Kombinatorische Optimierung

Lösung sehr großer praktischer Probleme

Viele Nichtmathematiker werden kaum glauben, daß Mathematiker nur selten "rechnen". Die meisten Mathematiker beschäftigen sich wie schon seit Jahrhunderten überwiegend mit der Untersuchung mathematischer Strukturen (z.B. Gruppen, Vektorräume, differenzierbare Mannigfaltigkeiten) und bestimmen Eigenschaften dieser Strukturen. In den letzten (etwa) 20 Jahren hat sich jedoch ein neuer Trend entwickelt. Es wird wieder mehr gerechnet, und zwar nicht nur in der Angewandten Mathematik, sondern auch in der sogenannten "Reinen Mathematik". Ein Grund dafür ist klar. Es gibt seit Anfang der 50er Jahre ein neues, sehr hilfreiches Werkzeug: den elektronischen Rechner. Was früher mit Rechenschieber, Logarithmentafel, Bleistift und Papier hunderte von Mannjahren an Rechenarbeit gebraucht hätte - mit großer Unsicherheit bezüglich der Korrektheit des Ergebnisses - kann heute in Bruchteilen von Sekunden zuverlässig und genau erledigt werden. Hinzu kommt, daß sich seit der Einführung der Computer die Rechenleistung alle 4 bis 5 Jahre verdoppelt hat - und das bei gleichzeitiger Preisreduzierung.

Der Nichtfachmann mag glauben, daß sich hier bald ein Ende abzeichnen müsse. Dieses ist aber derzeit nicht in Sicht. Er mag auch glauben - wie die Erbauer der ersten Computer -, daß bald kaum mehr Bedarf für derartig hohe Rechnerleistungen bestehen werde. Aber auch hier scheint der Appetit auf mehr Leistung immer größer zu werden. Dies hat nichts mit Gigantomanie zu tun. Der Grund ist, daß mit der Einführung einer neuen Computergeneration plötzlich Probleme lösbar werden, die man vorher aufgrund des erforderlichen Rechenaufwandes als hoffnungslos schwierig eingestuft hatte. Beispiele hierfür sind etwa die Computergraphik und Computerfilme, die immense Rechenleistung benötigen.

Das Aufkommen von Computern hat innerhalb der Mathematik zum Entstehen neuer bzw. Aufblühen alter Gebiete geführt. Ein Beispiel hierfür ist die Optimierung, über die ich in diesem Artikel berichten möchte. Zwar beschäftigt man sich schon seit Jahrtausenden mit Optimierungsfragen (wer erinnert sich nicht an Kurvendiskussionen in der Schule mit der Bestimmung von Minima und Maxima), aber praxisrelevante Probleme konnten früher so gut wie nicht gelöst werden. Erst jetzt ist man in der Lage, interessante Optimierungsfragen aus der Praxis mit Hoffnung auf Erfolg aufzugreifen.

Ein weiterer Faktor, der zu der rasanten Aufwärtsentwicklung der Optimierung geführt hat, sind Fragestellungen aus anderen Bereichen, die an die Mathematik herangetragen wurden, für die aber bisher keinerlei Theorie entwickelt worden war. Wichtige Anstöße gingen hier in den fünfziger und sechziger Jahren von den Wirtschaftswissenschaften aus. Sie haben etwa zur Entstehung des "Operations Research" beigetragen, eines Gebietes, das sich z. B. mit Planungsfragen und Ablaufproblemen beschäftigt. In neuerer Zeit kommen sehr viele Anregungen aus der Informatik und den Ingenieurwissenschaften. Auch hier treten vielfach Probleme auf, bei denen nicht auf bereits bestehende Mathematik zurückgegriffen werden kann. Für uns Mathematiker entstehen dadurch interessante neue Forschungsgebiete.

Anhand einiger Beispiele, die in den letzten Jahren am Lehrstuhl für Angewandte Mathematik II behandelt worden sind bzw. zur Zeit bearbeitet werden, möchte ich die oben gemachten Andeutungen konkretisieren und dem Nichtfachmann eine Vorstellung davon geben, womit sich "Optimierer" beschäftigen. Die Auswahl der Beispiele ist natürlich nicht repräsentativ. Sie spiegelt unsere Forschungsschwerpunkte wider. Sie deckt aber ein recht breites Anwendungsspektrum ab und hilft dabei vielleicht, etwas Verständnis für die Fragen, mit denen wir uns beschäftigen, zu wecken.

Das Ziel, das von uns verfolgt wird, kann man kurz so beschreiben. Wir wollen "sehr große", "schwierige" kombinatorische Optimierungsprobleme "effizient" lösen. Weder für "sehr groß", noch für "schwierieg, noch für "effizient" kann ich hier eine genaue Definition angeben. Es gibt eine eigene mathematische Theorie, die Komplexitätstheorie, die sich mit der Klassifikation von Problemen in leichte und schwierige beschäftigt und in der Effizienz exakt definiert wird. Die Bestimmung von "sehr groß" ist problemabhängig. Wir machen es uns hier einfach und sagen, daß Probleme sehr groß sind, wenn sie bisher niemand lösen konnte. Nun zu den Beispielen:

1. Ich möchte mit einem Problem beginnen, auf das uns Herr Kollege Opitz (WISO-Fakultät) "angesetzt" hat. An seinem Lehrstuhl beschäftigt man sich seit Jahren mit qualitativer Datenanalyse. Dabei tritt ein sogenanntes "Clustering-Problem" häufig auf, das man (ungefähr) wie folgt beschreiben kann. Gegeben ist eine Menge von Objekten (z. B. Arbeiter einer Firma; Staaten; Wale; Autotypen), und außerdem sind verschiedene Eigenschaften der Objekte bekannt (z. B. Ausbildungsstand der Arbeiter; Bündnisse der Staaten; Flossen und Größe der Wale; Reparaturanfälligkeit der Bremsen bei Autos). Gesucht ist eine Aufteilung der Objekte in Klassen, wobei jede Klasse aus "möglichst ähnlichen" Objekten bestehen soll. Das "möglichst ähnlich" kann man mathematisch genau präzisieren, so daß daraus ein Optimierungsproblem wird.

Die Anwendungen von Professor Opitz kamen aus der Analyse von Firmen und aus dem Marketing, und er war mit den vorhandenen Verfahren zur Lösung dieses "Clustering-Problems" nicht zufrieden. Bestenfalls konnten Optimallösungen mit etwa 70 Objekten gefunden werden, häufig versagten die Verfahren schon bei 40 Objekten.

Zusammen mit Dr. Yoshiko Wakabayashi (1986 in Augsburg promoviert, jetzt Sao Paulo, Brasilien) habe ich einen neuen theoretischen Ansatz entwickelt, der in ein neues Verfahren zur Lösung von Clustering-Problemen umgesetzt wurde. Mit diesem Algorithmus konnten wir Probleme mit bis zu 160 Objekten mühelos lösen. Interessant für uns war dabei die breite Anwendbarkeit dieses Modells. Wir konnten nicht nur wirtschaftswissenschaftliche Probleme behandeln, sondern auch neue Lösungsvorschläge für die Klassifikation von Walen und Wildkatzen erarbeiten und Politikwissenschaftler unterstützen, die die Außenpolitik von Staaten anhand des Abstimmungsverhaltens in den Vereinten Nationen untersuchten.

2. Von der Stiftung Volkswagenwerk wurde ein Projekt gefördert, das sich mit der Lösung eines Problems in der Physik beschäftigt. Dieses Projekt wurde gemeinsam von Dr. M. Jünger, Dr. G. Reinelt, Prof. F. Barahona (Santiago de Chile, jetzt Waterloo, Kanada) und mir bearbeitet. Unser Ziel war die Bestimmung von Grundzuständen von Spingläsern. Spingläser sind Materialien aus einer nichtmagnetischen Substanz, die magnetische Verunreinigungen enthält. Sie bilden eine wichtige Klasse von Studienobjekten der statistischen Physik, bei denen man sogenannte Ordnungs-Unordnungsphänomene studiert. (Wie (normales) Glas eine Sonderstellung zwischen den festen und flüssigen Materialien einnimmt, nehmen Spingläser eine Sonderstellung zwischen magnetischen und nichtmagnetischen Materialien ein.) Hier interessiert man sich insbesondere für die magnetischen Eigenschaften von Spingläsern nahe beim absoluten Nullpunkt.

Die Physiker wenden tausende von Rechenzeit-Stunden auf, um Approximationen des Grundzustandes (Zustand eines Spinglases beim absoluten Nullpunkt) zu berechnen. Mit den von uns entwickelten Verfahren kann dieser Grundzustand i. a. mit weniger Rechenzeit exakt bestimmt werden. Die bisher bekannten Verfahren zur exakten Lösung derartiger Aufgaben konnten Systeme mit höchstens 100 magnetischen Verunreinigungen und externem magnetischen Feld behandeln, während wir mit unserem Algorithmus Probleme mit 1600 Verunreinigungen in wenigen Minuten Rechenzeit optimal lösen konnten.

3. Beim Entwurf höchstintegrierter Schaltungen (VLSI-Design) treten eine Vielzahl interessanter Optimierungsaufgaben auf. Unsere oben angesprochnee Arbeit zur Bestimmung von Grundzuständen von Spingläsern lieferte uns die grundlegenden Ideen zur Lösung eines Problems bei der Chip-Konstruktion, das man in der Fachsprache "Via-Minimierung" (Erklärung später) nennt. Varianten dieses Problems treten auch bei Entwurf von Leiterplatten auf. (Die grünen flachen Platten mit dünnen Metallstreifen und kleinen Löchern in Fernsehern, Radios, Computern etc. sind Leiterplatten.) Man kann die Aufgabe - bezogen auf Leiterplatten - kurz wie folgt beschreiben.

Beim Entwurf von Leiterplatten wird zunächst festgelegt, welche Anschlüsse mit welchen anderen verbunden werden und wie die Verbindungsdrähte auf der Leiterplatte zu führen sind. Dann müssen Überkreuzungen von Drähten eliminiert werden (sonst entstehen Kurzschlüsse). Dies geschieht i.a. dadurch, daß man von zwei Drähten, die sich kreuzen, einen auf eine andere Lage der Leiterplatte verlegt. Technisch geschieht das dadurch, daß durch die Leiterplatte ein Loch gebohrt wird, damit einer der Drähte auf die andere Seite geführt werden kann. Das Löcherbohren (siehe auch Punkt 5) ist zeitaufwendig und erhöht das Risiko von Produktionsfehlern erheblich. Man möchte daher eine kreuzungsfreie Verdrahtung entwerfen, bei der möglichst wenige Löcher gebohrt werden müssen. (In der VLSI-Fachsprache wird ein Loch "Via" genannt, daher der Ausdruck "Via-Minimierung".)

Durch eine recht komplizierte Transformation kann man das obige Problem in ein Optimierungsproblem auf Graphen umwandeln. Die dabei entstehenden Graphen haben tausende von Knoten und Kanten. Trotz ihrer gewaltigen Größe kann man die hier auftretenden Probleme optimal lösen - allerdings sind dazu einige Stunden Rechenzeit auf Großrechnern nötig. Wir haben daher schnellere Algorithmen für die Praxis entworfen, die in wenigen Minuten Lösungen liefern, die beweisbar nur wenige Löcher mehr als die Optimallösung produzieren.

In Abbildung 1 ist ein kleines Beispiel für die oben beschriebene Aufgabe dargestellt. Es handelt sich um einen Ausschnitt eines Chips. Auf der rechten und linken Seite liegen die Anschlüsse zu den sogenannten "Zellen", der Streifen zwischen den Zellen, der in Abbildung 1 zu sehen ist, heißt "Kanal". In diesem Kanal wird "verdrahtet". Die schwarzen und weißen Linien stellen die Drähte dar. Die schwarzen Linien repräsentieren die Drähte, die auf der oberen Lage des Chips geführt werden, die weißen Linien repräsentieren die auf der unteren Lage geführten Drähte. Die kleinen schwarz berandeten Quadrate repräsentieren die Löcher (Vias). Hier werden die Drähte von einer auf die andere Lage geführt. Man erkennt das am Farbwechsel der durch die Vias unterbrochenen Linien.

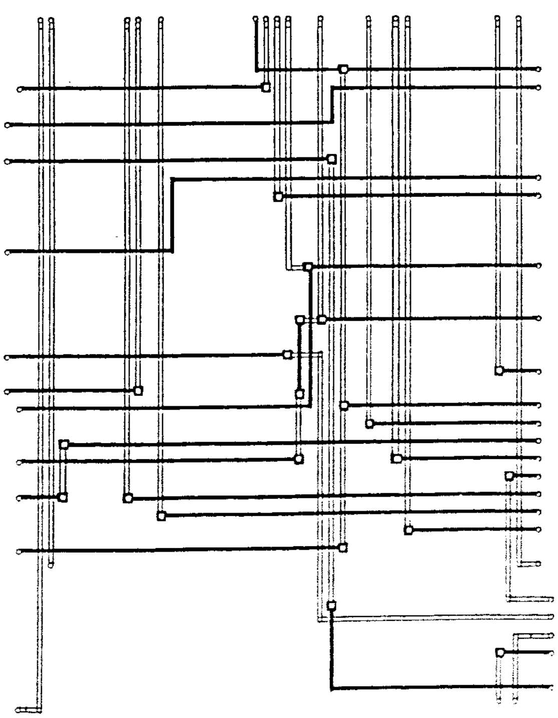

Abb. 1:
Graphische Darstellung einer Leiterplatte (Ausschnitt)

Das Beispiel aus Abbildung 1 entstammt einem Chip der Firma Siemens. Hier wird zur Zeit unser Verfahren in das Chip-Entwurfssystem VENUS eingebaut. Ebenso ist bei Siemens geplant, dieses Verfahren bei der Prozessorentwicklung zu benutzen, um herstellungsfreundlichere Leiterplatten zu erhalten.

4. Die Erfolge bei der Berechnung von Grundzuständen und bei der Via-Minimierung haben meine Mitarbeiter Dr. M. Jünger und Dr. G. Reinelt und Prof. F. Barahona (Waterloo, Kanada) dazu ermutigt, ein allgemeineres Verfahren zur Minimierung quadratischer Funktionen zu entwickeln, bei denen die Variablen nur die Werte 0 oder 1 annehmen können. Dies ist ein sehr allgemeines und sehr schwieriges Problem, das die in den Punkten 2 und 3 angesprochenen Probleme (und viele andere praxisrelevante Aufgaben) enthält. (Für Mathematiker: Ihr "Trick" besteht darin, die Aufgabe zu linearisieren - dadurch quadriert sich die Variablenzahl - und dann Schnittebenenverfahren einzusetzen.) Das Resultat ist ein erstaunlich guter Algorithmus, der weit größere Probleme lösen kann als alle übrigen derzeit bekannten Methoden.

5. Ich beschließe diese Übersicht mit dem Travelling-Salesman-Problem, der Aufgabe, durch eine vorgegebene Zahl von Städten eine Rundreise zu finden, die so kurz wie möglich ist. Über dieses Problem, mit dem ich mich schon mehr als 10 Jahre beschäftige, habe ich bereits in Uni-Press 3/83 einen Artikel mit vielen Anwendungsbeispielen geschrieben. Ich hatte damals folgende Aussage gemacht:

> "Zur Zeit wird eine neue Generation von Algorithmen (Verfahren) entwickelt, und wir hoffen, damit die Größenordnung der Lösbarkeit verdoppeln zu können. Dies wird jedoch noch einige Zeit dauern, und die Computerausstattung an der Universität Augsburg muß noch um einiges verbessert werden, was hoffentlich geschehen wird."

Die Computerausstattung der Universität Augsburg, davon später mehr, hat sich leider nicht verbessert. Aber die Vorhersage bezüglich der Größe von Problemen, die man lösen können wird, ist weit übertroffen worden. Das größte bis 1983 gelöste Problem hatte 318 Städte. Mit Dr. Olaf Holland (Universität Bonn) habe ich einen Algorithmus implementiert, mit dem wir Travelling-Salesman-Probleme (auf einem Großrechner der Universität Bonn) mit über 1000 Städten lösen können. In Abbildung 2 sehen Sie eine optimale Rundreise um die Welt, bei der 666 Städte besucht werden. Dies ist das größte bisher gelöste geographische Problem.

dem Problem zugrundeliegende Theorie und im Entwurf neuer Algorithmen.

Unbestreitbar ist jedoch, daß die Verfügbarkeit schneller Rechner ein wichtiger Stimulus ist, der dazu beiträgt, sich an solche Größenordnungen zu wagen.

3000 Städte (oder Löcher) sind und können nicht das Ende der Entwicklung bei der Lösung von Tra-

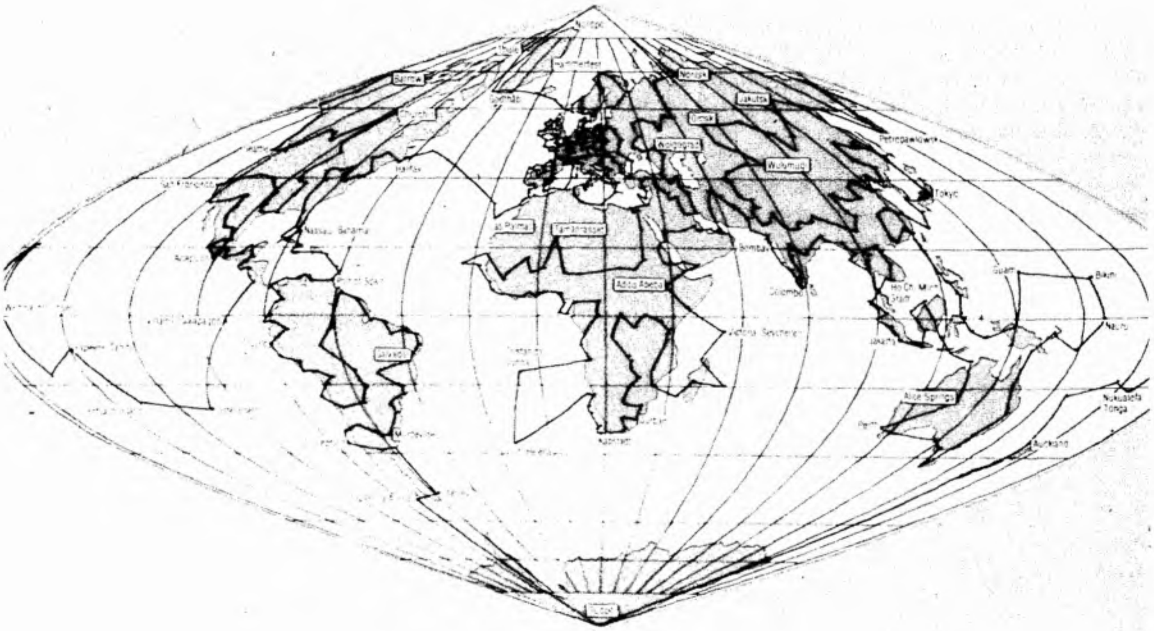

Abb. 2: Kürzeste Rundreise durch 666 Städte der Welt

velling-Salesman-Problemen sein. Beim Bohren von Leiterplatten, bei der Laserlogik, bei der Bestimmung der Struktur organischer Kristalle treten Travelling-Salesman-Probleme mit 100 000 Städten und mehr auf. Zum Beispiel sind in die Leiterplatten, die im Werk für Systeme der Firma Siemens in Augsburg für die Computer-Herstellung gefertigt werden, 1000 bis 60000 Löcher pro Leiterplatte zu bohren. Wir haben vor kurzem damit begonnen, darüber nachzudenken, wie man derartige Aufgaben in erträglichen Rechenzeiten auf kleinen Computern näherungsweise lösen kann. Das Ziel dabei ist, Lösungen zu produzieren, die beweisbar nur um wenige Prozent von der Länge der Optimallösung abweichen.

Eine wichtige Anwendung des Travelling-Salesman-Problems ist die Bestimmung der Reihenfolge bei der Bohrung der Löcher einer Leiterplatte (vgl. den Abschnitt über Via-Minimierung). Eine Optimallösung eines derartigen Problems mit 2392 Löchern haben im vergangenen Jahr Dr. G. Rinaldi (Rom) und Prof. M. Padberg (New York) auf einem Supercomputer in 20 Stunden Rechenzeit bestimmt. Dies sind Größenordnungen, von denen man vor zwei Jahren noch nicht zu träumen wagte. In der Tat werden hier lineare Programme mit rund 3 Millionen ganzzahligen Variablen und rund 10^{10000} Ungleichungen gelöst.

Die Fortschritte in diesem Bereich hängen nur zum Teil von der höheren Leistungsfähigkeit der Rechner ab. Wesentlich wichtiger - und dies gilt für alle hier geschilderten Probleme - sind die Fortschritte in der

Wenn man wie wir Forschung betreibt, die stark computerorientiert ist, und wenn man hier an der Spitze des Fortschritts bleiben will, so sind eine vernünftige Rechnerinfrastruktur und Zugang zu neuen Rechnertechnologien (Vektorrechner, Parallelrechner, Supercomputer, Rechnernetze) unbedingt notwendig. Bisher haben wir uns dies alles extern mit enormem Zeitaufwand beschaffen müssen. So sind z. B. die Programme zur Clusteranalyse (Punkt 1) im DFVLR-Rechenzentrum in Oberpfaffenhofen entwickelt worden. Die Rechenzeit wurde großzügigerweise kostenlos zur Verfügung gestellt. Datenfernverarbeitung war nicht möglich, so daß wöchentliche Autofahrten nach Oberpfaffenhofen nötig waren. Die Programme für das Spinglasprojekt wurden bei der KFA-Jülich implementiert. Als unser dortiger Kooperationspartner, Professor Kinzel, nach Gießen wechselte, wurde uns die Rechenerlaubnis entzogen. Die Universität Bonn sprang ein, wo auch die Travelling-Salesman-Algorithmen implementiert worden sind. Die Verfahren zur Minimierung quadratischer 0/1-Funktionen wurden von Dr. Jünger und Dr. Reinelt an der Cornell University, Ithaca, USA, entwickelt, wo eine ideale Rechnerkonfiguration gegeben ist. Dr. Jünger und Dr. Reinelt schätzen, daß sie für ihre Arbeiten in Augsburg mindestens die fünffache Entwicklungszeit benötigt hätten. Bei anderen Projekten ist es uns ähnlich ergangen.

Wir erwarten natürlich nicht, daß die Universität Augsburg Supercomputer anschafft. Wir erwarten aber schon, daß bei der kommenden Rechnerbeschaffung ein lokales Workstation-Prinzip realisiert wird, bei dem Projekte der oben beschriebenen Art zügig vorangetrieben werden können, daß die Universität Augsburg an die internationalen Datenkommunikationsnetze angeschlossen wird (ich schäme mich, meinen Kollegen sagen zu müssen, daß wir noch nicht einmal ein einigermaßen brauchbares Electronic-Mail-System haben), und daß wir einen garantierten Zugang zu einem Superrechner (wie er z.B. in München angeschafft wird) erhalten. Der Computerpreis-Verfall der letzten Jahre hat all dies realisierbar gemacht. Man muß nur beginnen, umzudenken und die Ressourcen wirtschaftlich einzusetzen.

Im Rahmen des von der DFG geförderten Forschungsschwerpunktes "Anwendungsbezogene Optimierung und Steuerung" haben wir einige neue Projekte in Angriff genommen, die wir zügig realisieren möchten. Die weltweite Konkurrenz ist groß und gute Arbeitsbedingungen spielen hier für den Erfolg eine wichtige Rolle. Beispiele für derartige Projekte sind:

- Entwicklung neuer Verfahren für die lineare Optimierung,
- neue Methoden der Routenplanung,
- kombinatorische Optimierungsprobleme bei der flexiblen Fertigung,
- optimale Auslegung von Fiberglasnetzwerken,
- Optimierungsprobleme beim VLSI-Design und Prozessor-Design,
- Produktionsplanung.

Diese Projekte werden in Zusammenarbeit mit Universitäten in den USA, Kanada, Italien und Frankreich und mit hiesigen Industriefirmen verfolgt. Insbesondere durch Industriekontakte erhoffen wir uns einen raschen Know-How-Transfer in beiden Richtungen, der den Firmen Vorteile bietet, zu einer besseren Ausbildung unserer Studenten und damit zu guten Arbeitsplatzchancen führt.

Ich habe so gut wie nichts über die Mathematik gesagt, die entwickelt und eingesetzt wurde, um die oben aufgelisteten Probleme aus der Praxis zu lösen. Dies ist in einem kurzen Artikel kaum möglich. Mein Ziel war hauptsächlich, ein wenig über das Anwendungsspektrum unserer Arbeit zu berichten und an Beispielen zu zeigen, womit sich (einige) Mathematiker heute beschäftigen. Martin Grötschel