

OPTIMIERUNGsalgorithmen - DETERMINISTISCHE GLOBALE OPTIMIERUNG (DGO)

Tim Dafler
Universität Augsburg

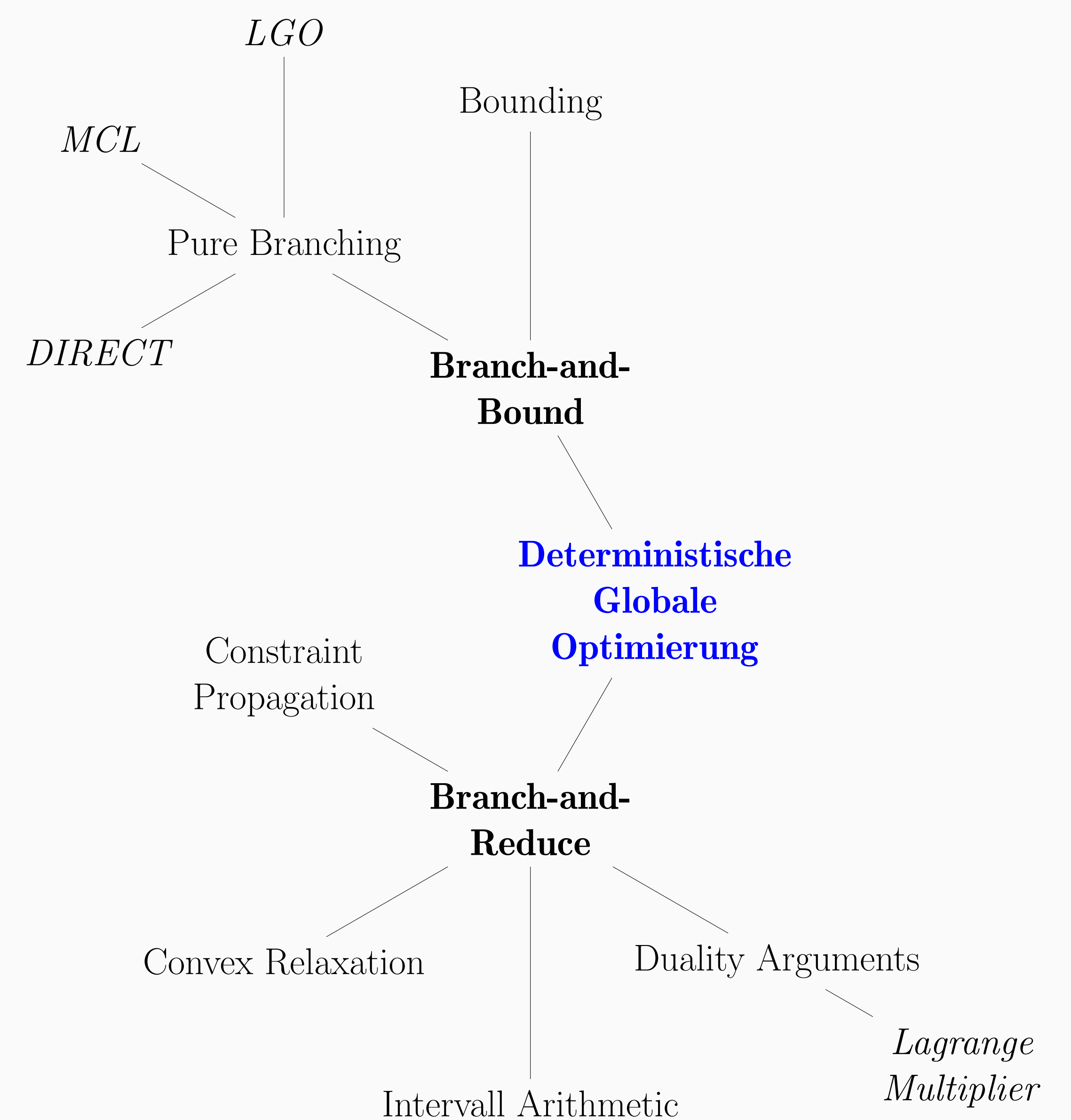
Motivation

- Verhalten und Handeln ist geprägt von zielgerichteten, rationalen Entscheidungsprozessen, welche das Ziel der **Ermittlung optimaler Handlungsstrategien** verfolgt.
- Der Prozess der Entscheidungsfindung durchläuft drei Schritte:
 - Die **Abstraktion der Realität** in ein handhabbares Modell,
 - die **Optimierung des gefundenen Modells** mittels **Optimierungsverfahren** und
 - 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
 - Rigoreuse Verfahren**, welche ein globales Minimum innerhalb vorgegebener Toleranz, auch unter **Einbezug von Rundungsfehlern**, mit Sicherheit erreichen.

Problem der DGO

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

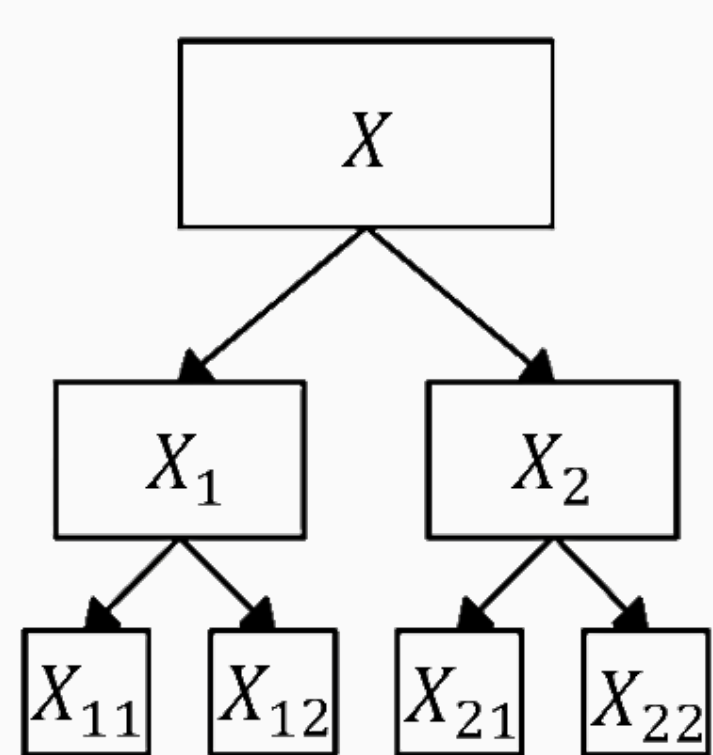
Ausgewählte Verfahren



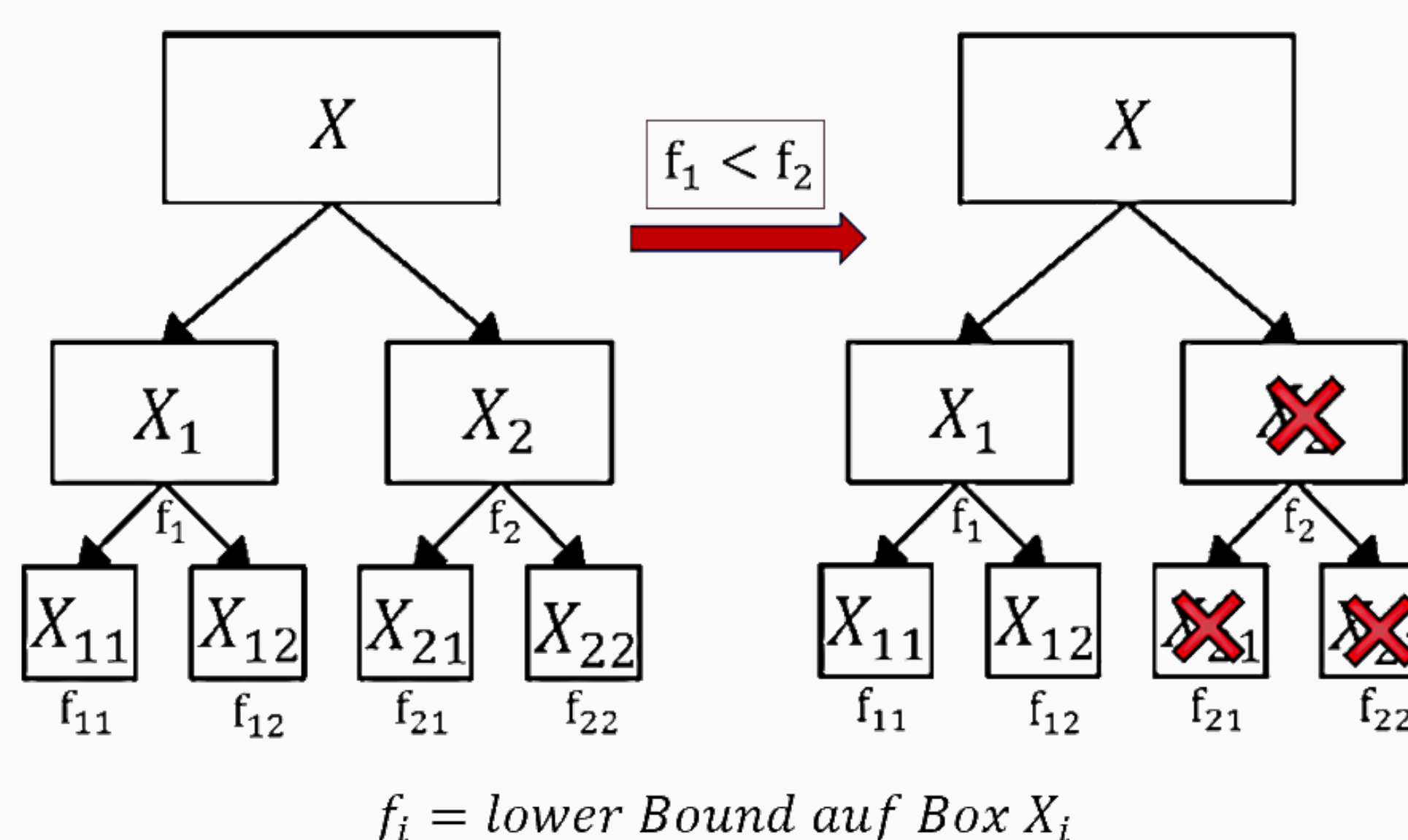
Branch-and-Bound

- 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



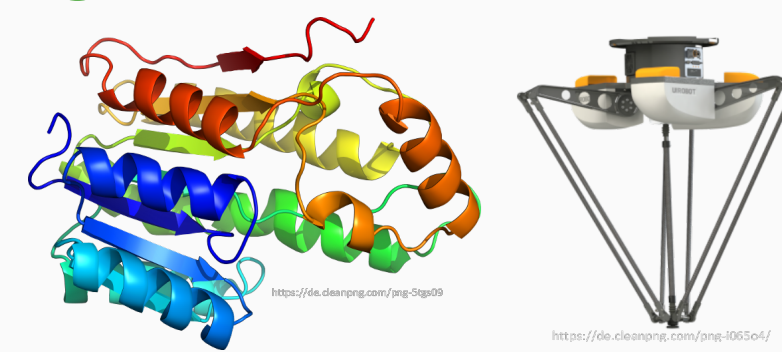
Bounding



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**.

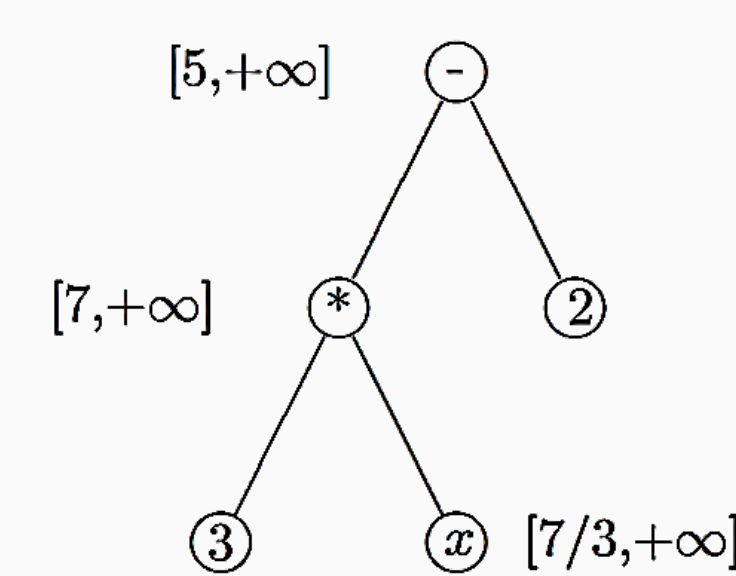
Für die **Anwendung unterschiedlicher DGO-Verfahren** stehen **Software-Frameworks**, wie zum Beispiel **BARON**, **GlobSol** und der **Frontline Interval Global Solver** zur Verfügung.

- Branch-and-Reduce** 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) | $\begin{aligned} \min & f(x) \\ \text{s.t. } & g(x) \in F \\ & x \in X \end{aligned}$ | Lagrange-Dualität | (D) | $\begin{aligned} \max & d(u) \\ \text{s.t. } & u \in \mathbb{R}_+^m \end{aligned}$ |
| | | | | $d(u) = \min_{x \in X} L(x, u)$ |
| | | | | $L(x, u) := f(x) + u^T g(x)$ |

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

