Optimierungsalgorithmen - Deterministische Globale Optimierung (DGO)

Tim Dafler
Universität Augsburg

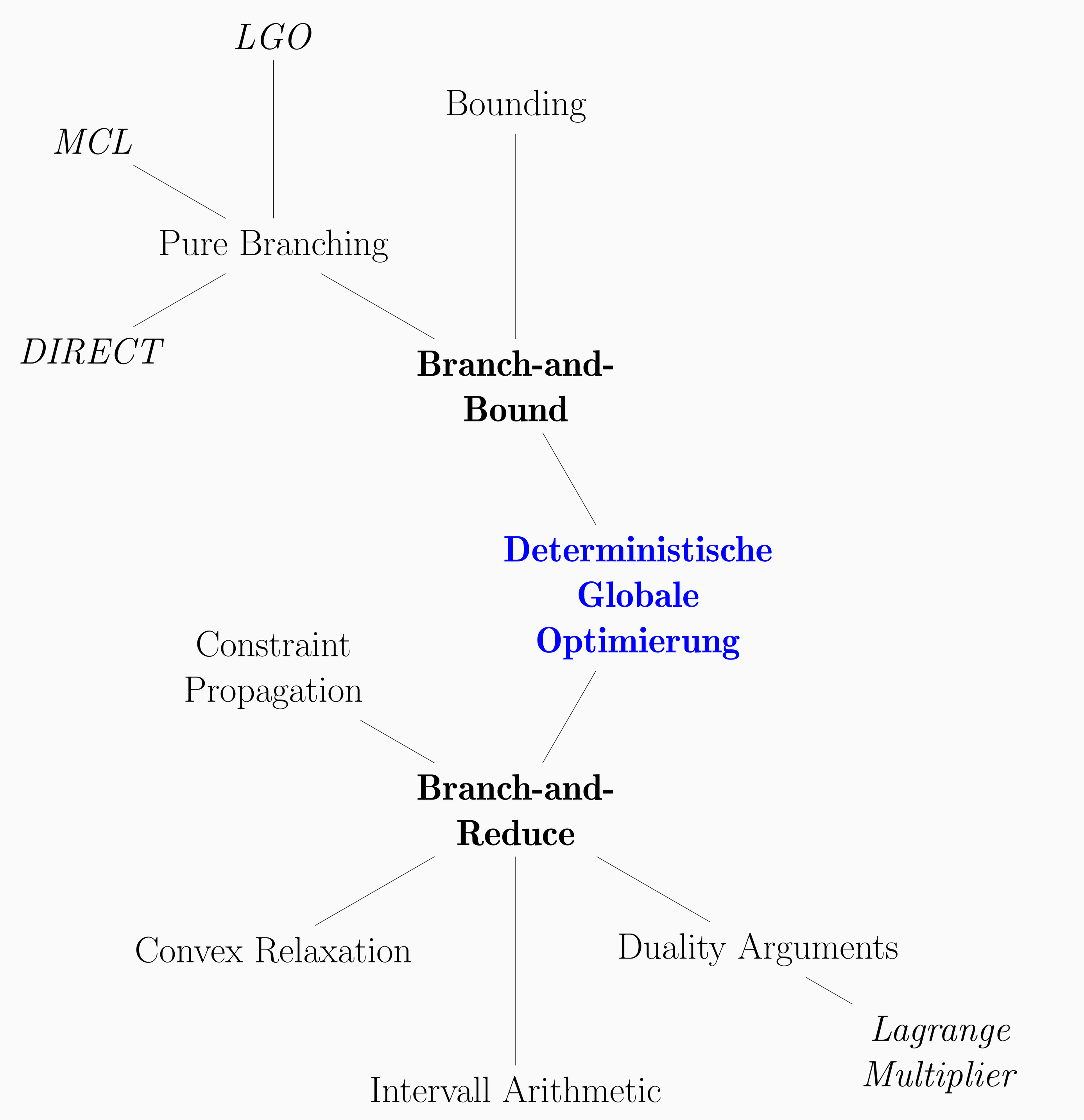
Motivation

- Verhalten und Handeln ist geprägt von zielgerichteten, rationalen Entscheidungsprozessen, welche das Ziel der **Ermittlung optimaler Handlungsstrategien** verfolgt.
- Der Prozess der Entscheidungsfindung durchläuft drei Schritte:
  1) Die **Abstraktion der Realität** in ein handhabbares Modell,
  2) die **Optimierung des gefundenen Modells** mittels **Optimierungsverfahren** und
  3) die **Interpretation der optimalen Lösung** des Modells für die reale Umsetzung.
- Deterministische Globale Optimierungsverfahren benennen
  - **Vollständige Verfahren**, welche ein globales Minimum bei **exakten Berechnungen** und unendlicher Laufzeit unter Garantie findet, sowie
  - **Rigorose Verfahren**, welche ein globales Minimum innerhalb vorgegebener Toleranz, auch unter **Einbezug von Rundungsfehlern**, mit Sicherheit erreichen.

Problem der DGO

$\min \ \mathbf{f}(\mathbf{x})$	$\mathbf{f}: \mathbb{R}^{\mathbf{n}} \to \mathbb{R}$ im Allgemeinen nicht-konvexe Zielfunktion
s.t. $\mathbf{g}(\mathbf{x}) \in \mathbf{F}$	$\mathbf{g}: \mathbb{R}^{\mathbf{n}} \to \mathbb{R}^{\mathbf{m}}$ Vektor von m Nebenbedingungen
$\mathbf{x} \in \mathbf{X}$	$\mathbf{X} = [\underline{\mathbf{x}}, \overline{\mathbf{x}}]$ beschränkte oder unbeschränkte Box in $\mathbb{R}^{\mathbf{n}}$, das heißt $\underline{\mathbf{x}} \in (\mathbb{R} \cup \{-\infty\})^{\mathbf{n}}$ und $\overline{\mathbf{x}} \in (\mathbb{R} \cup \{-\infty\})^{\mathbf{n}}$

Ausgewählte Verfahren

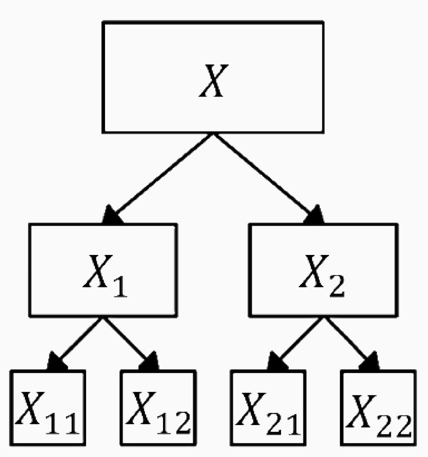


Branch-and-Bound

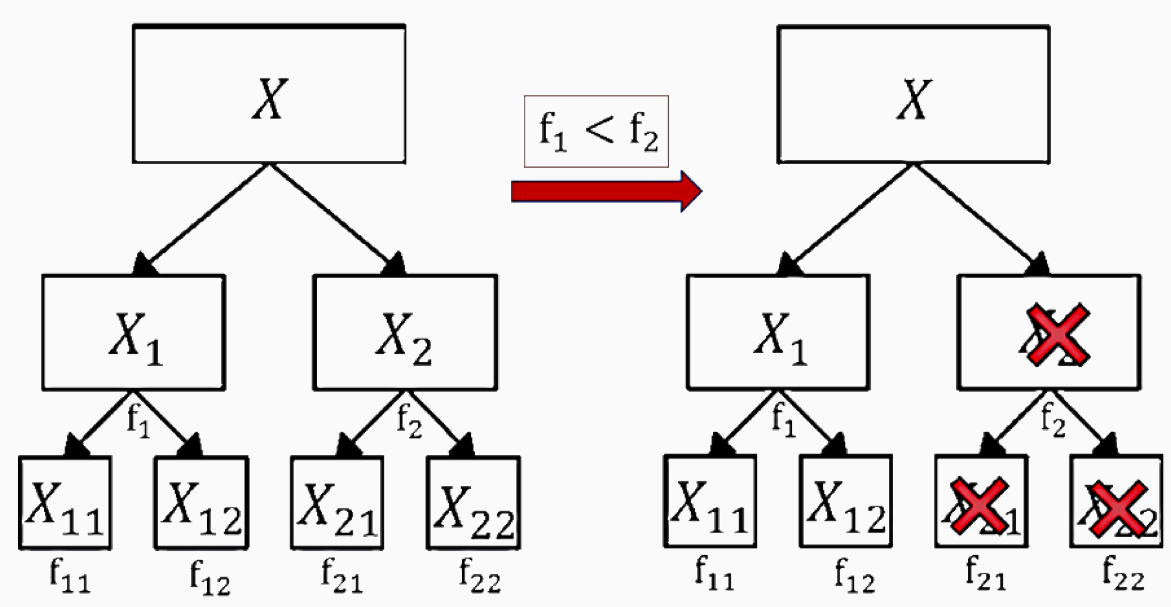
- **Branch-and-Bound** bedient sich der Methoden des Pure Branching und des Bounding.
- **Pure Branching** liefert mit lokalen Informationen
  - eine **Aufteilung der Box X in Teilboxen**,
  - welche **auf Optima untersucht** werden,

  sodass ein **globales Minimum gefunden** werden kann.
- **Bounding** liefert Schranken für die Teilboxen, sodass
  - die Untersuchung auf eine **Auswahl der Teilboxen eingeschränkt** werden kann,
  - und das Verfahren einen **Effizienzgewinn** erfährt.

Pure Branching



Bounding

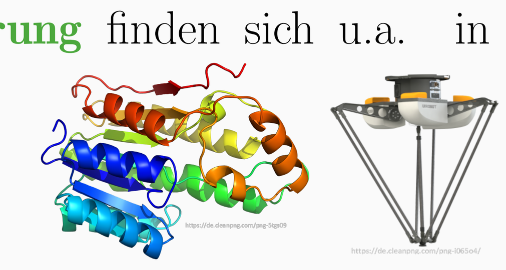


f_i = lower Bound auf Box X_i

Anwendungen / Software

Die **Anwendungen der Globalem Optimierung** finden sich u.a. in den Bereichen

- Computerchemie,
- Thermodynamik und
- Logistik.



Ein wichtiger Anwendungsfall in der Chemie ist die **Strukturvorhersage von Proteinfaltungen**, da die Struktur mit der **biologischen Wirksamkeit korreliert**.

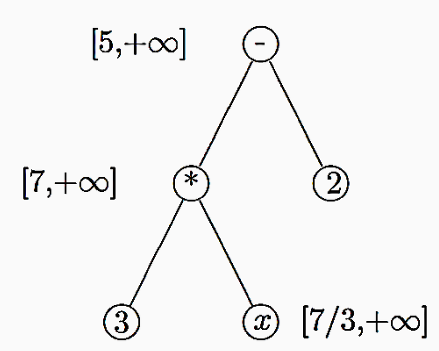
Für die **Anwendung unterschiedlicher DGO-Verfahren** stehen **Software-Frameworks**, wie zum Beispiel **BARON**, **GlobSol** und der **Frontline Interval Global Solver** zur Verfügung.

Branch-and-Reduce

- **Branch-and-Reduce** dient der **Einschränkung der Domäne** zum Ausschluss irrelevanter Gebiete mittels Constraint Propagation, Convex Relaxation, Intervall Arithmetic und Duality Arguments.
- **Constraint Propagation** liefert
  - eine **Reduktion der Domäne** ohne Verlust von Lösungskandidaten, durch
  - **Propagierung von Restriktionen** durch ihren Ausdruck.
- **Convex Relaxation** dient
  - der **Berechnung unterer Schranken** für die Zielfunktion auf Teil-Mengen,
  - indem **Zusammenhänge zwischen nicht-konvexen und konvexen Mengen und Funktionen** hergestellt werden.
- **Intervall Arithmetic** ermöglicht die **Konstruktion konvexer Relaxierungen** auf Mengen.
- **Duality Arguments**, z.B. die Lagrange-Dualität, liefern gute untere Schranken, die
  - zu **konvergenten Algorithmen** führen, und
  - **keine obere Schranke** benötigen.
  - **Duales Programm** $\equiv$ **Lineares Programm** $\Rightarrow$ **polynomielle Lösbarkeit**

Constraint Propagation

Finde $x \in \mathbb{R}$, welche $3x - 2 \geq 5$ erfüllen.



Convex Relaxation

Duality Arguments

(P)

$$\begin{aligned} &\min \ f(x) \\ &s.t. \ \ g(x) \in F \\ &\qquad x \in X \end{aligned}$$

Lagrange-Dualität

(D)

$$\begin{aligned} &\max \ d(u) \\ &s.t. \ \ u \in \mathbb{R}_+^m \end{aligned}$$

$$d(u) = \min_{x \in X} L(x,u)$$
$$L(x,u) := f(x) + u^T g(x)$$

Ausblick

Die DGO ist ein **dynamisches Feld**, mit **vielen Anwendungen**.
Durch neue **Entwicklungen und Erkenntnisse** im Bereich der **Quantencomputer** wird das Feld in Zukunft weiter wachsen und an **Einsatzmöglichkeiten und Relevanz gewinnen**.

Neueste Forschung

Neueste Forschungsergebnisse sind u.a. nachlesbar im

- **Journal of Global Optimization** oder
- **Journal of Optimization Theory and Applications**.

Weitere Infos