Teil II Optimierung

Gliederung

9 Einführung, Klassifizierung und Grundlagen

10 Lineare Optimierung

11 Ganzzahlige und kombinatorische Optimierung

12 Dynamische Optimierung

Literatur:

zu 10-12: Neumann, Morlock: Operations Research Hanser 2002
(Kap. 1, 3, 4, 5.1)

zu 10 und 11: Vanderbei. Linear Programming: Foundations & Extensions
4th Ed., Springer 2014.

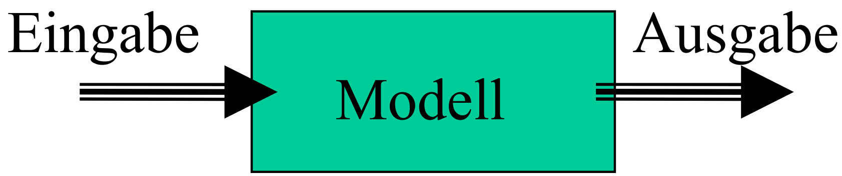
zu 11: Originalartikel

zu 12: M. Puterman. Markov Decision Processes – Discrete Stochastic Control.
Wiley 2005 (2nd eds.)

9 Einführung, Klassifizierung und Grundlagen

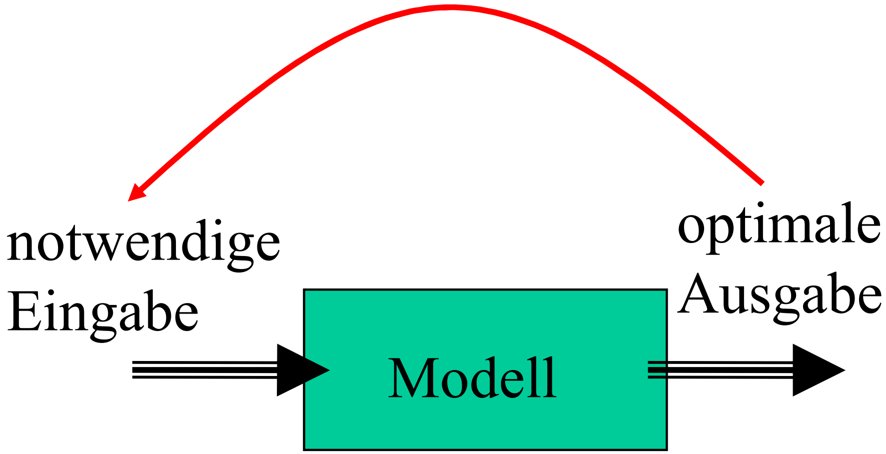
Sichtweise in den Kapiteln 2-8:

- Ermittlung der Ausgaben zu gegebenen Eingaben
  je nach Struktur des Modells
  analytisch, numerisch, simulativ



Sichtweise in den Kapiteln 10-12:

- Finde Eingaben, so dass die Ausgabe „optimal“ ist
- je nach Modellstruktur werden unterschiedliche Methoden zur Optimierung eingesetzt



Minimierung/Maximierung von Funktionen

Erst einmal ohne Berücksichtigung eines Zeitaspekts

Abstrakt untersuchen wir Funktionen $f(x): W \rightarrow \mathbb{R}$

Ziel: $\min_{x \in W} (f(x))$ oder auch $\max_{x \in W} (f(x)) \Rightarrow \min_{x \in W} (-f(x))$

Annahmen über f(x) (steigende Komplexität):

- Kann analytisch berechnet werden +
  Gradienten liegen in geschlossener Form vor
- Kann numerisch an einem Punkt ausgewertet werden,
  Gradienten sind numerisch zu ermitteln
- Nur Zusammenhang zwischen Ein- und Ausgaben bekannt,
  Gradienten nur aus Differenzenquotienten approximierbar

Zulässige Bereich W definiert den Definitionsbereich, in dem ein Optimum gesucht wird

- Diskrete Parameter
- Kontinuierliche Parameter
- Kombination von diskreten und kontinuierlichen Paraeters

Optimierungsverfahren und Komplexität der Probleme unterscheiden sich deutlich.

Diskrete Optimierung ist ein Schwerpunkt in Dortmund $\Rightarrow$ einige Vorlesungen zum Thema in der Informatik

Hier eine Einführung, die im Wesentlichen diskrete Probleme behandelt

- $W \subset \mathbb{R}^n$ wird durch Funktionen g_i ($i = 1,\ldots,p$) und h_j ($j = 1,\ldots,m$) beschrieben, so dass für alle $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ gelten muss $g_i(\mathbf{x}) = 0$ und $h_j(\mathbf{x}) \leq 0$ (Gleichungen auch darstellbar durch $h_{j1}(\mathbf{x}) \leq 0$ und $h_{j2}(\mathbf{x}) \geq 0$)

W bezeichnet man als den zulässigen Bereich

In der „mathematischen Optimierung“ wird i.d.R. davon ausgegangen, dass die Funktionen in geschlossener Form vorliegen.

Man unterschiedet u.a.

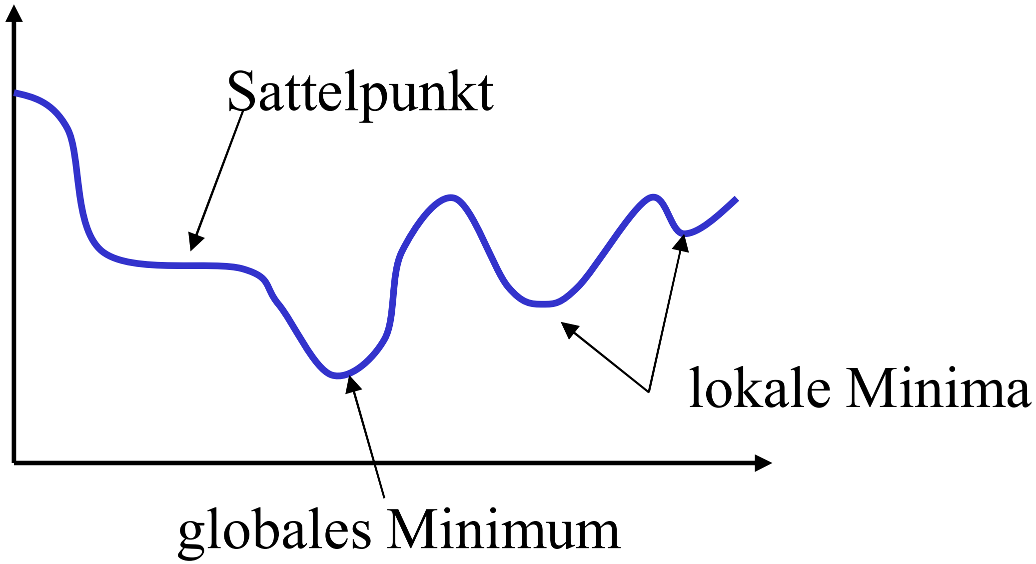
1. Nach Art der Zielfunktion
2. Art der Nebenbedingungen

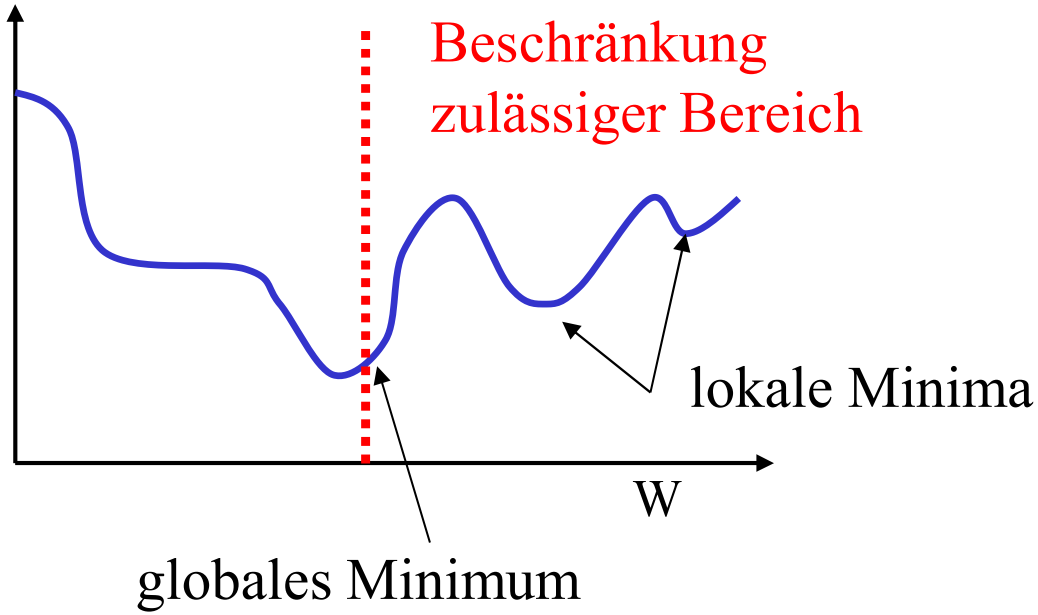
Grundsätzlich lassen sich einige der Verfahren aber auch auf allg. Zielfunktionen (z.B. komplexe Simulationsmodelle) übertragen
(was in der Vorlesung aber nicht im Mittelpunkt steht)

Klassifizierung einiger Optimierungsprobleme

Charakteristik	**Eigenschaft**	**Klassifizierung**
Anzahl Parameter	eins	univariat
	mehrere	multivariat
Parametertyp	reelle Zahlen	kontinuierlich
	ganze Zahlen	ganzzahlig
	Permutationen	kombinatorisch
Zielfunktion	lineare Funktion	linear
	quadratische Funktion	quadratisch
	konvex	konvex
	allgemein	nichtlinear
Nebenbedingungen	ohne	unbeschränkt
	mit	beschränkt

Optimalitätsbedingungen für kontinuierliche Probleme





$\mathbf{x}^*$ ist globales Minimum, falls

$\forall \mathbf{y} \in W$: $f(\mathbf{x}^*) \leq f(\mathbf{y})$

$\mathbf{x}^*$ ist lokales Minimum, falls

$\forall \mathbf{y} \in N(\mathbf{x}^*)$: $f(\mathbf{x}^*) \leq f(\mathbf{y})$

wobei $N(\mathbf{x}^*) \subset W$ die Nachbarschaft zulässiger Punkte von $\mathbf{x}^*$ ist

$N(\mathbf{x}) = \{\mathbf{y} \mid \mathbf{y} \in W \wedge \|\mathbf{x}-\mathbf{y}\| \leq \varepsilon\}$

für $\varepsilon > 0$ und $\mathbf{x} \in W$

Status der vorhandenen Lösungsverfahren:

- Viele problemspezifische Methoden
- Viele Probleme mit hoher „worst case“ Komplexität
- Globale Optimierung nur in wenigen Fällen möglich (lineare oder konvexe Probleme)
- In der Praxis werden oft heuristische Verfahren genutzt (Finden lokaler Optima oder guter Lösungen)

Klassifizierung von Lösungsmethoden für <u>kontinuierliche Probleme</u>:

- **White box-Methoden**:
  Struktur von f(**x**) wird zur Optimierung genutzt
  Gradient enthält die partiellen Ableitungen
  (Annahme: partielle Ableitungen existieren)

$$\mathrm{grad}(f(x)) = g(x) = \left(\frac{df}{dx_1}, \ldots, \frac{df}{dx_n}\right)$$

  Gradient zeigt Richtung der Verbesserung der Suchrichtung

  Notwendige Bedingungen für ein (lokales) Optimum:

  - Gradient = 0 oder
  - keine Verbesserung des erreichten Funktionswertes mehr möglich, ohne W zu verlassen

- **Black box-Methoden**:
  keine Kenntnis über die Struktur von f(**x**)
  Auswertung von f(**x**) an einigen Punkten $\Rightarrow$
  Suchrichtung aus den bekannten Funktionswerten ermitteln
  - Deterministische Suchverfahren:
    systematische Suche nach dem Optimum durch Eingrenzung
  - Stochastische Suchverfahren:
    zufallsgesteuerte Suche nach dem Optimum
  - Metamodellbasierte Verfahren:
    Bildung eines einfachen Ersatzmodells aus bekannten Werten
    Bestimmung der Suchrichtung oder neuer Suchpunkte aus
    dem Metamodell

  Abbruch der Suche, wenn in einem vorgegebenem Zeitintervall keine bessere Lösung mehr gefunden wird

Lokale - globale Optimierung

Optimalitätsbedingungen sichern i.d.R. nur lokale Optimalität

Nur in wenigen Fällen gilt lokales Optimum $\Rightarrow$ globales Optimum

Ansonsten oft heuristisches Vorgehen:

1. Wähle zufällig oder systematisch neuen Startpunkt
2. Führe lokale Optimierung aus
3. Falls neues lokales Optimum besser als bisherige lokale Optima, speichere Optimum
4. Falls Abbruchbedingung erfüllt, gib bestes lokales Optimum aus, sonst fahre bei 1 fort

Abbruchbedingungen: Anzahl Versuche, keine Verbesserung für K Versuche, erreichter Wert besser als Schranke, ….

Diskrete Optimierung

- zulässiger Bereich besteht ist eine endliche oder abzählbare Menge
- Elementе der Menge u.U. qualitativ d.h. nicht geordnet
  z.B. Schedulingstrategien, Zuordnungen, Wetterbedingungen, …
- Gradienten ohne oder mit geringer Aussagekraft
  d.h. Bedingungen für lokale Optimalität fehlen oft
- Nutzung von Techniken der Analysis wenig hilfreich
  z.B. lokale Linearisierung, Taylor-Reihenentwicklung, …
- diskrete Probleme i.d.R. „schwerer“ als vergleichbare kontinuierliche Probleme
  z.B. lineare Programmierung mit polynomiellem Aufwand, lineare ganzzahlige Programmierung NP-schwer

Techniken zur diskreten Optimierung

- Ersetzung der diskreten durch kontinuierliche Variablen, Optimierung des kontinuierlichen Problems, Runden der kontinuierlichen Lösung
- Nutzung kontinuierliche Probleme zur Berechnung von Schranken und zusätzlicher Nebenbedingungen
  iterative Verbesserung der diskreten Lösung
- Nutzung des Gradienten zur Bestimmung der Suchrichtung
- Heuristische lokale Suche (deterministisch oder stochastisch)
- Metaheuristiken (genetische, evolutionäre Algorithmen)
- Metamodellbasierte Verfahren
- problemspezifische Heuristiken

Darüber hinaus kann

- das Optimierungsproblem von zusätzlichen Zufallseinflüssen abhängen
- die Optimierung als dynamischer Prozess betrachtet werden, bei dem durch Entscheidungen zu einem Zeitpunkt die Zukunft und damit zukünftige Entscheidungen beeinflusst werden (z.B. Lagerhaltung)
- der Wert der Zielfunktion sich mit der Zeit ändern, so dass das Optimum permanent neu ermittelt werden muss
- die Zielgröße mehrdimensional sein und sich nicht auf einen skalaren Resultatwert abbilden lassen
- …

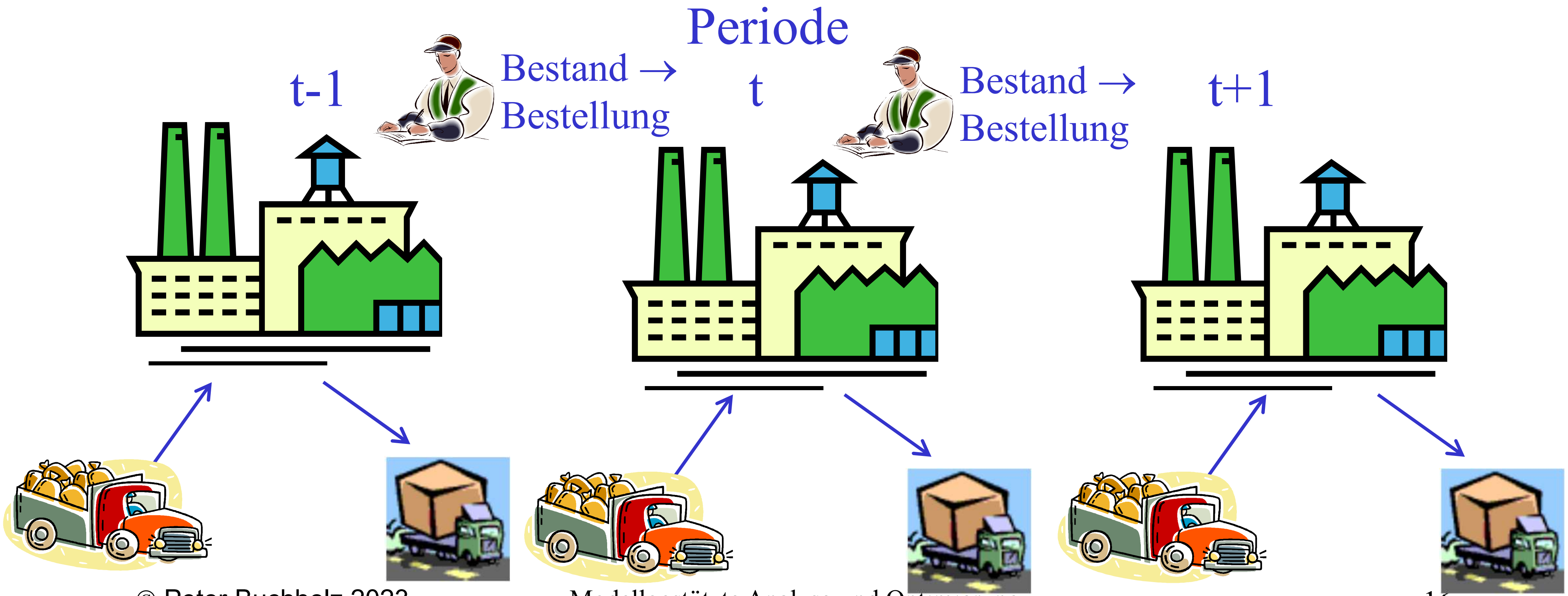
Zufallseinflüsse

(stochastische Optimierung, Optimierung stochastischer Funktionen)

- $f(\mathbf{x})$ ist ZVs
  - $f(\mathbf{x},u)$ ist eine deterministische Funktion
    (Aussagen über alle möglichen u gewünscht)
  - Definition eines Optimierungsziels: Was heißt $f(\mathbf{x})<f(\mathbf{y})$?
    Oft verwendet Minimierung/Maximierung des Erwartungswertes $E[f(\mathbf{x},\mathbf{u})]$ oder der Varianz $\sigma^2[f(\mathbf{x},\mathbf{u})]$ oder der Kombination aus Erwartungswert und Varianz
- Nebenbedingungen ZVs sein, z.B. $E(h(\mathbf{x})) \leq 0$
- Typisches Szenario bei der Optimierung von Simulationsmodellen, bei denen f oder h darüber hinaus nicht in geschlossener Form vorliegt

Dynamische Optimierung

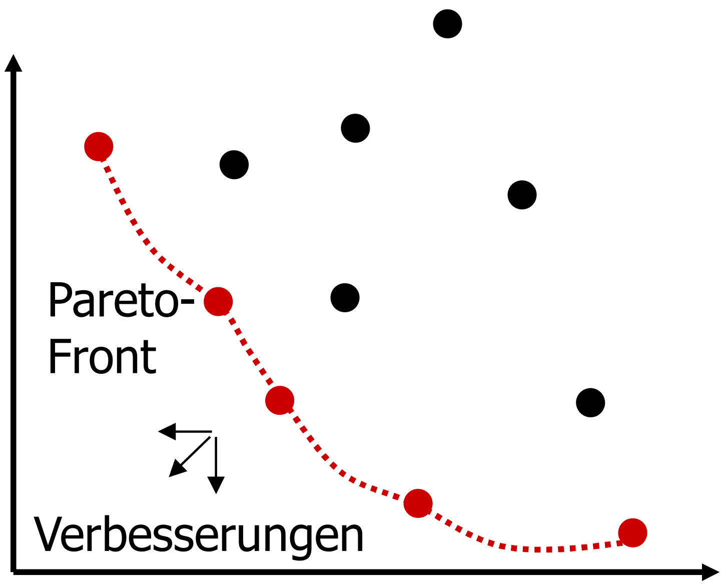
- Probleme in Stufen/Schritte unterteilt
  (z.B. Perioden in einem Lager), nach einem Schritt
  - sind neue Informationen bekannt (z.B. Bedarf in der Periode)
  - können Entscheidungen getroffen werden
    (z.B. Bestellmenge für die nächste Periode)



Zeitabhängigkeit der Zielfunktion:

- Erweiterung der schrittweisen/stufenweisen Sichtweise Informationen treffen zu kontinuierlichen Zeitpunkten ein und sorgen für neue Parameter in der Zielfunktion und/oder den Nebenbedingungen (z.B. aktuelle Verkehrsinformationen bei der Routenplanung, Ausfall/Reparatur bei der Fertigungsplanung)
- Optimum muss nachgeführt werden auf Basis
  - Berücksichtigung bereits durchgeführter Schritte
  - Informationen über das zukünftige Verhalten
- Probleme enthalten oft stochastische Annahmen
- Anwendungsgebiet für iterative (heuristische) Verfahren

Multikriterielle Zielfunktion



Mehrere Zielfunktionen:

$f_j(\mathbf{x})$ $(j=1,\ldots,m)$

Beste Lösung existiert i.d.R. nicht!

$\mathbf{x}$ dominiert $\mathbf{y}$ $\Leftrightarrow$

$f_j(\mathbf{y}) \geq f_j(\mathbf{x})$ für alle j

ansonsten unvergleichbar

Pareto-Front enthält Lösungen, die nicht dominiert werden!

Auswahl der besten/passendsten Lösung $\Rightarrow$

weitere Informationen oder menschliche Entscheider

Abbildung auf ein Kriterium durch gewichtete Summe:

$$f(\mathbf{x}) = \Sigma_{j=1,\ldots,m}\, \alpha_j f_j(\mathbf{x})$$

(einfache Transformation oft nicht ausreichend!)

Vorlesung kann nur einen kleinen Teilbereich der Optimierung behandeln

Ausgewählte Themengebiete und die Begründung für die Auswahl:

- Ansätze die erfolgreich für eine praktisch relevante Klasse von Problemen eingesetzt wurden
    - Lineare Programmierung
    - Dynamische Programmierung
- Einführung in die ganzzahlige und kombinatorische Optimierung

Nicht behandelt werden u.a.

- Nichtlineare Optimierung
- Methoden zur Optimierung von Simulationsmodellen

Inhalt der Vorlesung Mod.&Sim. im WS

Ziele:

- Einordnen können von Optimierungsproblemen
- Kennen lernen der bei der Optimierung auftretenden Probleme
- Kennen lernen der Struktur linearer Programme und des Simplexalgorithmus
- Kennen lernen grundsätzlicher Ansätze zur ganzzahligen und kombinatorischen Optimierung
- Einordnen der Modelle, die mit dynamischer Optimierung lösbar sind in die Klasse der Entscheidungsprobleme
- Übersicht über Lösungsmethoden der dynamischen Optimierung erlangen