دانشگاه صنعتی امیرکبیر(پلی‌تکنیک تهران)

دانشکده ریاضی و علوم کامپیوتر

گزارش پروژه دوم درس بهینه‌سازی ترکیبیاتی

تیر ۱۴۰۲

استاد درس : دکتر هوشمند خلیق

اعضا گروه:

سارا محمدزاده ۹۸۱۳۰۲۶

سلین هوبد ۹۸۱۳۰۳۲

محیا پاشاپور ۹۸۱۲۰۰۹

خوشه بندی و رگرسیون، دو مفهوم مهم روز هستند که برنامه‌های خطی عدد صحیح مختلط (MILP) می‌توانند آنها را به کمک سالورهای تجاری به سرعت حل کنند. در مقاله مرجع، چند مدل MILP معرفی شده‌اند که با متغیرهای باینری و مفاهیم منطقی، قادر به مسائل رگرسیون خطی خوشه‌ای دو متغیره (CLR) و رگرسیون تکه‌ای خطی (PWLR) (پیوسته) هستند.
ابتدا، جزئیات برخی از مدل‌های ارائه شده را بررسی نموده و سپس به کمک نتایج بدست آمده از کدهای پایوموی مربوط به مدل‌ها، به مقایسه و اعتبار سنجی خواهیم برداخت.

۱ مدل استاندارد یک رگرسیون خطی

$$
\begin{aligned}
\underline{\text{LR}}: \quad & \min \quad \sum_{i=1}^{I} \xi_i \\
\text{s.t.} \quad & Y_i - (cX_i + d) \le \xi_i && \forall\, i \in [I] \\
& (cX_i + d) - Y_i \le \xi_i && \forall\, i \in [I] \\
& \xi_i \ge 0 && \forall\, i \in [I] \\
& c \in [\underline{C}, \overline{C}],\ d \in [\underline{D}, \overline{D}]
\end{aligned}
$$

همانطور که مشخص است، این رگرسیون به صورت یک متغیره می‌باشد، به این معنا که فقط یک فیچر مدنظر است و بنابراین مقادیر X_i تک مولفه‌ای بوده و هریک دارای برچسبی با مقدار Y_i هستند. هدف، یافتن ضابطه‌ی خط گذرنده از میان نقاط با مختصات (X_i, Y_i) به ازای هرنقطه، قدرمطلق اختلاف Y_i (مقدار واقعی) با خط $cX_i + d$ (مقدار تقریبی X_i) خطای متناظر نقطه است که باید کمینه شود. به عبارتی در تابع هدف اولیه، مجموع خطای تمامی نقاط کمینه می‌شود و به صورت غیرخطی زیر است:

$$
\min \qquad \sum_{i=1}^{I} |Y_i - (cX_i + d)|
$$

جهت خطی‌سازی، متغیر ξ_i به جای قدرمطلق در تابع هدف جایگزین شده و سپس دو قید اول این مدل اضافه می‌شوند. بنابراین، مجموع تمامی ξ_i در تابع هدف کمینه شود.
کران متغیرهای پیوسته c و d طبق ارجاع مقاله، به روش زیر تعیین می‌شود که در آن $\kappa = 0$ قرار داده شده است.

$$
\begin{aligned}
\underline{C} &= \min_{i,j:i>j}\left\{\frac{Y_i - Y_j}{X_i - X_j} - \kappa\left|\frac{Y_i - Y_j}{X_i - X_j}\right|\right\} \\
\overline{C} &= \max_{i,j:i>j}\left\{\frac{Y_i - Y_j}{X_i - X_j} + \kappa\left|\frac{Y_i - Y_j}{X_i - X_j}\right|\right\},
\end{aligned}
\qquad
\begin{aligned}
\underline{D} &= \min_i\{Y_i - \overline{C}X_i,\ Y_i - \underline{C}X_i\} \\
\overline{D} &= \max_i\{Y_i - \overline{C}X_i,\ Y_i - \underline{C}X_i\}
\end{aligned}
$$

۲ رگرسیون خطی خوشه‌ای

$$
\begin{aligned}
&(1)\ \underline{\text{CLR}}: \quad \min \quad \sum_{i=1}^{I} \xi_i && && (1a)\\
&\text{s.t.} \quad Y_i - (c_b X_i + d_b) \le \xi_i + M_i^1(1-\delta_{i,b}) && \forall\, i \in [I];\ b \in [B] && (1b)\\
&\qquad (c_b X_i + d_b) - Y_i \le \xi_i + M_i^1(1-\delta_{i,b}) && \forall\, i \in [I];\ b \in [B] && (1c)\\
&\qquad \sum_{b=1}^{B} \delta_{i,b} = 1 && \forall\, i \in [I] && (1d)\\
&\qquad \xi_i \ge 0 && \forall\, i \in [I] && (1e)\\
&\qquad c_b \in [\underline{C}_b, \overline{C}_b] && \forall\, b \in [B] && (1f)\\
&\qquad d_b \in [\underline{D}_b, \overline{D}_b] && \forall\, b \in [B] && (1g)\\
&\qquad \delta_{i,b} \in \{0, 1\} && \forall\, i \in [I];\ b \in [B] && (1h)
\end{aligned}
$$

دراین مدل یک خط $Y_i = cX_i + d$ برای تمامی مقادیر استفاده نشده بلکه ابتدا نقاط خوشه‌بندی شده و تشکیل یک گروه می‌دهند و سپس برای هر خوشه یک رگرسیون جدا انجام می‌شود. بنابراین متناظر با هر خوشه‌ای که نقطه مورد نظر به آن تعلق دارد، شیب c_b و عرض از مبدا d_b ، خط گذرنده از آن یعنی $Y_i = c_bX_i + d_b$ را می‌سازد. تعداد خوشه‌های از پیش تعیین شده B می‌باشد که دراین حالت خاص داده‌ها تک فیچری، از طریق ترسیم یا روش‌هایی دیگر ممکن است.

متغیر دودویی $\delta_{i,b}$ درصورتی که نقطه‌ی i در خوشه b قرار گیرد مقدار ۱ ودر غیر این‌صورت مقدار ۰ خواهد داشت.

حال قیود مدل استاندارد باتوجه به هرخوشه بازنویسی می‌شوند، به این صورت که خطاها نسبت به خوشه‌ای که نقاط درآن قرار می‌گیرند مشخص شده و درنتیجه قدر مطلق اختلاف مقادیر واقعی و تقریبی توسط متغیر دودویی $\delta_{i,b}$ نسبت به خوشه‌ی آن نقطه تعیین می‌شود. قید شرطی زیر را خواهیم داشت:

$$
if \quad \delta_{i,b} = 1 \Longrightarrow |Y_i - (C_bX_i + d_b)| \le \xi_i \qquad \forall i \in [I]; b \in [B]
$$

که معادل است با

$$
if \quad \delta_{i,b} = 1 \Longrightarrow [(Y_i - (C_bX_i + d_b) \le \xi_i] \wedge [(C_bX_i + d_b) - Y_i \le \xi_i] \qquad \forall i \in [I]; b \in [B]
$$

و دو قید زیر را داریم:

$$
if \quad \delta_{i,b} = 1 \Longrightarrow Y_i - (C_bX_i + d_b) \le \xi_i \qquad \forall i \in [I]; b \in [B]
$$

$$
if \quad \delta_{i,b} = 1 \Longrightarrow (C_bX_i + d_b) - Y_i \le \xi_i \qquad \forall i \in [I]; b \in [B]
$$

معادل خطی هردو قید شرطی، قیود (1b) و (1c) در این مدل خواهد شد.

حال باید توجه داشت که هر نقطه فقط می‌تواند در یک خوشه باشد. پس تنها یکی از $\delta_{i,b}$ ها می‌تواند مقدار ۱ بگیرد و به همین علت در قید (1d) مجموع آنها برابر ۱ قرار داده شده است.

همچنین مقادیر M_i^1 به صورت زیر تعیین می‌شوند.

$$
M_i^1 = \max\{|Y_i - \overline{C}X_i - \overline{D}|, |Y_i - \overline{C}X_i - \underline{D}|, |Y_i - \underline{C}X_i - \overline{D}|, |Y_i - \underline{C}X_i - \underline{D}|\} \qquad \forall\, i \in [I].
$$

نکته نامطلوب این مدل، تعیین دلخواه خوشه‌هاست که سبب می‌شود از نظم لازم یعنی نزدیکی داده‌های مشابه برخوردار نباشد. لذا ممکن است انتخاب خوشه نامناسب باشد.

۳ متریک فاصله

$$
\begin{aligned}
\min \quad & \xi \\
\text{s.t.} \quad & Y_i - (c_b X_i + d_b) \leq \xi + M_i^1(1-\delta_{i,b}) \quad \forall\, i \in [I];\; b \in [B] \\
& (c_b X_i + d_b) - Y_i \leq \xi + M_i^1(1-\delta_{i,b}) \quad \forall\, i \in [I];\; b \in [B] \\
& \xi \geq 0
\end{aligned}
$$

در این مدل، رگرسیون انجام شده روی همه خوشه‌ها، نسبت به یک خطای ξ صورت می‌گیرد. درنتیجه در تابع هدف، بیشترین مقدار اختصاص یافته به ξ قرار می‌گیرد تا در تمامی قیود مربوط به خطا صدق کند و درنهایت بیشترین خطای ممکن، کمینه شود. به عبارتی، با یک مساله کمترین بیشینه مواجه هستیم. قیود مدل به شیوه‌ی قبل تعریف و خطی‌سازی شده با این تفاوت که فقط یک متغیر پیوسته و نامنفی خطا برای تمامی نقاط درنظر گرفته می‌شود که همان بیشینه مقدار خطای تمامی نقاط است. قیود مدل، معادل خطی دو قید شرطی زیر هستند.

$$
if \quad \delta_{i,b} = 1 \Longrightarrow Y_i - (C_b X_i + d_b) \leq \xi \qquad \forall i \in [I]; b \in [B]
$$

$$
if \quad \delta_{i,b} = 1 \Longrightarrow (C_b X_i + d_b) - Y_i \leq \xi \qquad \forall i \in [I]; b \in [B]
$$

۴ حداکثر متریک اختلاف خوشه‌ای مطلق

$$
\begin{aligned}
\min \quad & \sum_{b=1}^{B} \xi_b \\
\text{s.t.} \quad & Y_i - (c_b X_i + d_b) \leq \xi_b + M_i^1(1-\delta_{i,b}) \quad \forall\, i \in [I];\; b \in [B] \\
& (c_b X_i + d_b) - Y_i \leq \xi_b + M_i^1(1-\delta_{i,b}) \quad \forall\, i \in [I];\; b \in [B] \\
& \xi_b \geq 0 \qquad \forall\, b \in [B]
\end{aligned}
$$

دراین مدل، مجموع خطاهای متناظر با هر خوشه در تابع هدف کمینه می‌شود و قیود، با خطای متناظر خوشه‌ای که نقطه مورد نظر در آن قرار دارد، تنظیم می‌شوند. به عبارتی، ξ_b خطای متناظر آن خوشه یعنی قدر مطلق اختلاف مقدار واقعی و تقریبی آن نقطه را مشخص کرده و سپس همانند قبل، توسط $\delta_{i,b}$ تعیین می‌شود که نقطه در کدام خوشه قرار گرفته است. درنهایت مجموع تمامی این خطاهای خوشه‌ای در تابع هدف کمینه می‌شوند. قیود مدل، معادل خطی دو قید شرطی زیر هستند.

$$
if \quad \delta_{i,b} = 1 \Longrightarrow Y_i - (C_b X_i + d_b) \leq \xi_b \qquad \forall i \in [I]; b \in [B]
$$

$$
if \quad \delta_{i,b} = 1 \Longrightarrow (C_b X_i + d_b) - Y_i \leq \xi_b \qquad \forall i \in [I]; b \in [B]
$$

۵ رگرسیون خطی مرتب شده به صورت خوشه ای

$$
\begin{aligned}
(2)\ \underline{\text{oCLR}}: \quad & \min \sum_{i=1} \xi_i \\
\text{s.t.} \quad & \text{(1b)–(1d)} \\
& \delta_{i+1,b+1} \le \delta_{i,b} + \delta_{i,b+1} && \forall i \in [I-1];\ b \in [B-1] \\
& \delta_{i+1,1} \le \delta_{i,1} && \forall i \in [I-1] \\
& \delta_{i,B} \le \delta_{i+1,B} && \forall i \in [I-1] \\
& \text{(1e)–(1h)}
\end{aligned}
$$

این مدل، در راستای رفع مشکل خوشه‌بندی نامنظم عمل می‌کند به این صورت که با افزودن ۳ قید جدید به قیود (1b)-(1d) مدل رگرسیون خطی خوشه‌ای، از خوشه‌بندی دلخواه مدل جلوگیری کرده و نظمی برآن اعمال می‌کند. نقاط، به ترتیب اندازه X_i مرتب شده و نقاط نزدیک به هم در یک خوشه قرار می‌گیرند تا پیوستگی در خوشه‌بندی حفظ شود. برای این منظور، قیود زیر به مدل خطی خوشه‌ای اضافه می‌شوند:

$$
if \quad \delta_{i,b} = 0 \quad \wedge \quad \delta_{i,b+1} = 0 \Longrightarrow \delta_{i+1,b+1} = 0 \qquad \forall i \in [I-1]; b \in [B-1]
$$

به این معنا که اگر نقطه‌ی i (به جز نقطه آخر) در خوشه b (به جز خوشه آخر) قرار نگیرد و همزمان همان نقطه در خوشه $b+1$ قرار نگیرد، آنگاه نقطه‌ی $i+1$ نمی‌تواند در خوشه $b+1$ قرار گیرد. با فرض مرتب بودن داده‌ها هرگاه نقطه‌ی قبلی (به جز آخرین نقطه) در هیچ‌یک از دو خوشه متوالی (جز خوشه‌ی آخر) قرار نگرفته است، نقطه فعلی هم مطمئنا در دومین خوشه متوالی قرار نخواهد گرفت. خطی‌سازی این قید (به روش مکمل زائد) قید جدید اول را نتیجه می‌دهد.

برای خوشه‌های اول و آخر (B ام) به طور جداگانه باید تصمیم‌گیری شود. خوشه‌ی اول، تا زمانی که برای هر دو نقطه متوالی (به جز نقطه‌ی آخر به عنوان اولین نقطه)، نقطه اول در خوشه اول قرار نگیرد نقطه دوم نیز نباید در آن خوشه قرار گیرد. با خطی‌سازی قید شرطی زیر، به قید جدید دوم می‌رسیم.

$$
if \quad \delta_{i,1} = 0 \Longrightarrow \delta_{i+1,1} = 0 \qquad \forall i \in [I-1]
$$

$$
\delta_{i,1} + 1 - \delta_{i+1,1} \ge 1 \quad \forall i \in [I-1]
$$

خوشه‌ی آخر هم، تا زمانی که برای هر دو نقطه متوالی (جز نقطه آخر به عنوان نقطه اول)، نقطه دوم در خوشه آخر یعنی B قرار نگیرد نقطه اول نیز نباید در آن خوشه قرار گیرد. یعنی عبارت شرطی زیر را خواهیم داشت:

$$
if \quad \delta_{i+1,B} = 0 \Longrightarrow \delta_{i,B} = 0 \qquad \forall i \in [I-1]
$$

با خطی‌سازی آن به قید زیر که قید جدید سوم است، می‌رسیم.

$$
\delta_{i+1,B} + 1 - \delta_{i,B} \ge 1 \quad \forall i \in [I-1]
$$

۶ رگرسیون تکه‌ای خطی

$$
\begin{array}{lll}
\min & \sum_{i=1}^{I} \xi_i & \\
\text{s.t.} & Y_i - (c_b X_i + d_b) \leq \xi_i + M_i^1(1-\delta_{i,b}) & \forall\, i \in [I];\ b \in [B-1] \\
& (c_b X_i + d_b) - Y_i \leq \xi_i & \forall\, i \in [I];\ b \in [B-1] \\
& \sum_{b=1}^{B-1} \delta_{i,b} = 1 & \forall\, i \in [I] \\
& c_b \leq c_{b+1} & \forall\, b \in [B-2] \\
& \text{(1e) - (1h)} &
\end{array}
$$

در این مدل، تعریف اندیس b از خوشه متناظر، به نقاط شکست تغییر می‌کند و B تعداد نقاط شکست خواهد بود. حال مدل سعی دارد تابع گذرنده از تمامی نقاط را به کمک یک تابع تکه‌ای خطی تقریب بزند. بنابراین در نقاطی که رفتار تابع تغییر می‌کند، نقاط شکستی از ۱ تا $B-1$ در نظر گرفته می‌شود. بنابراین با توجه به اینکه نقاط داده‌ها رفتاری غیرخطی از خود نشان می‌دهند، سعی می‌شود به جای تابعی غیرخطی، تابعی تکه‌ای خطی با رفتاری مشابه، تقریب زده شود بتوان به مدلی خطی دست یافت. شرط زیر را در نظر گیریم:

$$c_b \leq c_{b+1} \qquad \forall b \in [B-2]$$

به این معنا که شیب خطوط در هر دو نقطه‌ی شکست متوالی، کاهش نیابد و لذا محدب بودن این تابع تکه‌ای خطی تضمین شود. توجه شود که نقاط شکست، ابتدا و انتهای هر زیربازه را مشخص می‌کنند و درنتیجه برای B نقطه‌ی شکست، $B-1$ زیر بازه ایجاد می‌شود. بنابراین برای برقرار این شرط، تا زیربازه‌ی $B-2$ رفته تا باز آخرین یعنی $B-1$ مقایسه صورت بگیرد.

دو قید اول، خطای متناظر با هر نقطه را در نظر می‌گیرند. البته با توجه به تحمیل تحدب به تابع تکه‌ای خطی، می‌توان مقدار تقریبی تقاط را به صورت $\max_b(c_b x + d_b)$ در نظر گرفت و چنین تعریفی از تابع هدف را ارائه کرد:

$$min \sum_i |y_i - \max_b(c_b x + d_b)| \qquad \forall i \in [I]; b \in [B-1]$$

جهت خطی‌سازی، ξ_i متناظر با قدرمطلق‌ها تعریف شده و قیود مربوط به خطی‌سازی، به صورت زیر خواهند شد:

$$\xi_i \geq y_i - \max_b(c_b x + d_b) \qquad \forall i \in [I]; b \in [B-1]$$
$$\xi_i \geq -y_i + \max_b(c_b x + d_b) \qquad \forall i \in [I]; b \in [B-1]$$

قید دوم مربوط به حالتی‌ست که خطای متناظر نقطه، بیشتر از تفاضل مقدار واقعی از مقدار تقریبی باشد.اما صرف نظر از اینکه نقطه در چه زیربازه‌ای باشد، داریم:

$$\xi_i + y_i \geq \max_b(c_b x + d_b)$$

ازآنجا که مقدار بیشینه از تک تک مقادیر خطا بزرگتر است، خواهیم داشت:

$$\xi_i + y_i \geq c_b x + d_b \qquad \forall i \in [I]; b \in [B-1]$$

در نتیجه، چنین قیدی بدون نیاز به متغیر باینری همواره برقرار خواهد بود.

۷ رگرسیون تکه‌ای خطی ۲

$$
\begin{aligned}
(3)\ \underline{\text{PWLR}}:\quad & \min \sum_{i=1}^{I} \xi_i && && (3a)\\
\text{s.t.}\quad & (1b)\text{–}(1d) && && (3b)\\
& (2c)\text{–}(2e) && && (3c)\\
& \delta_{i,b} + \delta_{i+1,b+1} + \gamma_b - 2 \le \delta^{+}_{i,b} && \forall i \in [I-1];\ b \in [B-2] && (3d)\\
& \delta_{i,b} + \delta_{i+1,b+1} + (1-\gamma_b) - 2 \le \delta^{-}_{i,b} && \forall i \in [I-1];\ b \in [B-2] && (3e)\\
& d_{b+1} - d_b \ge X_i(c_b - c_{b+1}) - M_i^2(1-\delta^{+}_{i,b}) && \forall i \in [I-1];\ b \in [B-2] && (3f)\\
& d_{b+1} - d_b \le X_{i+1}(c_b - c_{b+1}) + M_{i+1}^2(1-\delta^{+}_{i,b}) && \forall i \in [I-1];\ b \in [B-2] && (3g)\\
& d_{b+1} - d_b \le X_i(c_b - c_{b+1}) + M_i^2(1-\delta^{-}_{i,b}) && \forall i \in [I-1];\ b \in [B-2] && (3h)\\
& d_{b+1} - d_b \ge X_{i+1}(c_b - c_{b+1}) - M_{i+1}^2(1-\delta^{-}_{i,b}) && \forall i \in [I-1];\ b \in [B-2] && (3i)\\
& \gamma_b \in \{0,1\} && \forall b \in [B-1] && (3j)\\
& \delta^{+/-}_{i,b} \in [0,1] && \forall i \in [I-1];\ b \in [B-2] && (3k)\\
& (1e)\text{–}(1h) && && (3l)
\end{aligned}
$$

این مدل، ابتدا قیود مربوط به خطای زیربازه‌ی متناظر یعنی (1b),(1c) و (1f),(1h) با دامنه‌ای جدید $\forall b \in [B-1]$ و قید (1d) بدون تغییر،قرار می‌گیرند. همچنین، افزون بر تقریب تکه‌ای خطی، شرط پیوسته بودن آن اعمال می‌شود به این معنا که قطعات متوالی باید در نقطه‌ای متصل باشند. این نقطه لزوما از نقاط داده نمی‌باشد و صرفا پیوستگی تابع تکه‌ای خطی را برقرار می‌کند. برای این کار، با فرض آنکه $X_i \le r \le X_{i+1}$ و $c_b \neq c_{b+1}$،نقطه‌ای مانند r برای برقراری پیوستگی بین دو قطعه‌ی b و $b+1$ باید در ضابطه گذرنده از هریک از دو قطعه صدق کند تا یک نقطه اتصال محسوب شود. بازه‌ای برای مقدار نقطه اتصال r می‌یابیم.

$$
\begin{aligned}
c_b r + d_b = c_{b+1} r + d_{b+1} &\implies r = \frac{d_{b+1} - d_b}{c_b - c_{b+1}}\\
&\implies X_i \le \frac{d_{b+1} - d_b}{c_b - c_{b+1}} \le X_{i+1}
\end{aligned}
$$

اکنون با یک قید کسری مواجه هستیم که تابعی غیرخطی از متغیرهای تصمیم است و باید خطی شود. توجه کنیم که درمورد علامت مخرج اطلاعی نداریم. بنابراین هردو حالت مثبت و منفی را درنظر می‌گیریم. هنگام خطی‌سازی، با ضرب $c_b - c_{b+1}$ در طرفین این بازه دو حالت ممکن رخ دهد:

$$
\begin{aligned}
X_i(c_b - c_{b+1}) \le d_{b+1} - d_b \le X_{i+1}(c_b - c_{b+1})\\
X_i(c_b - c_{b+1}) \ge d_{b+1} - d_b \ge X_{i+1}(c_b - c_{b+1})
\end{aligned}
$$

بنابراین، به متغیرهای جدیدی نیاز است:

$\delta^{+}_{i,b}, \delta^{-}_{i,b}$: متغیرهای پیوسته با مقادیری دربازه‌ی $[0,1]$ که اگر نقطه شکستی بین X_i و X_{i+1} وجود داشته باشد، یکی از دو متغیر $\delta^{+}_{i,b}$ یا $\delta^{-}_{i,b}$ ، بسته به علامت $c_b - c_{b+1}$ مقدار ۱ اختیار کرده و قید متناظرش فعال می‌شود. داریم:

$$
\begin{aligned}
if \quad \delta^{+}_{i,b} = 1 \Longrightarrow X_i(c_b - c_{b+1}) \le d_{b+1} - d_b \le X_{i+1}(c_b - c_{b+1})\\
if \quad \delta^{-}_{i,b} = 1 \Longrightarrow X_i(c_b - c_{b+1}) \ge d_{b+1} - d_b \ge X_{i+1}(c_b - c_{b+1})
\end{aligned}
$$

ثابت M بزرگ به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$M_i^2 = \overline{D} - \underline{D} - X_i(\underline{C} - \overline{C}) \qquad \forall\, i \in [I]$$

با خطی سازی قیود بالا، برای همه نقاط جز آخرین نقطه (زیرا خط گذرنده توسط نقطه قبل مشخص می‌شود) و تا زیربازه‌ی $(B-2)$ (یکی کمتر از تعداد نقاط شکست بدون آخرین نقطه) داریم:

$$X_i(c_b - c_{b+1}) \leq d_{b+1} - d_b + M_i^2(1-\delta_{i,b}^+) \qquad \forall i \in [I-1]; b \in [B-2]$$
$$X_{i+1}(c_b - c_{b+1}) \geq d_{b+1} - d_b - M_{i+1}^2(1-\delta_{i,b}^+) \qquad \forall i \in [I-1]; b \in [B-2]$$
$$X_i(c_b - c_{b+1}) \geq d_{b+1} - d_b - M_i^2(1-\delta_{i,b}^-) \qquad \forall i \in [I-1]; b \in [B-2]$$
$$X_{i+1}(c_b - c_{b+1}) \leq d_{b+1} - d_b + M_{i+1}^2(1-\delta_{i,b}^-) \qquad \forall i \in [I-1]; b \in [B-2]$$

که همان قیود (3f) و (3i) هستند.

γ_b : متغیری دودویی که بسته به تغییر گرادیان بین قطعات خطی همسایه، مقادیر ۰ یا ۱ اختیار می‌کند. یعنی اگر در نقطه‌ی شکست b ام تغییر شیب داشته باشیم مقدار خواهد گرفت به این صورت که درصورت افزایش شیب ۱، درصورت کاهش شیب ۰ شود تا بعد به $\delta_{i,b}^+$ و $\delta_{i,b}^-$ مرتبط شده و قیود متناظر فعال شوند. این ارتباط، با قیود (3d),(3e) شده است.
طبق قید (3d) ،برای هر دو نقطه متوالی(جز آخرین نقطه به عنوان نقطه اول)اگر نقطه اول در قطعه‌ی b و نقطه دوم در قطعا $b+1$ باشد و همزمان توسط $\gamma_b = 1$ مشخص شود که شیب متناظر با زیربازه b از نوع افزایشی بوده است، با کسر ۲ واحد، $\delta_{i,b}^+$ می‌تواند مقدار ۱ بگیرد که یعنی $c_b - c_{b+1}$ مقداری مثبت دارد و شیب خط گذرنده از زیربازه b بیشتر از شیب گذرنده از زیربازه $b+1$ خواهد بود. سپس قیود متناظر با $\delta_{i,b}^+$ فعال می‌شوند.
به طور کاملا مشابه، طبق قید (3e) ،برای هر دو نقطه متوالی(جز آخرین نقطه به عنوان اولین نقطه)اگر نقطه اول در زیربازه b و نقطه دوم در زیربازه $b+1$ باشد و درعین حال توسط $\gamma_b = 0$ مشخص شود که شیب متناظر با زیربازه b از نوع افزایشی بوده، با کسر ۲ واحد، $\delta_{i,b}^-$ می‌تواند مقدار ۱ بگیرد و درنتیجه $c_b - c_{b+1}$ مقداری منفی داشته و شیب خط گذرنده از زیربازه b کمتر از شیب گذرنده از زیربازه $b+1$ خواهد بود. سپس قیود متناظر با $\delta_{i,b}^-$ فعال می‌شوند.

انتظار می‌رود که بتوان متغیر γ_b را به طور کامل نادیده گرفت و به طور مستقیم، ارتباطی میان $\delta_{i,b}^+$ و $\delta_{i,b}^-$ برقرار کرد:

$$if \qquad \delta_{i,b} = 1 \quad \wedge \quad \delta_{i+1,b+1} = 1 \Longrightarrow \delta_{i,b}^+ + \delta_{i,b}^- = 1 \qquad \forall i \in [I-1]; b \in [B-2]$$

به این معنا که اگر دو نقطه‌ی متوالی(به جز آخرین نقطه به عنوان نقطه دوم) در قطعه‌ی متوالی (به غیر از قطعه‌ی آخر به عنوان قطعه دوم) قرار گیرند، درصورت وجود نقطه شکستی میان آن‌ها، یکی از $\delta_{i,b}^+$ و $\delta_{i,b}^-$ بسته به علامت $c_b - c_{b+1}$ مقدار ۱ اختیار کرده و قید متناظرش فعال می‌شود. با خطی‌سازی عبارت بالا داریم:

$$\delta_{i,b}^+ + \delta_{i,b}^- \geq 1 - M(1 - \delta_{i,b} + 1 - \delta_{i+1,b+1}) \qquad \forall i \in [I-1]; b \in [B-2]$$

که $M = 1$ شده و قید خطی به صورت زیر است که بدون استفاده از متغیر γ_b به فعال‌سازی قیود مرتبط می‌پردازد:

$$\delta_{i,b}^+ + \delta_{i,b}^- + 1 \geq \delta_{i,b} + \delta_{i+1,b+1} \qquad \forall i \in [I-1]; b \in [B-2]$$

البته نتایج بدست آمده از پیاده‌سازی چنین قیدی مطابق انتظار نبود چراکه انتظار می‌رفت با حذف متغیر گاما به نتایج یکسانی دست پیدا کنیم اما نتایج بدست آمده، مطابق ویژگی‌های مدل اصلی نمی‌باشد.

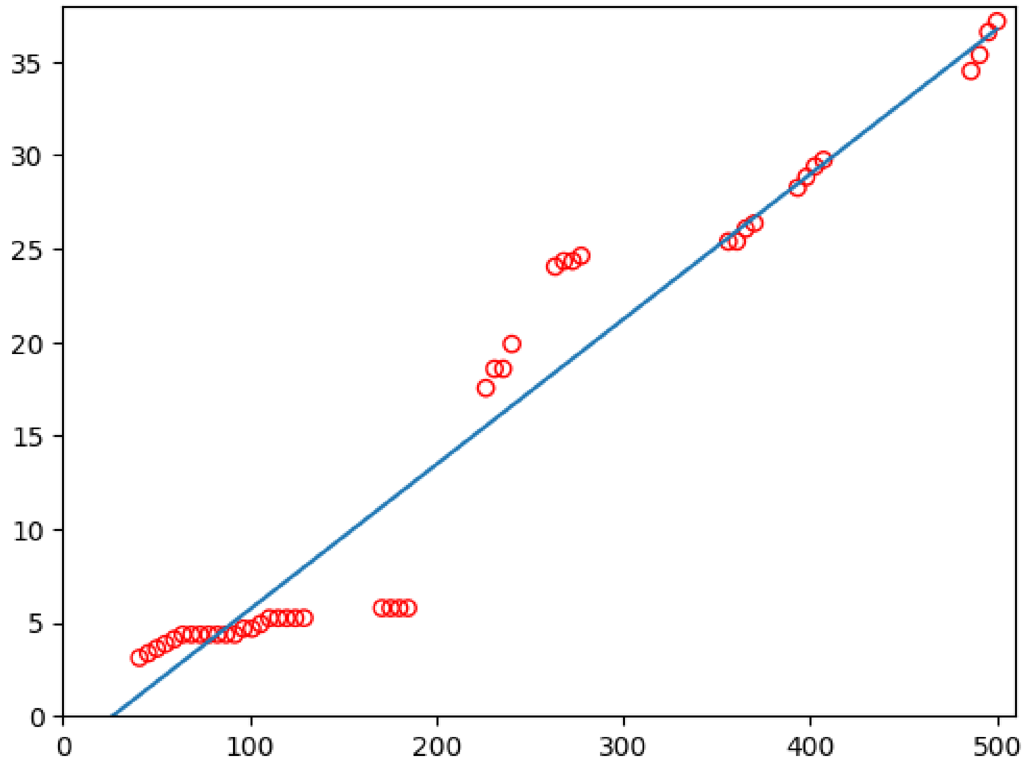
۸ نتایج

زمان حل و همراه جواب بهین هر مدل

شایان ذکر است که برای برخی از مدل‌ها، سالور cplex و برای برخی، سالور glpk می‌توانست بهتر عمل کند.

Optimal Solution	Time	B	
86.82624	0.0019	-	Model 1
28.1178	6.4224	2	Model 2
10.71168	32.9225	3	
-	-	4	
2.17667	0.0358	2	Model 3
0.77728	0.2993	3	
0.40841	13.5359	4	
2.59703	0.2322	2	Model 4
1.55878	1.4461	3	
1.22459	32.8039	4	
28.11875	0.0387	2	Model 5
11.12923	0.1342	3	
8.72272	0.4925	4	
66.6621	0.8437	3	Model 6
66.50946	3m 10s	4	
66.66212	0.3332	3	Model 7
27.15255	2.543	4	
10.74535	3.2739	5	

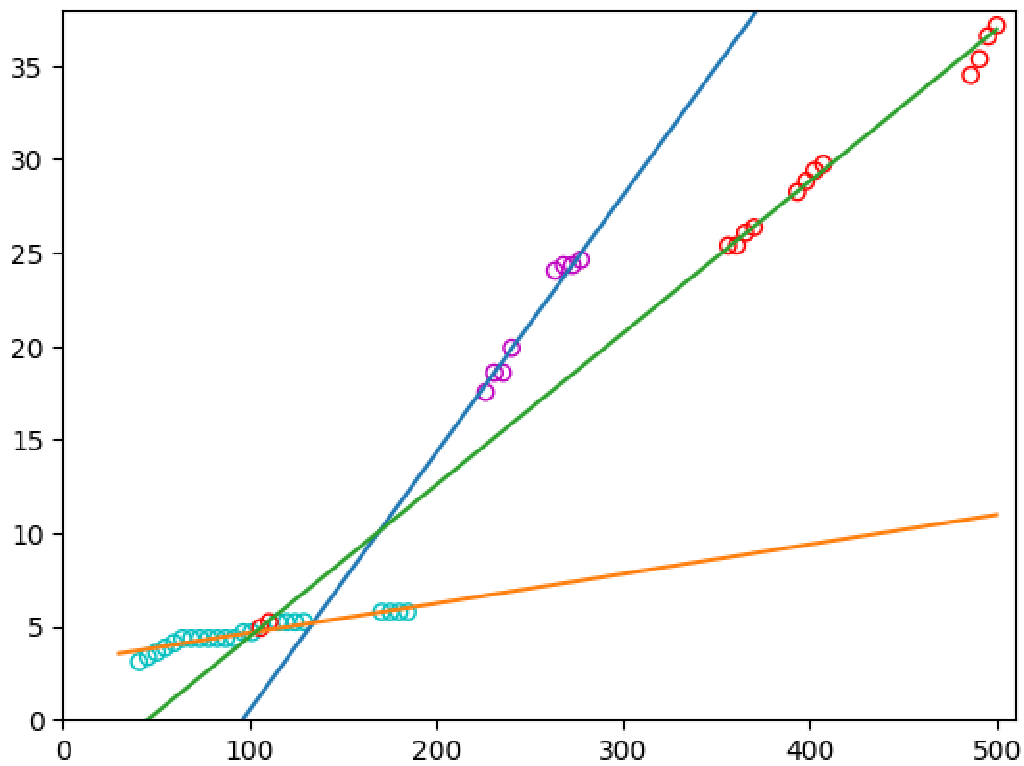
مدل ۱



0
5
10
15
20
25
30
35
0
100
200
300
400
500

مدل ۲

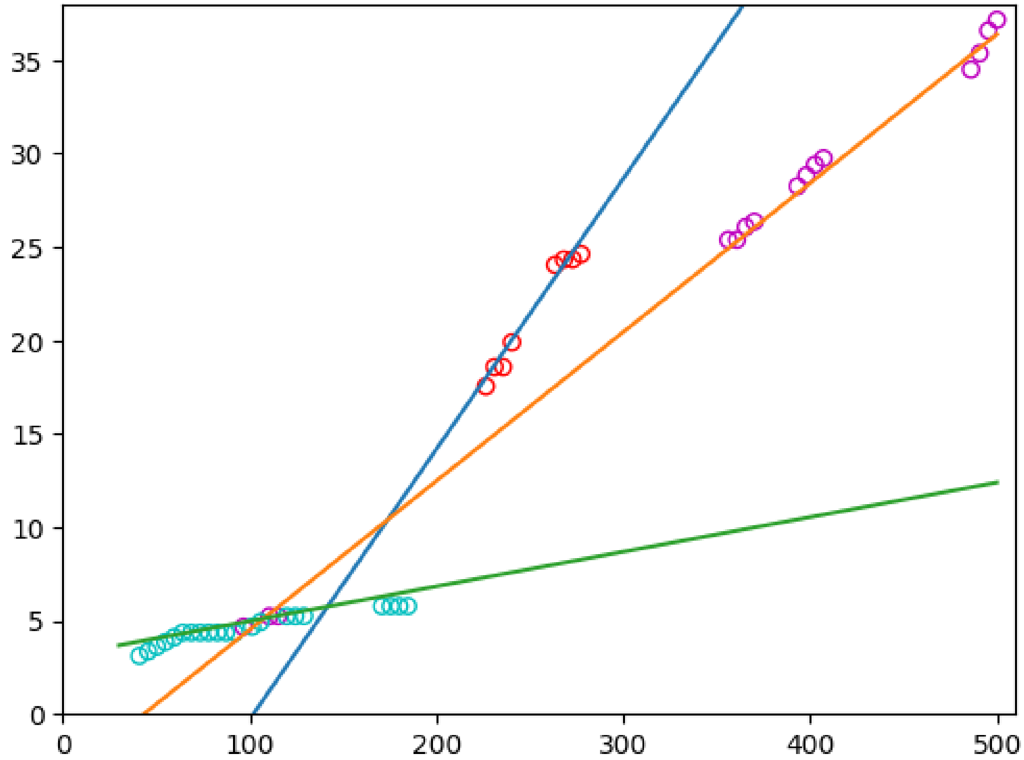
$B = 3$



0
5
10
15
20
25
30
35
0
100
200
300
400
500

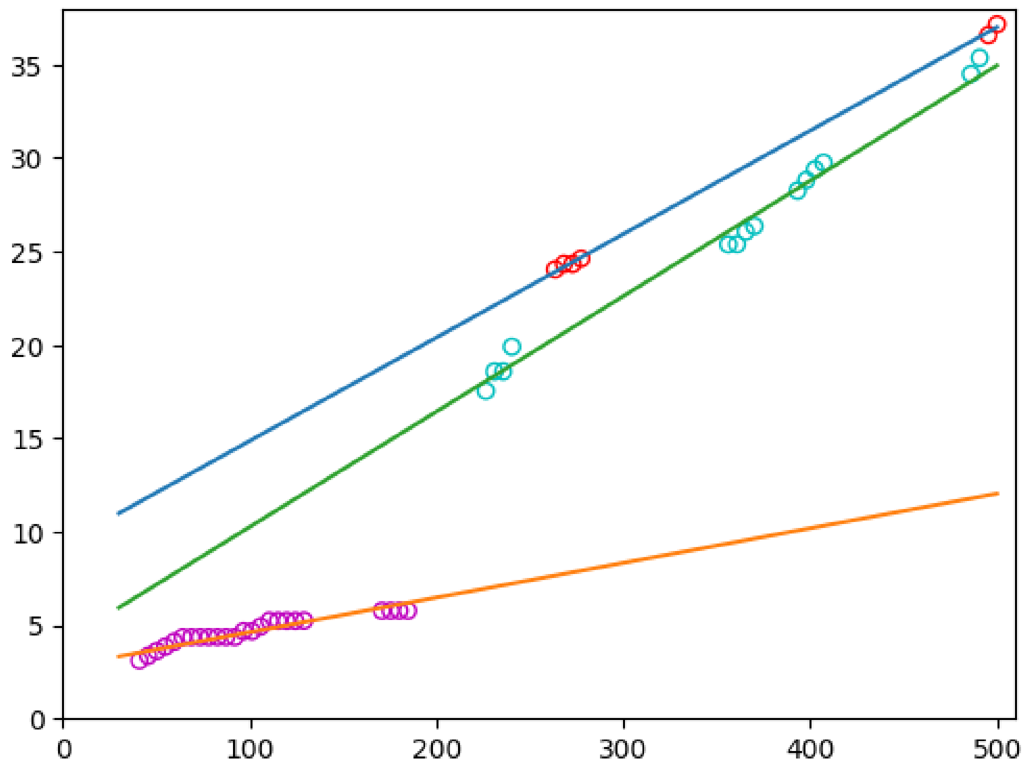
مدل ۳

$B = 3$



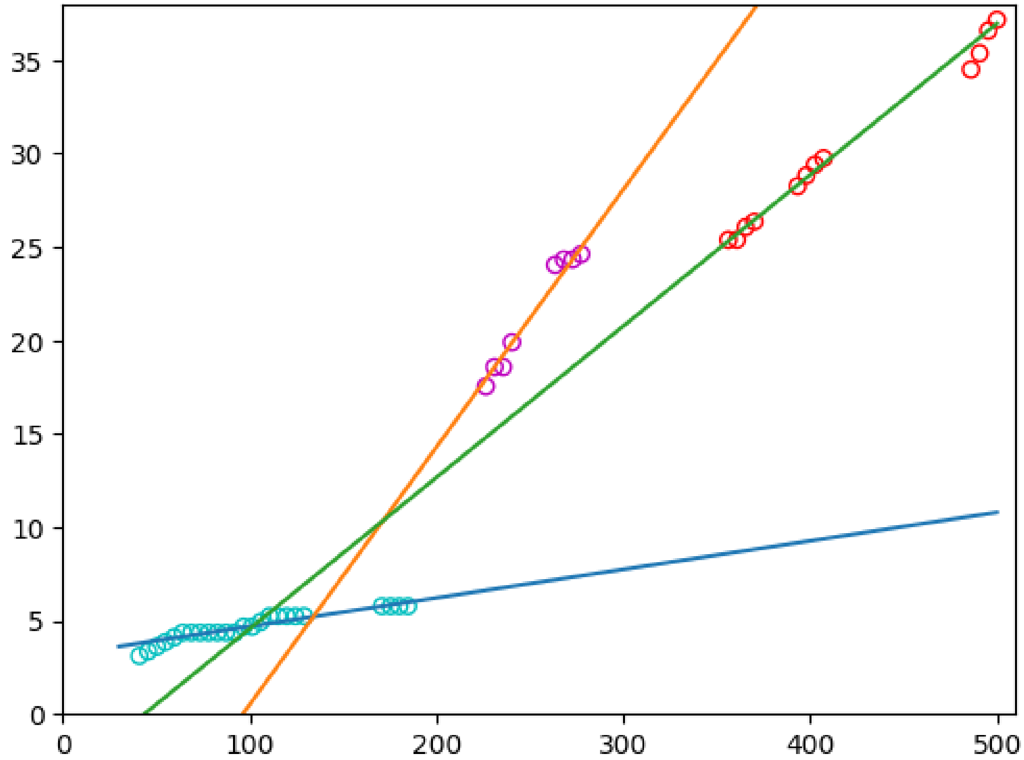
مدل ۴

$B = 3$



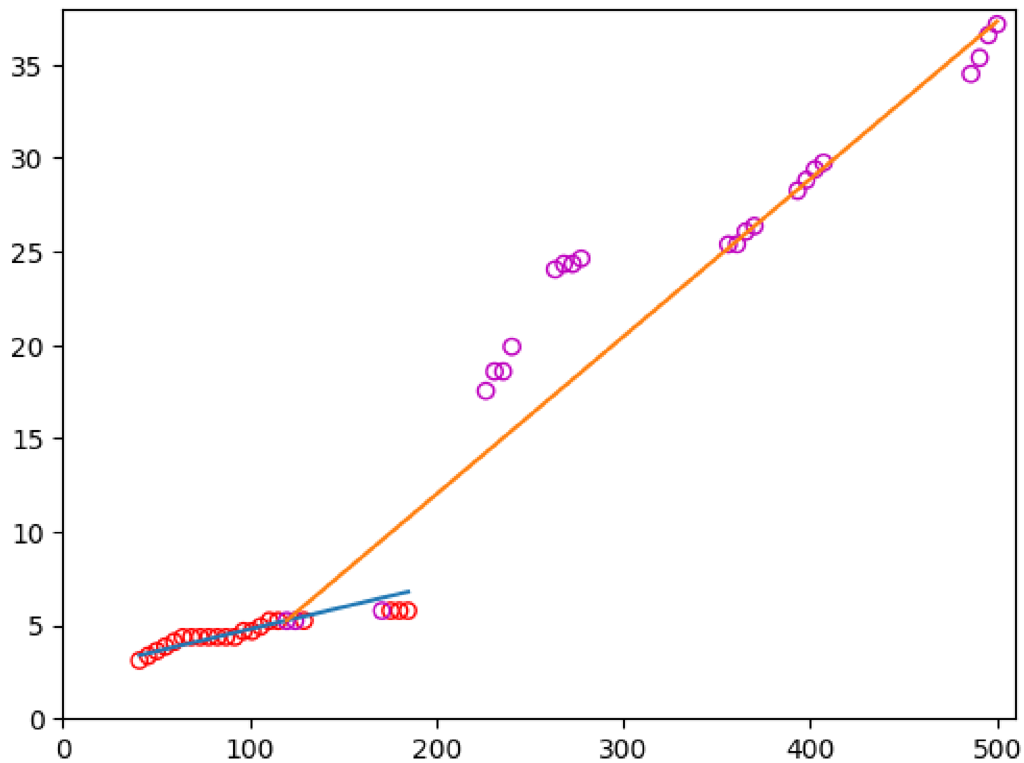
مدل ۵

$B = 3$



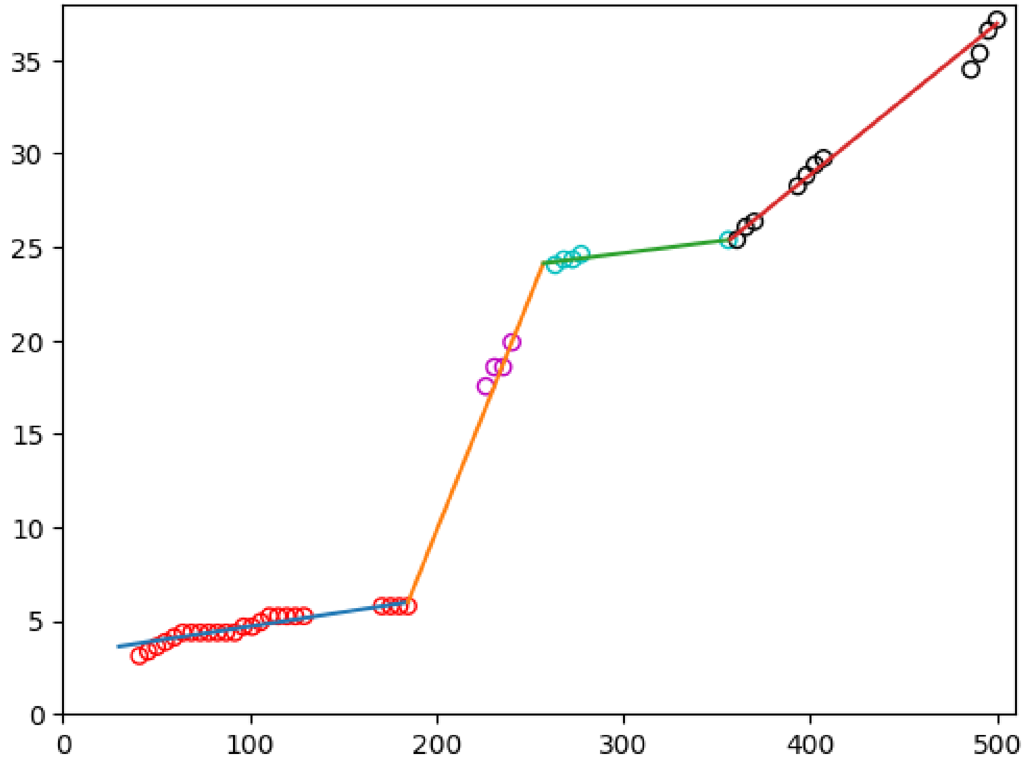
مدل ۶

$B = 3$

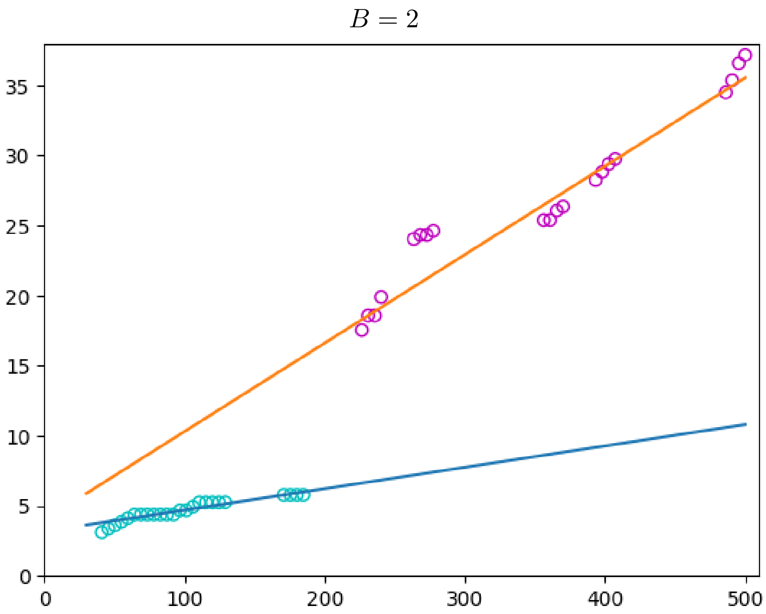


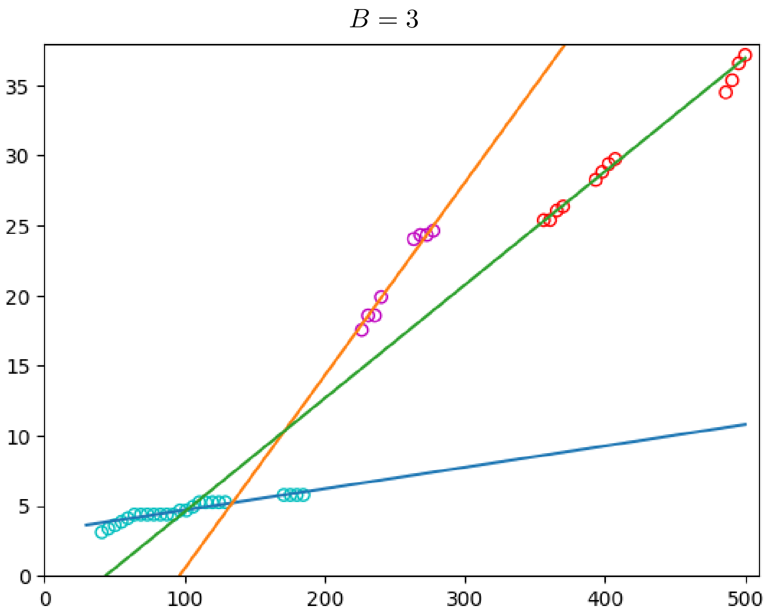
مدل ۷

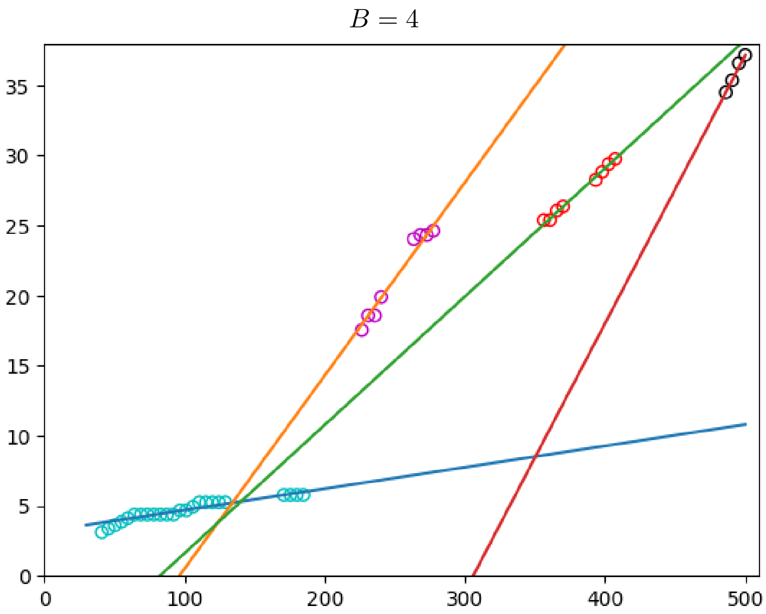
$B = 5$



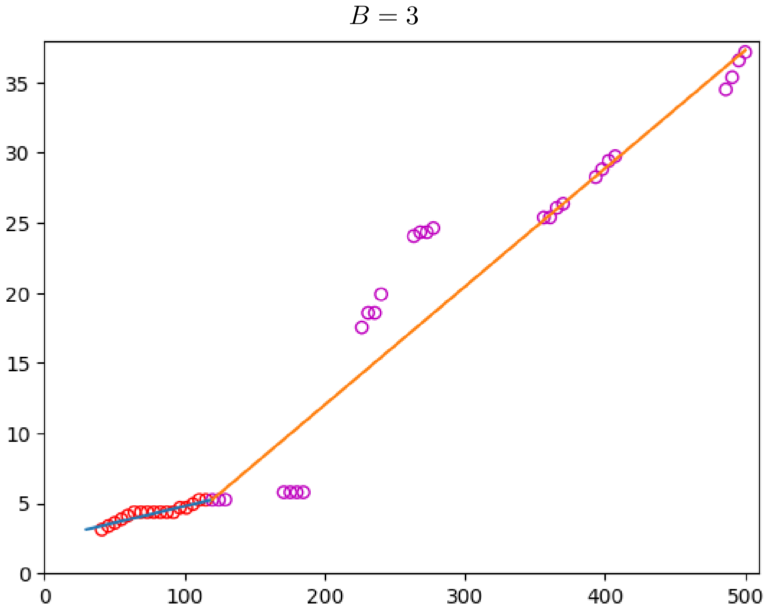
تاثیر مقادیر مختلف B : نمودارهای مربوط به مدل ۵ به صورت زیر هستند.

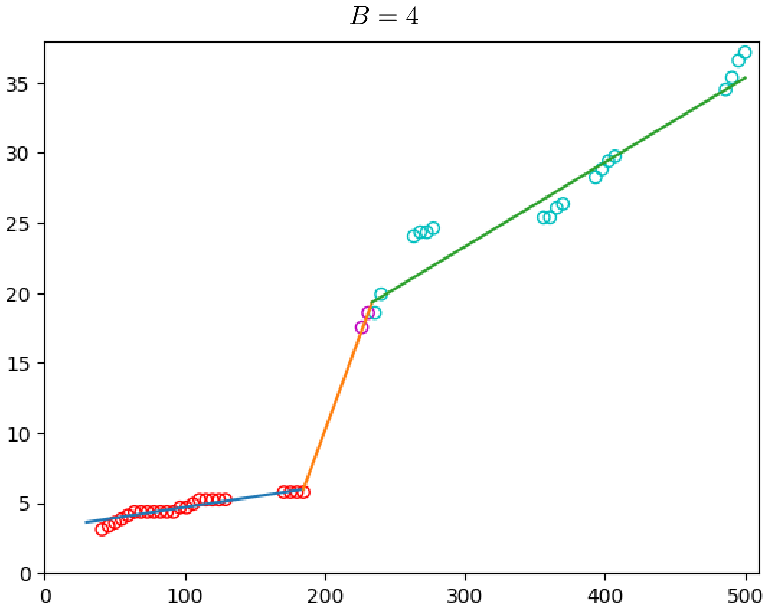


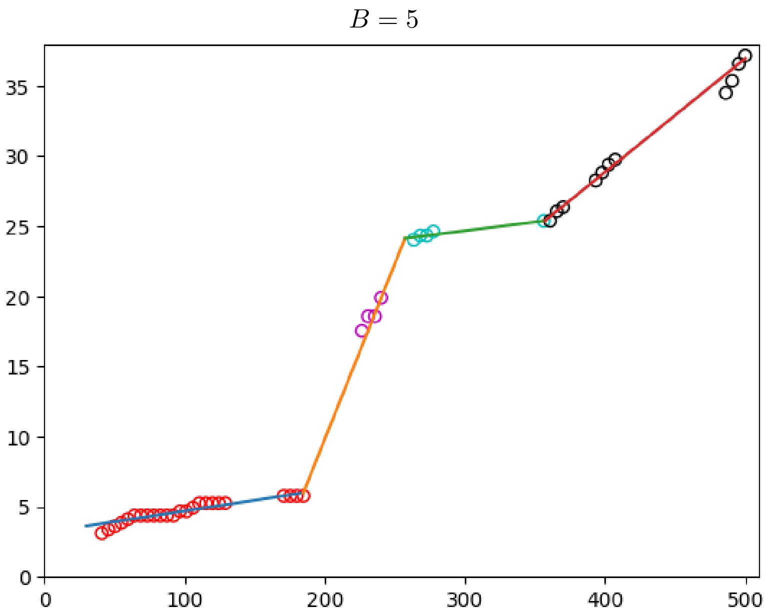




می توان نتیجه گرفت که افزایش بیشتر B نامناسب خواهد بود زیرا به نحوی overfit رخ می‌دهد. برای مدل ۷ هم همینطور:

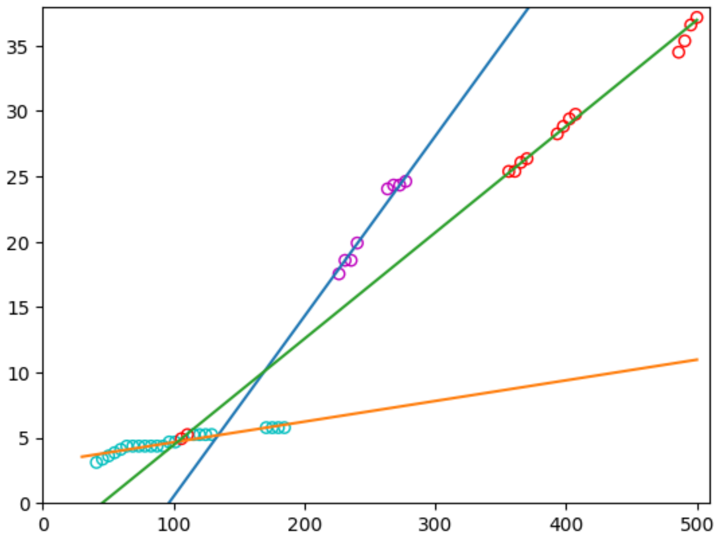




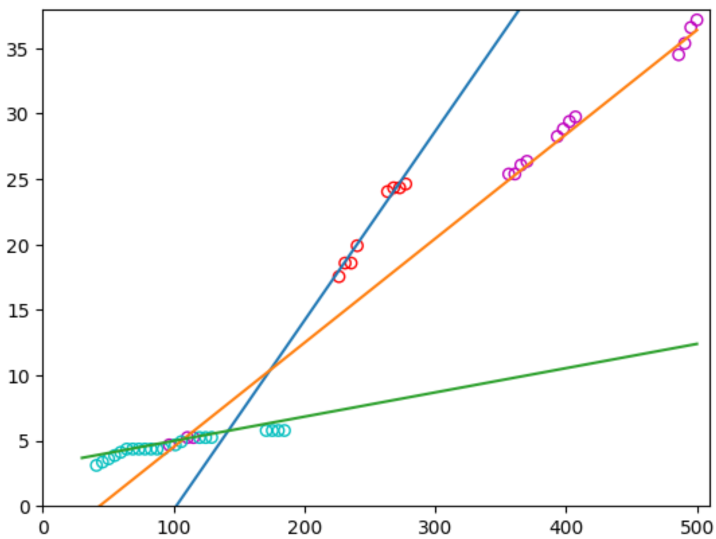


مقایسه‌ی مدل‌های ۲ و ۳ و ۵ به ازای B یکسان

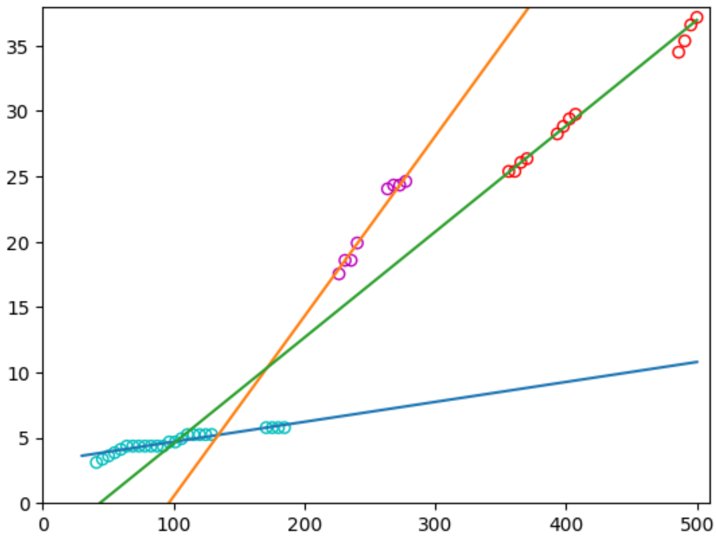
مدل ۲



مدل ۳



مدل ۵

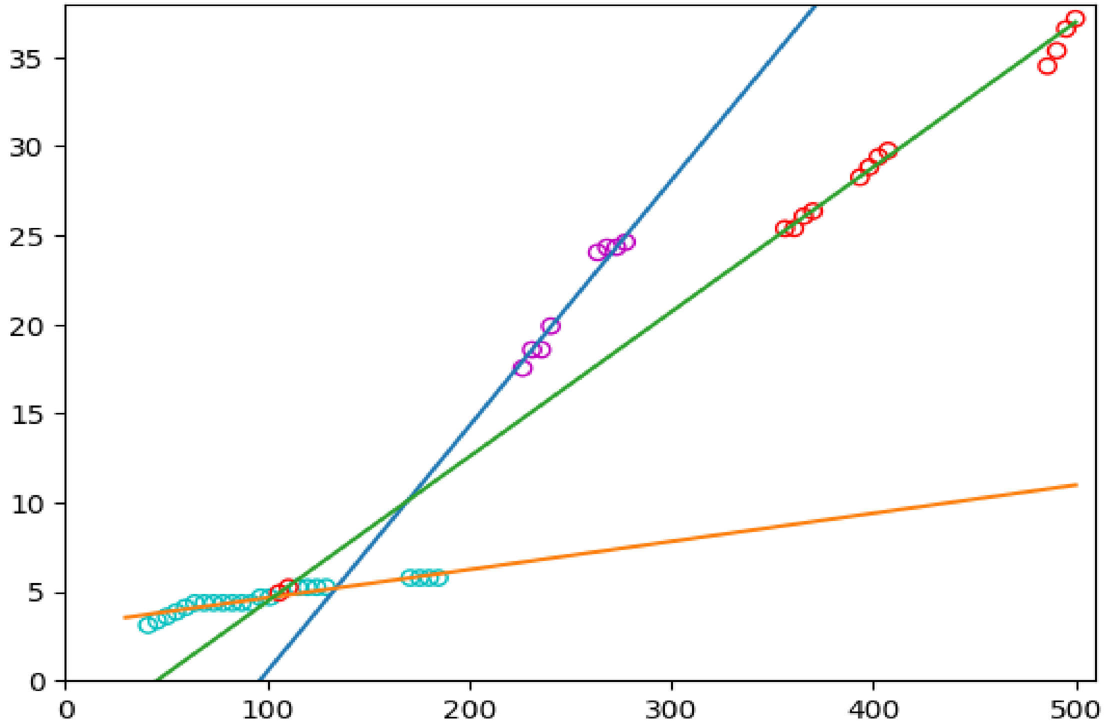


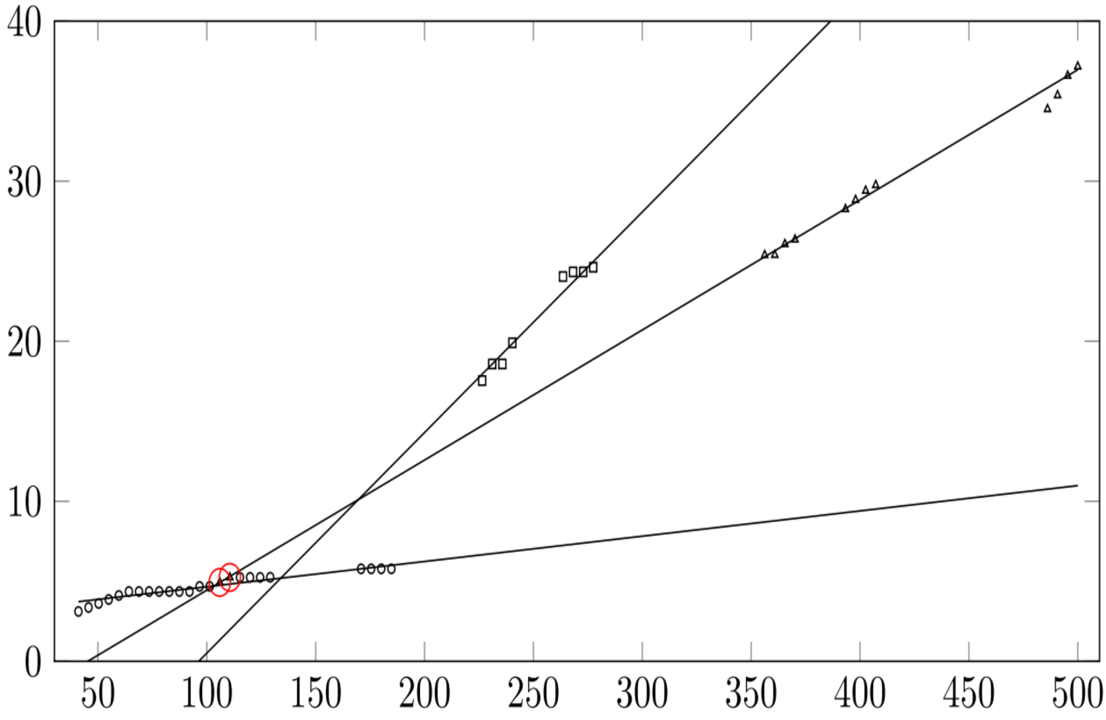
همانطور که مشخص است، در مدل ۲ دایره‌های قرمز و در مدل ۳ دایره‌های بنفش در خوشه‌ی آبی‌رنگ‌ها قرار دارند که علت آن خوشه‌بندی نامنظم و دلخواه است. اما در مدل ۵ این مشکل برطرف شده و خوشه‌بندی به درستی انجام شده‌است.

۹ مقایسه‌ی نتایج و اعتبارسنجی

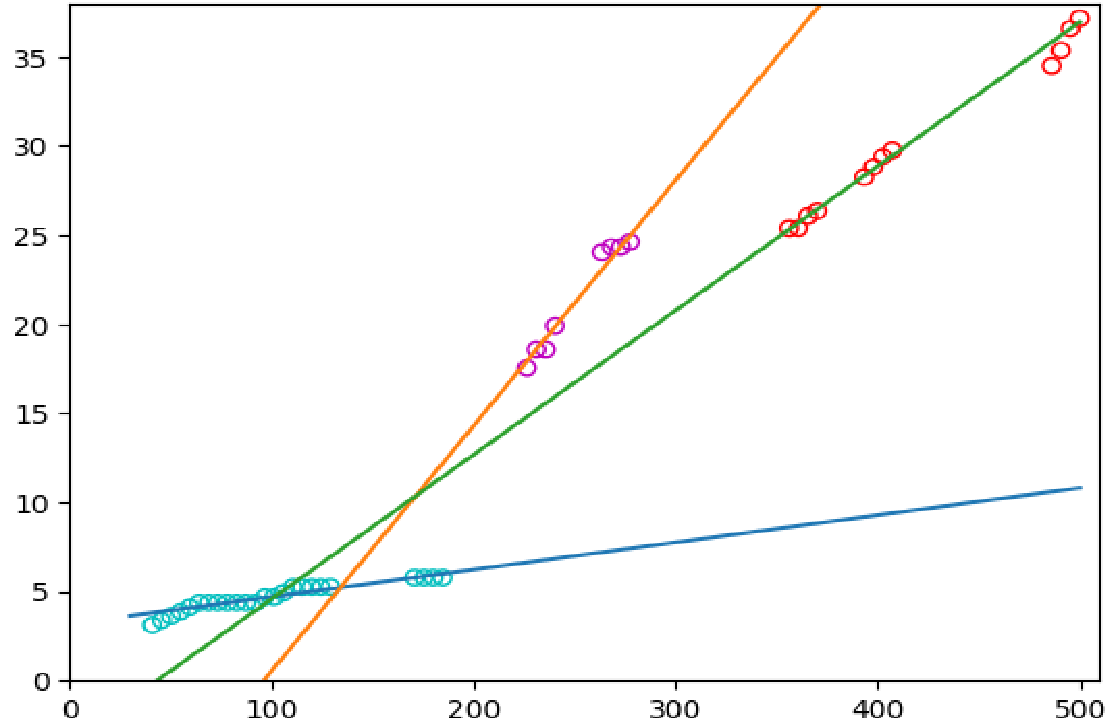
برای راستی‌آزمایی نتایج خود، به مقایسه نمودار خود با نمودار مرجع می‌پردازیم.

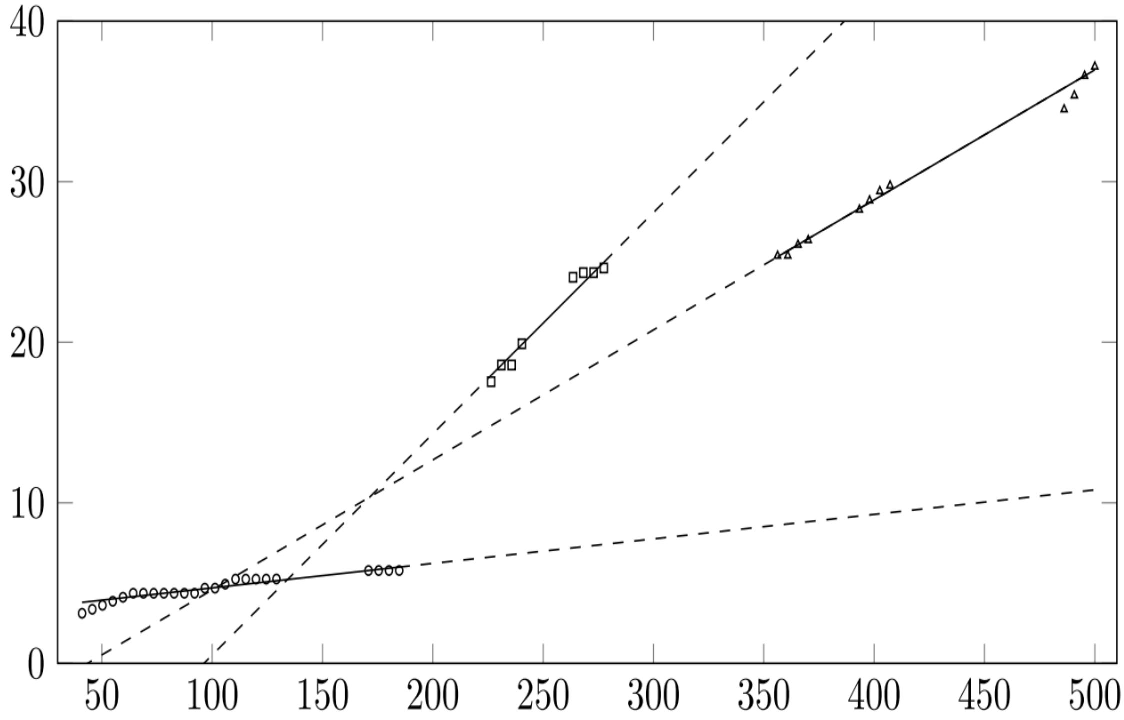
برای **مدل ۲**، با $B = 3$:





برای **مدل ۵** ، با $B = 3$:





برای **مدل ۷** ، با $B = 5$: