-Bound für ein Minimierungsproblem funktioniert umso besser, je kleiner die lokalen unteren Schranken sind.
- × Wenn ein Branch-and-Bound Algorithmus das nächste Teilproblem schlecht auswählt, kann es sein, dass keine optimale Lösung gefunden wird.
- \checkmark Wenn ein Branch-and-Bound Algorithmus für Vertex Cover Laufzeit in $O(n^3)$ hat, so gilt P=NP.

Branch-and-Bound: Zusammenfassung

- Branch-and-Bound ist eine allgemein für kombinatorische Optimierungsprobleme einsetzbare Technik.
 berechnot optimale Lösungen
- Sie funktioniert sowohl für Maximierungs- als auch für Minimierungsprobleme.
- Praktisch lassen sich oft hohe Beschleunigungen erreichen, die worst-case Laufzeit bleibt jedoch wie bei der Enumeration.

Vorgehen beim Entwurf von Branch-and-Bound Algorithmen:

- Wie lassen sich (Teil-)Instanzen des Problems ausdrücken?
- Was sind gute Heuristiken für untere und obere Schranken?
- Wie wird eine (Teil-)Instanz in weitere Teilinstanzen partitioniert (Branching)?
- Welche Teilinstanz wird im nächsten Schritt ausgewählt?