Gutachten über die Dissertation:
Semidefinite Approaches to Ordering Problems
von Philipp Hungerländer

Ausgangslage und Zielsetzungen:
Die Verwendung von nichtlinearen Methoden zur Behandlung von NP-schweren kombinatorischen Optimierungsproblemen hat sich in den letzten Jahren als sehr erfolgreiche Ergänzung und Alternative zu rein polyedrischen (also linearen) Ansätzen erwiesen. Für eine Reihe von Problemen, bei denen der polyedrische Zugang zu schwache Resultate lieferte, konnten spezielle nichtlineare Modelle wesentlich genauere Approximationen liefern. Konkret führt die Verallgemeinerung von linearer Optimierung auf Optimierung über der Menge der semidefiniten Matrizen zu neuartigen Relaxierungen kombinatorischer Optimierungsprobleme.

Die vorliegende Dissertation widmet sich diesem Themenbereich und untersucht Ordnungsprobleme bezüglich linearer und semidefiniter Relaxationen. Ordnungsprobleme haben weitreichende Anwendungen und sind bisher hauptsächlich unter dem Gesichtspunkt linearer Relaxationen untersucht worden. In der vorliegenden Dissertation werden einerseits Relaxierungen von Ordnungsproblemen systematisch untersucht, weiters wird bei der Modellierung auch auf die praktische algorithmische Umsetzung hoher Wert gelegt. Schliesslich zeigen die numerischen Resultate, dass mittels semidefiniter Optimierung ein substantieller Fortschritt bei der Bestimmung optimaler Lösungen von Ordnungsproblemen zu erzielen ist.

Zum Inhalt:
Die Arbeit ist sehr umfangreich, und umfaßt 16 Kapitel, die in drei Teile zusammengefasst sind. Sie ist auf Englisch abgefaßt, um einen möglichst großen Leserkreis anzusprechen.

Der erste Teil ist einleitender Natur und gibt einen zusammenfassenden Überblick über theoretische Grundlagen semidefiniter Optimierungsprobleme, sowie eine Darstellung von Algorithmen zur Lösung derartiger Probleme.

Der zweite Teil, Theorie und Algorithmen, umfasst die Kapitel 4 bis 9 und stellt den theoretischen Kern der Arbeit dar. Die einfachste Variante von Ordnungsproblemen, das 'linear ordering problem', sucht nach Anordnungen von n Objekten, wobei sich die Kostenfunktion in folgender Weise ergibt. Für eine gegebene Matrix $D = (d_{i,j})$ entsteht ein Profit $d_{i,j}$ sofern das Objekt i vor dem Objekt j angeordnet ist. Der Gesamtprofit ist somit

$$\sum_{i<j} d_{\phi(i),\phi(j)},$$

welcher über der Menge der Permutationen ϕ zu optimieren ist. In Kapitel 4 werden dazu lineare Relaxationen, die schon in den 1980er Jahren untersucht wurden, neuen semidefiniten Relaxationen gegenübergestellt. Es wird auch untersucht, wie man die Grundrelaxation durch Hinzufügen von kombinatorisch motivierten linearen Nebenbedingungen verschärfen kann. Beim 'linear arrangement problem' handelt es sich um ein Anordnungsproblem mit speziell strukturierter quadratischer Zielfunktion. Lineare Ansätze sind daher in der Modellierung sehr aufwändig, während sich die semidefiniten Relaxationen direkt übertragen lassen. Ein weiteres spezielles Anordnungsproblem wird in Kapitel 6 modelliert. Das 'single row facility layout problem' wurde wurde erstmals von Anjos und Vanelli 2005 durch semidefinite Relaxationen approximiert. Im Kapitel 6 wird dieser Ansatz im allgemeinen Kontext von Anordnungsproblemen analysiert, und durch Aufnahme von zusätzlichen linearen Nebenbedingungen noch verschärft. Im Kapitel 7 wird dann schliesslich das quadratische Anordnungsproblem in allgemeiner Form untersucht. Dies bildet das theoretische Grundgerüst für alle untersuchten Relaxationen. Es wird dabei eine Hierarchie von Relaxationen vorgeschlagen, die das ursprüngliche Problem immer genauer approximieren, aber dafür immer aufwändiger zum Lösen werden.

Der theoretische Teil wird durch zwei Anwendungsbeispiele von Anordnungsproblemen aus dem Bereich 'graph drawing' abgeschlossen. Hier ist bereits die Modellierung eines 'guten' Graphenlayouts eine nichttriviale Fragestellung. Es stellt sich heraus, dass quadratische Anordnungsprobleme ein sehr nützliches Hilfsmittel bei der Erstellung von Graphenlayouts mit möglichst wenigen Kantenüberschneidungen sind.

Die dargebotenen Relaxationen können auch verwendet werden, um Lösungen des ursprünglichen ganzzahligen Optimierungsproblems zu ermitteln. Dabei ist es aber nicht ausreichend, einfach die entsprechenden Ordnungsvariablen y_{ij} auf $+1$ oder -1 zu runden, weil dadurch noch nicht sichergestellt ist, dass tatsächlich eine lineare Anordnung dadurch beschrieben wird. Dies wird gewährleistet, falls die gerundete Lösung einen azyklischen Graphen darstellt, und kann durch nachträgliches gezieltes Ändern geeigneter Variablen herbeigeführt werden.

Der letzte Teil der Arbeit bietet praktische Anwendungen und Vergleiche der neu vorgestellten Relaxationen mit bisher bekannten, und in der Literatur verwendeten Ansätze. Im einfachsten Fall linearer Anordnungsprobleme zeigt sich die Effizienz von semidefiniten Relaxationen bereits beim Studium des zugrundeliegenden Polytops in kleiner Dimension, welche im Fall $n = 6$ bereits exakt ist. Im Fall $n = 7$ werden alle Klassen von Facetten bis auf eine einzige Klasse korrekt identifiziert.

Eine Gegenüberstellung von linearen und semidefiniten Relaxationen an einem Standardset von Testdaten zeigt, dass die neuen Relaxationen eine substantielle Verringerung des Intervalls, gebildet aus bester bekannter Lösung und bester Schranke, im Vergleich zu den bisherigen linearen Relaxationen darstellen. Ein ähnliches Bild zeigt sich bei den rechnerischen Vergleichen für das 'linear arrangement problem' und das 'single row facility layout problem'. In beiden Fällen stellen die neu vorgestellten Relaxationen eine erhebliche Verbesserung der Approximationen dar und bieten eine gute Ausgangslage zur exakten Lösung mittels 'Branch-and-Bound'.

Ein explizites Lösen der vorgeschlagenen Relaxationen mit Standardsoftware ist aus mehreren Gründen nicht möglich. Einerseits ist der zugrundeliegende

Matrixraum bei Ordnungsproblemen mit n Objekten bereits von der Dimension $\binom{n}{2}$, andererseits gilt es, $O(n^6)$ Ungleichungsnebenbedingungen und $O(n^3)$ lineare Gleichungen zu berücksichtigen. Um hier algorithmisch überhaupt weiterzukommen, werden die einzuhaltenden Nebenbedingungen in zwei Gruppen eingeteilt. Die Bedingungen der ersten Gruppe (Gleichungen) werden explizit eingehalten, die verbleibenden Ungleichungsbedingungen werden dualisiert, und die optimale Wahl der zugehörigen Dualvariablen erfolgt mittels Methoden der nichtglatten Optimierung.

Bewertung:
Die Arbeit basiert auf umfangreichen Kenntnissen einerseits im Bereich der kombinatorischen Optimierung, sowie dem Bereich konvexe Optimierung und wissenschaftliches Rechnen. Insbesondere wurden in eleganter Weise Algorithmen aus der nichtglatten Optimierung kombiniert mit Inneren-Punkte Methoden zur Lösung semidefiniter Optimierungsaufgaben. Es werden sowohl theoretische neue Erkenntnisse (Analyse verschiedener Relaxationen, Vergleich auf Dominanz), als auch sehr konkrete algorithmische Ideen (in Form von Software) dargeboten. Die Durchführung und algorithmische Umsetzung zeigt die weitreichenden Kenntnisse des Autors. Ein Grossteil der Dissertation wurde bereits in renommierten wissenschaftlichen Zeitschriften in mehreren Aufsätzen publiziert, und auch bei wissenschaftlichen Kolloquien und Tagungen vorgetragen. Teile der Arbeit wurden auch in hochkompetitiven Informatiktagungen eingereicht und akzeptiert.

Die Arbeit erfüllt somit in sehr hohem Maß alle Anforderungen an die Verleihung des Doktorgrades und wird mit der Note **'sehr gut (1)'** beurteilt.

Franz Rendl

Klagenfurt, 6. Feber 2012

Univ.-Prof. Dr. Franz Rendl