Seminar *Globale Optimierung*

Outer Approximation für konvexe MINLP-Probleme

Hans Joachim Ferreau

`ferreau@urz.uni-heidelberg.de`

30.06.2005

Inhalt

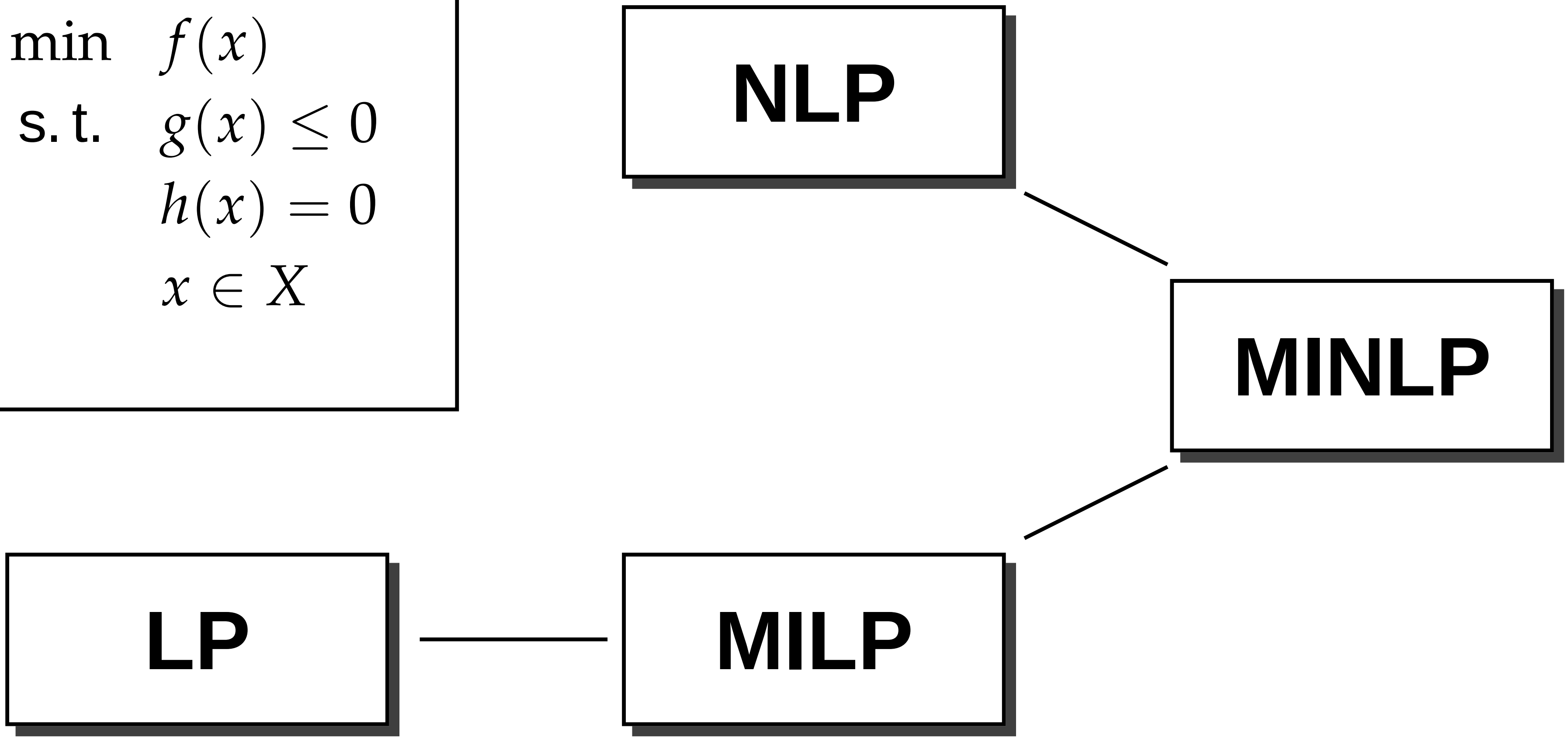
Einleitung

Eigenschaften eines MINLP

- Ziel: Auffinden globaler Extrempunkte von gemischt-ganzzahligen, nichtlinearen Programmen (MINLP)
- Eigenschaften eines MINLP:
  - i. Allg. nichtlineare Zielfunktion
  - lineare oder nichtlineare Nebenbedingungen
  - kontinuierliche und ganzzahlige Variablen

Einordnung in den Kontext der Optimierung

$$
\begin{array}{ll}
\min & f(x) \\
\text{s. t.} & g(x) \leq 0 \\
 & h(x) = 0 \\
 & x \in X
\end{array}
$$



Einschränkungen

- Bereits globale Optimierung von NLPs (sehr) schwierig
- MINLPs können daher nur unter restriktiven Annahmen garantiert optimal gelöst werden
- Wir beschränken uns daher auf Probleme mit
  - konvexer Zielfunktion und
  - konvexen (Ungleichungs-)Nebenbedingungen
- Outer Approximation löst solche Probleme in endlich vielen Schritten

Warum Binärvariablen?

- Des Weiteren betrachten wir nur ganzzahlige Binärvariablen
- Dies bedeutet aber keine Einschränkung, da jede ganzzahlige Variable durch Binärvariablen ausgedrückt werden kann
- Binärvariablen repräsentieren oft Entscheidungen (z. B. ob eine Maschine eingesetzt wird oder nicht)
- Gebrochene Entscheidungswerte machen keinen Sinn! Daher ganzzahlige Modellierung notwendig

Outer Approximation

Problemformulierung

- **Outer Approximation**
  - **Problemformulierung**

    Lösungsstrategien

    Algorithmus

Problemformulierung · OA-MINLP

- Outer Approximation wurde erstmal 1986 für folgende Problemklasse vorgestellt:

$$\text{OA-MINLP} \quad \begin{cases} \min\limits_{x,y} & f(x) + c^T y \\ \text{s.t.} & g(x) + By \leq 0 \\ & x \in X := \left\{ x \in \mathbb{R}^n \;\middle|\; A_1 x \leq a_1 \right\} \\ & y \in Y := \left\{ y \in \{0,1\}^p \;\middle|\; A_2 y \leq a_2 \right\} \end{cases}$$

- Dabei sind $x \in \mathbb{R}^n$, $y \in \{0,1\}^p$, $c \in \mathbb{R}^p$, $B \in \mathbb{R}^{q \times p}$ sowie $A_1 \in \mathbb{R}^{m_1 \times n}$, $A_2 \in \mathbb{R}^{m_2 \times p}$, $a_1 \in \mathbb{R}^{m_1}$, $a_2 \in \mathbb{R}^{m_2}$.

Problemformulierung · Annahmen

(A1) $X \subset \mathbb{R}^n$ ist nichtleer, *kompakt* und *konvex*

(A2) Die Funktionen

$$\begin{aligned} f:\ \mathbb{R}^n &\longrightarrow \mathbb{R} \quad \text{und} \\ g:\ \mathbb{R}^n &\longrightarrow \mathbb{R}^q \end{aligned}$$

sind *konvex* und *stetig-differenzierbar*

(A3) Es gilt die *Slater'sche Constraint Qualification*: Sei

$$V := \left\{ y \in \{0,1\}^p \;\middle|\; \exists\, x \in X:\ g(x) + By \leq 0 \right\} ,$$

dann gibt es zu jedem $y \in Y \cap V$ auch ein $\tilde{x} \in X$, so dass gilt

$$g(\tilde{x}) + By < 0$$

Problemformulierung · Implizite Annahmen

- Die Formulierung des $\mathrm{OA\text{-}MINLP}$ macht bereits folgende implizite Annahmen:
  - Zielfunktion ist separierbar in x und y
  - y-Variablen kommen nur linear vor
- Außerdem kann die von uns betrachtete Form der Outer Approximation keine nichtlinearen Gleichungsnebenbedingungen behandeln
- Umformulierungen der Art

$$h(x) = 0 \quad \Longleftrightarrow \quad h(x) \leq 0 \ \wedge \ -h(x) \leq 0$$

  verletzen die Konvexitätsbedingung (A2)

Lösungsstrategien

- **Outer Approximation**
  - Problemformulierung
  - **Lösungsstrategien**
  - Algorithmus

Lösungsstrategien · Idee

- Für jeden fixierten Vektor $y^j \in Y$ erhält man ein leicht zu lösendes, konvexes NLP
- Optimale Lösung des NLP x^j liefert obere Schranke $f(x^j) + c^T y^j$
- Außerdem ersetze im Orginalproblem f und g durch ihre Linearisierungen um x^j und erhalte so ein MILP
- Lösung dieses MILP liefert wegen Konvexität untere Schranke und neuen ganzzahligen Vektor y^{j+1}
- Iteriere dieses Verfahren bis obere und untere Schranken übereinstimmen

Lösungsstrategien · Primalprogramm

- Für jedes feste y^j erhält man folgendes Primalprogramm

$$\text{OA-NLP}(y^j) \left\{ \begin{array}{rl} \min\limits_{x} & f(x) + c^T y^j \\ \text{s. t.} & g(x) + By^j \leq 0 \\ & x \in X \end{array} \right.$$

- Sei zunächst $y^j \in Y \cap V$. Dann gilt:
  - Es existiert eine optimale Lösung x^j, denn X ist kompakt
  - Wir erhalten eine obere Schranke $UBD := f(x^j) + c^T y^j$

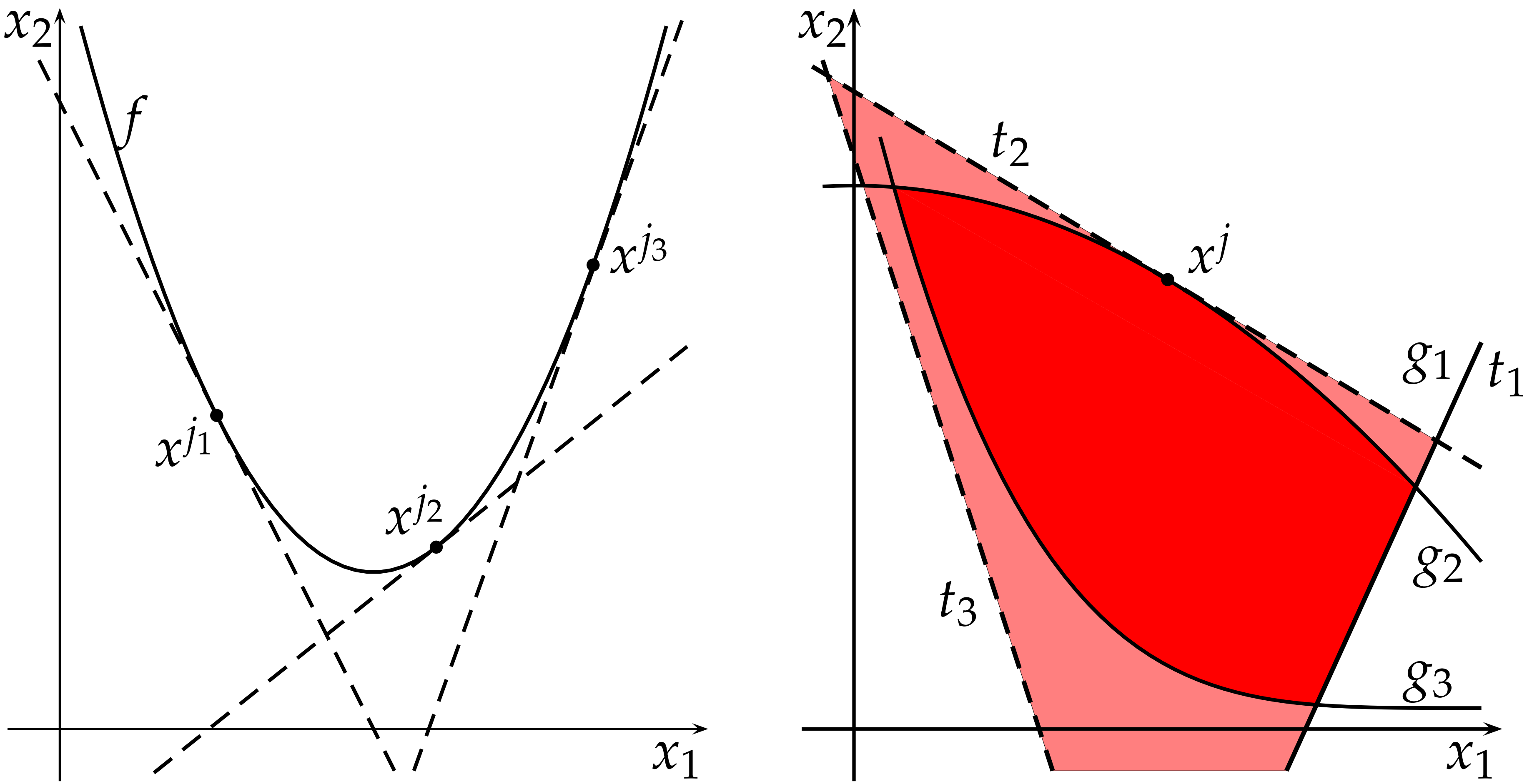
Lösungsstrategien · Zulässiges Primalprogramm

- Wegen der Konvexität von f und g gilt:

$$\begin{aligned} f(x) &\geq f(x^j) + \nabla f(x^j)^T (x - x^j) \qquad \forall\, x \in X \\ g(x) &\geq g(x^j) + \nabla g(x^j)^T (x - x^j) \qquad \forall\, x \in X \end{aligned}$$

- Dies kann man auch leicht geometrisch veranschaulichen. . .

Lösungsstrategien · Geometrische Veranschaulichung



Lösungsstrategien · Zulässiges Primalprogramm

- **Satz:** Unter den Annahmen (A1), (A2) und insbesondere (A3) gilt für alle $x^j \in X$:

$$\left|\begin{array}{ll} \min\limits_{x} & f(x) + c^T y^j \\ \text{s. t.} & g(x) + By^j \leq 0 \\ & x \in X \end{array}\right| = \left|\begin{array}{ll} \min\limits_{x} & f(x^j) + \nabla f(x^j)^T (x - x^j) + c^T y^j \\ \text{s. t.} & g(x^j) + \nabla g(x^j)^T (x - x^j) + By^j \leq 0 \\ & x \in X \end{array}\right|$$

  Es genügt sogar, nur die Linearisierungen der im Punkt (x^j, y^j) aktiven Ungleichungen zu berücksichtigen.

Lösungsstrategien · Zulässiges Primalprogramm

- Außerdem gilt

$$
\left|\begin{array}{rl}
\min\limits_{x} & f(x^j) + \nabla f(x^j)^T (x - x^j) + c^T y^j \\
\text{s. t.} & g(x^j) + \nabla g(x^j)^T (x - x^j) + By^j \leq 0 \\
 & x \in X
\end{array}\right|
$$

$$
= \left|\begin{array}{rl}
\min\limits_{x,\eta} & \eta + c^T y^j \\
\text{s. t.} & f(x^j) + \nabla f(x^j)^T (x - x^j) \leq \eta \\
 & g(x^j) + \nabla g(x^j)^T (x - x^j) + By^j \leq 0 \\
 & x \in X \\
 & \eta \in \mathbb{R}
\end{array}\right|
$$

Lösungsstrategien · Unzulässiges Primalprogramm

- Falls jedoch $y^j \in Y \setminus V$, so besitzt das Primalprogramm keine Lösung
- **Satz (Integer Cuts):** Sei $y^j = (y_1^j, \ldots, y_p^j)^T \in \{0,1\}^p$ mit den Indexmengen

$$B^j := \left\{ l \mid y_l^j = 1 \right\} \quad \text{und} \quad NB^j := \left\{ l \mid y_l^j = 0 \right\}$$

gegeben. Dann wird die Ungleichung

$$\sum_{l \in B^j} y_l - \sum_{l \in NB^j} y_l \leq \left| B^j \right| - 1$$

nur vom Vektor y^j verletzt und von allen anderen Vektoren $y \in \{0,1\}^p \setminus \left\{ y^j \right\}$ erfüllt.

Lösungsstrategien · Masterprogramm

- Wir schreiben das OA-MINLP um:

$$\text{OA-MINLP}_{\Leftrightarrow} \begin{cases} \min\limits_{y} & \text{OA-NLP}(y) \\ \text{s.t.} & y \in Y \cap V \end{cases}$$

- Und weiter:

$$\text{OA-MINLP}_{\Leftrightarrow} \begin{cases} \min\limits_{x,y,\eta} & \eta + c^T y & \\ \text{s.t.} & \eta \geq f(x^j) + \nabla f(x^j)(x - x^j) & \forall j \in F \\ & 0 \geq g(x^j) + \nabla g(x^j)(x - x^j) + By & \forall j \in F \\ & x \in X,\ y \in Y \cap V,\ \eta \in \mathbb{R} & \end{cases}$$

Lösungsstrategien · Masterprogramm

- wobei
$$F := \left\{ j \;\middle|\; \mathrm{OA\text{-}NLP}(y^j) \text{ zulässig mit Optimallösung } x^j \right\}$$
- Das so erhaltene MILP beinhaltet zwei Schwierigkeiten:
  - Die Menge $Y \cap V$ ist nicht explizit bekannt
  - Für jede Optimallösung x^j erhält man bis zu $q + 1$ Ungleichungsnebenbedingungen, insgesamt also bis zu $2^p(q + 1)$
- Daher wird $\mathrm{OA\text{-}MINLP}_{\Leftrightarrow}$ relaxiert, d. h. die meisten Nebenbedingungen werden weggelassen

Lösungsstrategien · Masterprogramm

- Auf diese Art erhält man das sog. Masterprogramm

$$
\text{OA-MASTER}^i \left\{ \begin{array}{lll}
\min\limits_{x,y,\eta} & \eta + c^T y & \\
\text{s. t.} & \eta \geq f(x^j) + \nabla f(x^j)(x - x^j) & \forall\, j \in F^i \\
& 0 \geq g(x^j) + \nabla g(x^j)(x - x^j) + By & \forall\, j \in F^i \\
& \sum\limits_{l \in B^k} y_l - \sum\limits_{l \in NB^k} y_l \leq \left| B^k \right| - 1 & \forall\, k \in \overline{F^i} \\
& \eta + c^T y < UBD & \\
& x \in X,\ y \in Y,\ \eta \in \mathbb{R} &
\end{array} \right.
$$

$F^i := \left\{ j \leq i \;\middle|\; \text{OA-NLP}(y^j) \text{ zulässig mit Optimallösung } x^j \right\}$,

$\overline{F^i} := \left\{ k \leq i \;\middle|\; \text{OA-NLP}(y^k) \text{ ist unzulässig} \right\}$

Algorithmus

- **Outer Approximation**

    Problemformulierung

    Lösungsstrategien

    - **Algorithmus**

Algorithmus · Teil 1

1. - $i := 1$, $F^0 := \overline{F^0} := \emptyset$ und $UBD := \infty$.
   - Wähle $y^0 \in Y$ (oder $y^0 \in Y \cap V$ falls verfügbar).
2. Löse Primalprogramm $\text{OA-NLP}(y^i)$:
   (a) $\text{OA-NLP}(y^i)$ ist zulässig mit Optimallösung (x^i, y^i):
   - ♦ Falls $f(x^i) + c^T y^i < UBD$:
     $UBD := f(x^i) + c^T y^i$, $x^* := x^i$ und $y^* := y^i$.
   - ♦ $F^i := F^{i-1} \cup \{i\}$ und $\overline{F^i} := \overline{F^{i-1}}$, d. h. füge die um Punkt x^i linearisierten Ungleichungsnebenbedingungen hinzu.
   - ♦ Gehe zu Schritt 3.

   (b) $\text{OA-NLP}(y^i)$ ist unzulässig: $F^i := F^{i-1}$ und $\overline{F^i} := \overline{F^{i-1}} \cup \{i\}$, d. h. füge einen Integer Cut hinzu.

Algorithmus · Teil 2

3. Löse relaxierte Masterprogramm $\mathrm{OA\text{-}MASTER}^i$:
   (a) $\mathrm{OA\text{-}MASTER}^i$ ist zulässig mit Optimallösung $(\hat{x}^{i+1}, \hat{y}^{i+1})$:
      - $y^{i+1} := \hat{y}^{i+1}$ und $i := i + 1$.
      - Gehe zu Schritt 2.

   (b) $\mathrm{OA\text{-}MASTER}^i$ ist unzulässig: STOPP, Optimallösung (x^*, y^*) gefunden (falls $UBD < \infty$, ansonsten ist $\mathrm{OA\text{-}MINLP}$ unzulässig).

- **Satz:** Unter den Annahmen (A1), (A2) und (A3) terminert der Outer-Approximation-Algorithmus nach endlich vielen Schritten und berechnet eine Optimallösung des $\mathrm{OA\text{-}MINLP}$, falls dieses zulässig ist.

Algorithmus · Startvektor

- Einen Startvektor y^0 kann man wie folgt ermitteln:
  - Stelle NLP-Relaxierung des $\mathrm{OA\text{-}MINLP}$ auf, d. h. ersetze

$$y \in \{0,1\}^p \quad \text{durch} \quad y \in [0,1]^p$$

  - Löse sie und runde die y-Komponenten auf ganzzahlige Werte
- Liefert die NLP-Relaxierung einen ganzzahligen y-Vektor, so ist ihre Lösung optimal für das $\mathrm{OA\text{-}MINLP}$
- Falls die NLP-Relaxierung unzulässig ist, so ist auch das $\mathrm{OA\text{-}MINLP}$ unzulässig

Verallgemeinerte Outer Approximation

Problemformulierung

- **Verallgemeinerte Outer Approximation**
  - **Problemformulierung**

    Unzulässige Primalprogramme

    Verbessertes Masterprogramm

Problemformulierung · Verbesserungen

- Die Verallgemeinerte Outer Approximation wurde 1994 von Fletcher und Leyffer vorgestellt
- Zwei wesentliche Verbesserungen sind:
  - Ganzzahligen Variablen y dürfen auch nichtlinear und nichtseparierbar vorkommen
  - Unzulässige Primalprogramme werden auf theoretisch gesicherter Grundlage zur Verschärfung der Relaxierung des Masterprogramms benutzt

Problemformulierung · GOA-MINLP

- Die verallgemeinerte Problemformulierung lautet:

$$\text{GOA-MINLP} \quad \left\{ \begin{array}{rl} \min\limits_{x,y} & f(x,y) \\ \text{s.t.} & g(x,y) \le 0 \\ & x \in X := \left\{ x \in \mathbb{R}^n \;\middle|\; A_1 x \le a_1 \right\} \\ & y \in Y := \left\{ y \in \{0,1\}^p \;\middle|\; A_2 y \le a_2 \right\} \end{array} \right.$$

- Die Annahmen (A1), (A2) und (A3) gelten analog weiter

Unzulässige Primalprogramme

- **Verallgemeinerte Outer Approximation**
  - Problemformulierung
  - **Unzulässige Primalprogramme**
  - Verbessertes Masterprogramm

Unzulässige Primalprogramme · GOA-NLP

- Das Primalprogramm bleibt unverändert:

$$\text{GOA-NLP}(y^j) \left\{ \begin{array}{rl} \min\limits_{x} & f(x, y^j) \\ \text{s. t.} & g(x, y^j) \leq 0 \\ & x \in X \end{array} \right.$$

- Jedoch wird der unzulässige Fall ($y \in Y \setminus V$) nun anders behandelt
- Die meisten NLP-Löser verwenden Phase-I-Ansatz zum Auffinden eines zulässigen Startvektors

Unzulässige Primalprogramme · Phase I

- Dazu lösen sie

$$\min_{x} \quad \sum_{i=1}^{q} g_i^+(x, y^j) \qquad \text{oder} \qquad \min_{x} \quad \max_{1 \le i \le q} g_i^+(x, y^j)$$
$$\text{s. t.} \quad x \in X \qquad\qquad\qquad\qquad \text{s. t.} \quad x \in X$$

  mit $g_i^+ := \max\{0, g_i\}$ und festem y^j

- Alternative:
  - Stelle sicher, dass eine einmal erfüllte Ungleichung gültig bleibt
  - Versuche so, sukzessive alle Ungleichungen zu erfüllen

Unzulässige Primalprogramme · GOA-FEAS

- Formal wird dadurch folgendes Unzulässigkeitsprogramm gelöst:

$$\text{GOA-FEAS}(y^k) \begin{cases} \min\limits_{x} & \sum\limits_{i \in \bar{I}} w_i^k g_i^+(x, y^k) \\ \text{s. t.} & g_i(x, y^k) \leq 0 \qquad \forall\, i \in I \\ & x \in X \end{cases}$$

- I bzw. $\bar{I}$ sind dabei die Mengen der momentan gültigen bzw. ungültigen Ungleichungsnebenbedingungen
- $\text{GOA-FEAS}(y^k)$ hat genau dann eine Optimallösung größer 0, wenn das zugehörige Primalprogramm unzulässig ist

Unzulässige Primalprogramme · Linearisierungen

- **Satz:** Das Primalprogramm $\mathrm{GOA\text{-}NLP}(y^k)$ sei unzulässig, so dass x^k das Unzulässigkeitsprogramm $\mathrm{GOA\text{-}FEAS}(y^k)$ mit

$$\sum_{i \in \bar{I}} w_i^k g_i^+(x, y^k) > 0$$

löst. Dann ist $y = y^k$ für alle $x \in X$ unzulässig in den folgenden Nebenbedingungen:

$$0 \geq g_i(x^k, y^k) + \nabla g_i(x^k, y^k)^T \begin{pmatrix} x - x^k \\ y - y^k \end{pmatrix} \quad \forall i \in \{1, \ldots, p\} \,.$$

Auch hier genügt es, nur die Linearisierungen der im Punkt (x^k, y^k) aktiven Ungleichungen zu berücksichtigen.

Verbessertes Masterprogramm

- **Verallgemeinerte Outer Approximation**
  - Problemformulierung
  - Unzulässige Primalprogramme
  - **Verbessertes Masterprogramm**

Verbessertes Masterprogramm · GOA-MINLP$_{\Leftrightarrow}$

- Wir formulieren folgendes MILP:

$$\text{GOA-MINLP}_{\Leftrightarrow} \left\{ \begin{array}{lll} \min\limits_{x,y,\eta} & \eta & \\ \text{s. t.} & \eta \geq f(x^j, y^j) + \nabla f(x^j, y^j)^T \begin{pmatrix} x - x^j \\ y - y^j \end{pmatrix} & \forall\, j \in F \\ & 0 \geq g(x^j, y^j) + \nabla g(x^j, y^j)^T \begin{pmatrix} x - x^j \\ y - y^j \end{pmatrix} & \forall\, j \in F \\ & 0 \geq g(x^k, y^k) + \nabla g(x^k, y^k)^T \begin{pmatrix} x - x^k \\ y - y^k \end{pmatrix} & \forall\, k \in \overline{F} \\ & x \in X,\ y \in Y,\ \eta \in \mathbb{R} & \end{array} \right.$$

Verbessertes Masterprogramm · GOA-MINLP$_\Leftrightarrow$

- mit den Indexmengen

$$
\begin{aligned}
F &:= \left\{ j \;\middle|\; \mathrm{GOA\text{-}NLP}(y^j) \text{ ist zulässig mit Optimallösung } x^j \right\}, \\
\overline{F} &:= \Big\{ k \;\Big|\; \mathrm{OA\text{-}NLP}(y^k) \text{ ist unzulässig} \\
&\qquad \text{und } x^k \text{ ist Optimallösung von } \mathrm{GOA\text{-}FEAS}(y^k) \Big\}
\end{aligned}
$$

- **Satz:** Unter den Annahmen (A1), (A2) und (A3) ist sind die Programme GOA-MINLP und GOA-MINLP$_\Leftrightarrow$ äquivalent. Das soll heißen, dass (x^*, y^*) genau dann eine Lösung von GOA-MINLP ist, wenn (x^*, y^*) eine Lösung von GOA-MINLP$_\Leftrightarrow$ ist.

Verbessertes Masterprogramm · GOA-MASTER

- Masterprogramm durch Relaxierung von $\mathrm{GOA\text{-}MINLP}_{\Leftrightarrow}$:

$$
\text{GOA-MASTER}^i \left\{
\begin{array}{lll}
\min\limits_{x,y,\eta} & \eta & \\
 & \eta < UBD & \\
 & \eta \geq f(x^j,y^j) + \nabla f(x^j,y^j)^T \begin{pmatrix} x - x^j \\ y - y^j \end{pmatrix} & \forall\, j \in F^i \\
 & 0 \geq g(x^j,y^j) + \nabla g(x^j,y^j)^T \begin{pmatrix} x - x^j \\ y - y^j \end{pmatrix} & \forall\, j \in F^i \\
 & 0 \geq g(x^k,y^k) + \nabla g(x^k,y^k)^T \begin{pmatrix} x - x^k \\ y - y^k \end{pmatrix} & \forall\, k \in \overline{F^i} \\
 & x \in X,\ y \in Y,\ \eta \in \mathbb{R} &
\end{array}
\right.
$$

Verbessertes Masterprogramm · Algorithmus

- Einarbeitung der erwähnten Änderungen ergibt den Algorithmus für die Verallgemeinerte Outer Approximation
- **Satz:** Unter den Annahmen (A1), (A2) und (A3) terminert der Verallgemeinerte-Outer-Approximation-Algorithmus nach endlich vielen Schritten mit einer Optimallösung des GOA-MINLP oder der Meldung, dass dieses zulässig ist.

Implementierungsaspekte

Primal- und Masterprogramme

- **Implementierungsaspekte**
  - **Primal- und Masterprogramme**

    Nur ein Masterprogramm

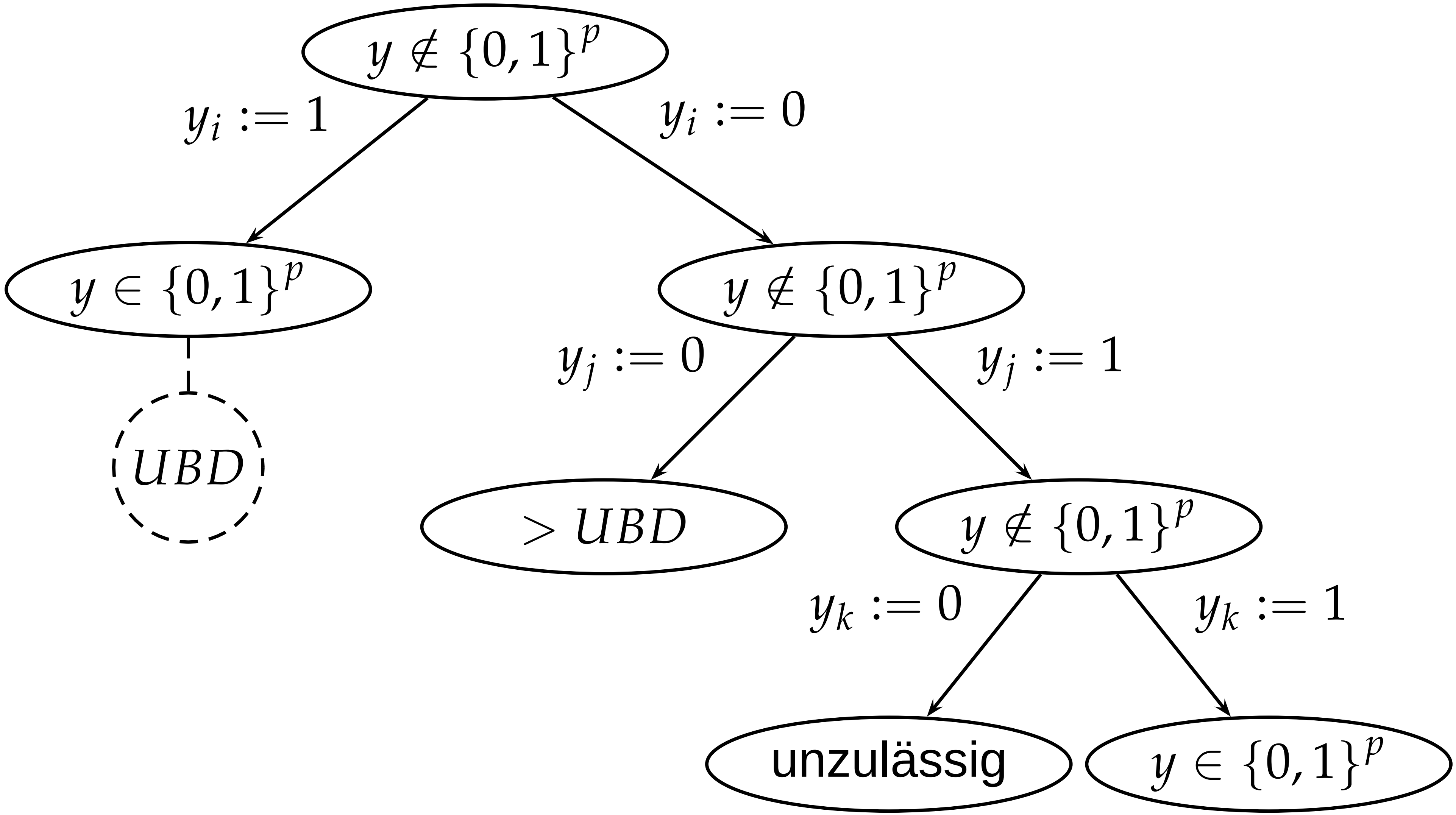
Primal- und Masterprogramme · NLP

- In jeder OA-Iteration wird sowohl ein NLP als auch ein MILP gelöst
- Die NLPs haben konvexe Zielfunktion und konvexe Ungleichungsnebenbedingungen
- Lösen der NLPs daher relativ leicht (etwa mit SQP), wenn Zahl der Nebenbedingungen nicht zu groß ist
- Zeitkritisch ist vor allem das Lösen der MILP

Primal- und Masterprogramme · MILP

- In jeder Iteration werden dem MILP bis zu $q+1$ Nebenbedingungen hinzugefügt
- Reduzierung möglich, wenn nur Linearisierungen der aktiven Nebenbedingungen berücksichtigt werden
- Dies hat allerdings ggf. eine Abschwächung der Relaxierung zur Folge, was Zahl der Iterationen erhöht
- Standardmethode zum Lösen des MILP ist ein Branch&Bound-Verfahren. . .

Primal- und Masterprogramme · Branch&Bound



Nur ein Masterprogramm

- **Implementierungsaspekte**

  Primal- und Masterprogramme

  - **Nur ein Masterprogramm**

Nur ein Masterprogramm · Idee

- Idee: Verschmelzen von Outer Approximation und Branch&Bound-Verfahren
- Dazu löst man (nur) das anfängliche Masterprogramm mittels Branch&Bound
- Stößt man dabei auf einen ganzzahlig-zulässigen y-Vektor, so wird das zugehörige Primal- bzw. Unzulässigkeitsprogramm gelöst
- Um dessen Lösung wird wie gewohnt linearisiert und die neuen Nebenbedingungen zu allen noch offenen Branch&Bound-Teilproblemen hinzugefügt

Nur ein Masterprogramm · Vor- und Nachteile

- Vorteil: Es wird also nur noch ein Masterprogramm (direkt) gelöst!
- Das Lösen der anderen Masterprogramme geschieht implizit während des Branch&Bound-Verfahrens
- Nachteil: Primalprogramme werden an ggf. suboptimalen y-Vektoren gelöst
- Dadurch evtl. mehr Iterationen und mehr linearisierte Nebenbedingungen
- Abhilfe: Branch&Cut-Verfahren mittels Gomory-Cuts

Nur ein Masterprogramm · GOA-BBMASTER

- Neue implizite Masterprogramme:

$$
\text{GOA-BBMASTER}^i \left\{
\begin{array}{lll}
\min\limits_{x,y,\eta} & \eta & \\
 & \eta < UBD & \\
 & \eta \geq f(x^j,y^j) + \nabla f(x^j,y^j)^T \begin{pmatrix} x - x^j \\ y - y^j \end{pmatrix} & \forall\, j \in \hat{F}^i \\
 & 0 \geq g(x^j,y^j) + \nabla g(x^j,y^j)^T \begin{pmatrix} x - x^j \\ y - y^j \end{pmatrix} & \forall\, j \in \hat{F}^i \\
 & 0 \geq g(x^k,y^k) + \nabla g(x^k,y^k)^T \begin{pmatrix} x - x^k \\ y - y^k \end{pmatrix} & \forall\, k \in \overline{\hat{F}^i} \\
 & \Gamma_1 x + \Gamma_2 y \leq \xi & \\
 & x \in X,\ y \in Y \cap FIX^i,\ \eta \in \mathbb{R} &
\end{array}
\right.
$$

Nur ein Masterprogramm · Algorithmus

1. Wähle $y^0 \in \{0,1\}^p$ und setze $\hat{F}^0 := \overline{\hat{F}^0} := \emptyset$, $i := 1$.
2. Aufstellen des Start-Masterprogramms:
   (a) Falls $\text{GOA-NLP}(y^0)$ zulässig mit Optimum x^0: $\hat{F}^0 := \{0\}$ und $UBD := f(x^0, y^0)$.
   (b) Falls $\text{GOA-NLP}(y^0)$ unzulässig:
      - Löse $\text{GOA-FEAS}(y^0)$ und erhalte Optimum x^0.
      - $\overline{\hat{F}^0} := \{0\}$ und $UBD := \infty$.

   (e) Linearisiere f und g um (x^0, y^0) und erhalte GOA-BBMASTER^0.
   (d) Initialisiere Teilproblemliste mit GOA-BBMASTER^0.
3. Setze $i := i + 1$ und teste ob Teilproblemliste leer ist?
   (a) Ja: STOPP! Falls $UBD < \infty$, so ist (x^*, y^*) Optimallösung des GOA-MINLP, ansonsten ist es unzulässig.

Nur ein Masterprogramm · Algorithmus

(b) Nein: Entferne ein Teilproblem aus der Liste und bearbeite es in Schritt 4 als Teilproblem i.

4. Löse LP-Relaxierung von $\mathrm{GOA\text{-}BBMASTER}^i$ und erhalte $(\hat{x}, \hat{y}, \hat{\eta})$.

   (a) Falls $\hat{y} \in \{0,1\}^p$:
   - Setze $y^i := \hat{y}$ und löse $\mathrm{GOA\text{-}NLP}(y^i)$ bzw. $\mathrm{GOA\text{-}FEAS}(y^i)$ und erhalte Optimallösung x^i.
   - Linearisiere f und g um (x^i, y^i) und setze $\hat{F}^i := \hat{F}^{i-1} \cup \{i\}$ bzw. $\overline{\hat{F}^i} := \overline{\hat{F}^{i-1}} \cup \{i\}$.
   - Füge $\mathrm{GOA\text{-}BBMASTER}^i$ wieder in die Teilproblemliste ein.
   - Falls $\mathrm{GOA\text{-}NLP}(y^i)$ zulässig war mit $f(x^i, y^i) < UBD$: Setze $(x^*, y^*) := (x^i, y^i)$ und $UBD := f(x^i, y^i)$ und lösche alle Teilprobleme mit $\hat{\eta} > UBD$ aus der Liste.
   - Gehe zu Schritt 3.

Nur ein Masterprogramm · Algorithmus

(b) Falls $\hat{y} \notin \{0,1\}^p$:

- Verzweige an einer gebrochenen 0-1-Variable, füge zwei neue Teilprobleme in die Liste ein und gehe zu Schritt 3.

  oder

- Füge Gomory Cuts zu $\mathrm{GOA\text{-}BBMASTER}^i$ hinzu und gehe zu Schritt 4.

- Branch-vs.-Cut-Entscheidung mittels Heuristiken

Zusammenfassung

Outer Approximation

- Manche Optimierungsprobleme erfordern ganzzahlige Modellierung
- Outer Approximation findet garantiert die optimale Lösung von Problemen mit
  - konvexer Zielfunktion und
  - konvexen Ungleichungsnebenbedingungen
- Es gibt Verallgemeinerungen für Gleichungsnebenbedingungen und nichtkonvexe Zielfunktionen, die aber keine Konvergenz zum globalen Optimum garantieren können

Lösungsstrategien

- Outer Approximation erfordert das Lösen von NLPs und MILPs
- Zwar ist Konvergenz nach endlich vielen Schritten garantiert, die Laufzeiten können für große Probleme aber extrem lang werden
- Eine Möglichkeit zur Beschleunigung besteht im Verschmelzen von Outer Approximation und Branch&Bound-Verfahren
- Das Einführen von Gomory-Cuts kann die Laufzeit weiter verringern

Literatur

Teil 1

[1] AKROTIRIANAKIS, I.; MAROS, I.; RUSTEM, BERÇ.: *An Outer Approximation based Branch and Cut Algorithm for convex 0-1 MINLP problems*. Technical Report 2000-06, Imperial College of Science, Technology and Medicine, London (2000)

[2] DURAN, M. A.; GROSSMANN, I. E.: *An outer approximation algorithm for a class of minlp problems*. Mathematical Programming, Vol. 36, S. 307-339 (1986)

[3] FLETCHER, R.; LEYFFER, S.: *Solving mixed integer nonlinear programs by outer approximation*. Mathematical Programming, Vol. 66, S. 327-349 (1994)

[4] FLOUDAS, C. A.: *Nonlinear and Mixed-Integer Optimization*. Oxford University Press, Oxford (1995)

[5] GOMORY, R. E.: *Outline of an algorithm for integer solutions to linear programs*. Bulletin of the American Mathematical Society, Vol. 64, S. 275-278 (1958)

[6] QUESSADA, I.; GROSSMANN, I. E.: *An lp/nlp based branch and bound algorithm for convex minlp optimization problems*. Computers and Chemical Engineering, Vol. 16, S. 937-947 (1992)

Hinweis

- Das Handout und die Präsentationsfolien stehen unter

  `www.mathi.uni-heidelberg.de`
  `/~ferreau/globalOpt/`

  zum Download bereit.

Fragen

Fragen?