

Globális optimalizálási módszerek továbbfejlesztése, tesztelése és alkalmazása atomklaszter feladatokra

doktori értekezés tézisei

Vinkó Tamás

Témavezető: Dr. Csendes Tibor

Szegedi Tudományegyetem

Szeged, 2006

1. Bevezetés

A vizsgált feladatok általános alakjai. *Feltétel nélküli globális optimalizálási feladaton* a

$$\min_{x \in S} f(x) \quad (1)$$

alakú feladatot értjük, ahol az $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ függvényt *célfüggvénynek*, az $S \subseteq \mathbb{R}^n$ tartományt pedig a *keresési tartománynak* nevezzük.

Korlátozó feltételekkel megadott globális optimalizálási feladaton a

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) \\ \text{úgy, hogy} \quad & g_i(x) \leq 0 \quad (i = 1, \dots, l) \\ & x \in S \end{aligned} \quad (2)$$

alakú feladatot értjük, ahol minden $i \in \{1, \dots, l\}$ indexre $g_i : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ (*korlátozó feltétel*).

Feltétel kielégítési feladatról akkor beszélünk, ha az (2) alakú feladatban nincs célfüggvényünk, csak korlátozó feltételek egy rendszere.

Az (2) és a feltétel kielégítési feladatban a feltételeket kielégítő pontok halmazát *lehetséges megoldásoknak* (vagy *fízibilisnek*) nevezzük. Azon pontokat pedig, amelyek nem teljesítik a megadott feltételeket *nem lehetséges megoldásoknak* nevezzük. Azt mondjuk, hogy egy probléma *nem kielégíthető*, (vagy *infízibilis*) ha a feltételrendszere olyan, hogy nincs hozzá lehetséges megoldás.

Az értekezés eredményei a teljes globális optimalizálás témaköréhez tartoznak. A *teljes* módszerek pontos aritmetikát feltételezve megjósolható időkorlátokon belül garantáltan megtalálják a globális optimumot (valamilyen toleranciával). Itt a megjósolhatóság azt jelenti, hogy van valamilyen információnk a problémával kapcsolatban (például Lipschitz konstans vagy más globális jellegű információ), amivel a konvergencia sebességét becsülhetjük. Ennek az osztálynak egy része a *szigorúan megbízható* (rigorous) módszerek osztálya, amelyek olyan teljes módszerek, amelyek még kerekítési hibák megléte esetén is garantáltan megtalálják a globális optimumot (valamilyen toleranciával). Ide tartoznak (például) az intervallum aritmetikán alapuló korlátozás és szétválasztás típusú módszerek.

2. Az intervallumos globális optimalizálási módszerek gyorsítása

Ebben a fejezetben a valós számokat kisbetűvel, az intervallumokat pedig nagybetűvel jelöljük.

Intervallum-aritmetika. Az X intervallumot az alsó és felső korlátja között lévő pontok (nem üres) halmazával definiáljuk: $X = [\underline{X}, \overline{X}] = \{x \in \mathbb{R} \mid \underline{X} \leq x \leq \overline{X}\}$, tehát azt mondjuk, hogy egy $x \in \mathbb{R}$ benne van az X intervallumban, azaz $x \in X$ akkor és csak akkor, ha $\underline{X} \leq x \leq \overline{X}$. Itt \underline{X} jelöli az *alsó végpontot*, \overline{X} pedig a *felső végpontot*. Az n dimenziós *intervallum vektor* esetén $X = (X_1, \dots, X_n)^T$ jelöli az $X_k = [\underline{X}_k, \overline{X}_k]$

($k = 1, \dots, n$) komponenseket. Az értekezésben mindvégig az intervallum szót fogjuk használni, abban az esetben is, ha többdimenziós esetet tárgyalunk.

Az összes n dimenziós intervallumot tartalmazó halmazt \mathbb{I}^n jelöli. Amennyiben $D \subseteq \mathbb{R}^n$ egy halmaz, akkor $\mathbb{I}(D)$ jelöli az összes olyan X intervallum halmazát, amelyre $X \subseteq D$. Az $X \in \mathbb{I}$ szélessége a $\text{wid}(X) = \overline{X} - \underline{X} \geq 0$, az $X \in \mathbb{I}^n$ szélessége a $\text{wid}(X) = \max_{i=1, \dots, n} \text{wid}(X_i)$ szerint definiált.

Műveletek intervallumokkal. A valós számokon értelmezett *elemi műveletek intervallumos kiterjesztése* az $X \circ Y := \{x \circ y \mid x \in X, y \in Y\} \in \mathbb{I}$, ahol $\circ \in \{+, -, \cdot, /\}$ definíció alapján történik. Az alpműveletek folytonossága miatt a műveletek könnyen számíthatók.

Intervallumos befoglaló függvények. Azt mondjuk, hogy az $F : \mathbb{I}^n(X) \rightarrow \mathbb{I}$ az $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ egy *intervallumos befoglaló függvénye* az X intervallumon, ha $x \in Y$ esetén $f(x) \in F(Y)$ teljesül minden $Y \in \mathbb{I}^n(X)$ intervallumra.

Az f függvény *értékkészletét* az Y intervallumon $f(Y)$, továbbá $\underline{f}(X)$ az értékkészlet alsó korlátját, valamint $\underline{F}(X)$ és $\overline{F}(X)$ az intervallumos befoglalás alsó- és felső korlátját jelöli.

A továbbiakban f' az f függvény deriváltját (többváltozós esetben a gradiens vektort), F' pedig az f' egy intervallumos befoglalását jelöli.

Az intervallumos befoglaló függvények néhány tulajdonsága. Azt mondjuk, hogy az f függvény egy F befoglalása *izoton* (vagy *befoglalásra nézve monoton*) tulajdonságú X felett, ha minden $Y \subseteq Z$ ($Y, Z \in \mathbb{I}^n(X)$) esetén $F(Y) \subseteq F(Z)$ teljesül.

Azt mondjuk, hogy az F befoglaló függvény *α -konvergens* az X intervallum felett, ha minden $Y \in \mathbb{I}(X)$ intervallumra $\text{wid}(F(Y)) - \text{wid}(f(Y)) \leq k(\text{wid}(Y))^\alpha$ teljesül, ahol α és k pozitív konstansok.

Az $F : \mathbb{I}^n \rightarrow \mathbb{I}$ függvényt *Lipschitz-folytonosnak* nevezzük az $X \in \mathbb{I}^n$ intervallumon, ha létezik olyan $k \in \mathbb{R}$, hogy $\text{wid}(F(Y)) \leq k \text{wid}(Y)$ teljesül minden $Y \subseteq X$ intervallumra.

Középponti formulák

Az egyszerűbb jelölés kedvéért az aktuálisan vizsgált egydimenziós Y intervallum végpontjait a és b jelöli, tehát $Y = [a, b]$, valamint a gradiens (vektor) elemeit $[\ell_i, u_i]$ $i = 1, \dots, n$, és egydimenziós esetben az alsó indexeket elhagyjuk.

A továbbiakban feltesszük, hogy minden $i = 1, \dots, n$ indexre $\ell_i < 0 < u_i$ teljesül. Ha valamely i -re $u_i \leq 0$ vagy $\ell_i \geq 0$, akkor f monoton, tehát az értékkészlet egyszerűen számítható.

Először az egydimenziós esettel foglalkozunk.

Optimális középponti formula. A középponti formula az

$$f(x) \in F_{CF}(Y, c) := f(c) + F'(Y)(Y - c)$$

képlettel definiált. Itt a c kifejtési pont BAUMANN cikke alapján választható optimálisan, hogy a befoglalás alsó korlátja az így elérhető legjobb legyen.

Lineáris határvonal formula. NEUMAIER ötlete alapján az értekezés 4. Tételében a *lineáris határvonal formula* (továbbiakban lbvf) alsó korlátját a

$$\underline{F}_{LBVF}(Y) = y_s = \frac{uf(a) - \ell f(b)}{u - \ell} + (b - a) \frac{\ell u}{u - \ell}$$

képlettel definiáltuk.

Kite befoglaló függvény – egydimenziós eset

A VINKÓ, LAGOUANELLE & CSENDES [3] cikk eredményei alapján megállapítható, hogy a fenti két módszer szimultán használata nem rosszabb (és általában határozottan jobb) eredményt ad a célfüggvény befoglalására. Ezért definiáljuk az $\underline{F}_K(Y, c) := \min\{y_r(c), y_t(c)\}$ függvényt, ahol

$$y_r(c) := \frac{uf(a) - \ell f(c) + \ell u(c - a)}{u - \ell}, \quad y_t(c) := \frac{uf(c) - \ell f(b) + \ell u(b - c)}{u - \ell}.$$

Az $\underline{F}_K(Y, c)$ értéket a *kite befoglalás alsó korlátjának* nevezzük.

Hasonlóan definiálható az $\overline{F}_K(Y, c')$ felső korlát is, melyet itt nem részletezünk, az értekezésben megtalálható.

5. Tétel. [3] *A $\max\{\underline{F}_{LBVF}(Y), \underline{F}_{CF}(Y, c)\} \leq \underline{F}_K(Y, c) \leq \underline{f}(Y)$ egyenlőtlenségek teljesülnek.*

Optimális kifejtési pont. Azt vizsgáljuk meg, hogy van-e lehetőség a kite kifejtési pontjának optimális megválasztására. Ez a c^* pont tehát olyan, hogy

$$\underline{F}_K(Y, c^*) = \max_{c \in [a, b]} \underline{F}_K(Y, c) = \max_{c \in [a, b]} \min\{y_r(c), y_t(c)\}. \quad (3)$$

A következő tételben a kite optimális középpontjára vonatkozó megállapításainkat mondjuk ki.

6. Tétel. [3] *Létezik egy egyértelmű $c^* \in [a, b]$ pont, amelyre $y_r(c^*) = y_t(c^*)$ teljesül, és c^* egy maximumhelye a $\underline{F}_K(Y, c)$ függvénynek a c -re vonatkozóan.*

A kite befoglalás tulajdonságai. A 7. Tételben megmutattuk, hogy ha F' befoglalás izoton, akkor $F(Y) = [\underline{F}_K(Y, c^*), \overline{F}_K(Y, c')]$ minden $Y \in \mathbb{I}(X)$ intervallumra is befoglalás izoton. A 8. Tétel állítása szerint pedig a kite befoglalás kvadratikusan konvergens. További fontos tulajdonság a metszés, amelyet az alábbi tételben mondunk ki.

9. Tétel. [3] *Legyen $Y = [a, b] \subseteq X$ az aktuálisan vizsgált intervallum, $c^* \in [a, b]$ egy maximumhelye az $\underline{F}_K(Y, \cdot)$ függvénynek, továbbá \tilde{f} egy garantált felső korlát az f globális minimumára. Definiáljuk a következő értékeket:*

$$\begin{aligned} p &= a + \frac{\tilde{f} - f(a)}{\ell}, & q &= c^* + \frac{\tilde{f} - f(c^*)}{u}, \\ r &= c^* + \frac{\tilde{f} - f(c^*)}{\ell}, & s &= b + \frac{\tilde{f} - f(b)}{u}. \end{aligned}$$

Ha $\ell < 0 < u$, akkor a kite algoritmusban használhatjuk a következő kivágási technikákat:

- (a) Ha $\tilde{f} < \min\{f(a), f(b), f(c^*)\}$, akkor $[p, q] \cup [r, s]$ tartalmazza az összes Y -ban lévő globális minimumpontot.
- (b) Ha $f(b) \leq \tilde{f} < \min\{f(a), f(c^*)\}$, akkor $[p, q] \cup [r, b]$ tartalmazza az összes Y -ban lévő globális minimumpontot.
- (c) Ha $f(a) \leq \tilde{f} < \min\{f(b), f(c^*)\}$, akkor $[a, q] \cup [r, s]$ tartalmazza az összes Y -ban lévő globális minimumpontot.
- (d) Ha $f(c^*) \leq \tilde{f} < \min\{f(a), f(b)\}$, akkor $[p, s]$ tartalmazza az összes Y -ban lévő globális minimumpontot.
- (e) Ha $\max\{f(b), f(c^*)\} \leq \tilde{f} < f(a)$, akkor $[p, b]$ tartalmazza az összes Y -ban lévő globális minimumpontot.
- (f) Ha $\max\{f(a), f(c^*)\} \leq \tilde{f} < f(b)$, akkor $[a, s]$ tartalmazza az összes Y -ban lévő globális minimumpontot.
- (g) Ha $\max\{f(a), f(b)\} \leq \tilde{f} < f(c^*)$, akkor $[a, q] \cup [r, b]$ tartalmazza az összes Y -ban lévő globális minimumpontot.

Numerikus eredmények. Az értekezés 2.4.5. szakaszában a fenti elméleti eredmények numerikus igazolását mutatjuk be. Összesen 40 darab egyváltozós standard tesztfüggvényt vizsgáltunk meg. Kétféle változatot készítettünk, az egyik csak az első deriváltat használja fel, a másik pedig a második derivált befoglalását is egy intervallumos Newton lépés elvégzéséhez. Kimutattuk, hogy az alap algoritmushoz képest mindkét esetben kevesebb műveletigény szükségeltetett a feladatok megoldásához. Elvégeztünk továbbá egy összehasonlítást is két nemrégiben közölt hasonló módszerrel is, ahol kimutattuk, hogy a kite módszer nem teljesít rosszabbul ezeknél.

Kite befoglaló függvény – többdimenziós eset

Jelen szakasz az imént bemutatott kite befoglaló függvény egy lehetséges magasabb dimenziós kiterjesztését tárgyalja a VINKÓ & RATZ [5] cikk alapján.

A fejezet hátralevő részében az $f'(y)$ gradiensvektor egy befoglalását $F'(Y)$ jelzi, míg ezen vektor i -edik komponensére az $F'_i(Y) = [\ell_i, u_i]$ jelölést használjuk a könnyebb olvashatóság kedvéért. Feltesszük továbbá, hogy minden $i = 1, \dots, n$ indexre $\ell_i u_i < 0$ teljesül.

A kite befoglalás komponensenkénti kiterjesztése. Legyen adott az $f : D \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ függvény és az $Y = Y_1 \times \dots \times Y_n \subseteq D$ intervallum. Definiáljuk a $g_i : Y_i \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{I}$ ($i \in \{1, \dots, n\}$) függvényt úgy, hogy $g_i(w) := f(Y_1, \dots, Y_{i-1}, w, Y_{i+1}, \dots, Y_n)$, $w \in Y_i$. Az egydimenziós intervallumos függvények ilyen használatával az egydimenziós kite befoglalást is használhatjuk. Ha adottak a $V \supseteq g_i(\underline{Y}_i)$, $W \supseteq g_i(\overline{Y}_i)$ és $Z \supseteq g_i(c_i)$ ($c_i \in Y_i$) befoglalások, akkor a *komponensenkénti kite befoglalás* konstruálható a *komponensenkénti középponti forma*:

$$\underline{F}_{CF}(Y, c, i) = \underline{Z} + F'_i(Y)(Y_i - c_i), \quad (c_i \in Y_i),$$

és a komponensenkénti lbf:

$$\underline{F}_{LBVF}(Y, i) = \frac{u_i \underline{V} - \ell_i \underline{W}}{u_i - \ell_i} + (\bar{Y}_i - \underline{Y}_i) \frac{\ell_i u_i}{u_i - \ell_i}$$

együttes használatával. Ez a következő eredményre vezet.

10. Tétel. [5] Legyen $\underline{F}_K(Y, c, i) = \min\{y_r(c, i), y_t(c, i)\}$, ahol $c \in Y$, valamint

$$y_r(c, i) = \frac{u_i \underline{V} - \ell_i \underline{Z} + u_i \ell_i (c_i - \underline{Y}_i)}{u_i - \ell_i}, \quad y_t(c, i) = \frac{u_i \underline{Z} - \ell_i \underline{W} + u_i \ell_i (\bar{Y}_i - c_i)}{u_i - \ell_i},$$

ahol $Z \supseteq g_i(c_i)$, $V \supseteq g_i(\underline{Y}_i)$ és $W \supseteq g_i(\bar{Y}_i)$, és $i = 1, \dots, n$. Akkor minden $i = 1, \dots, n$ -re $\max\{\underline{F}_{LBVF}(Y, i), \underline{F}_{CF}(Y, c, i)\} \leq \underline{F}_K(Y, c, i) \leq \underline{f}(Y)$.

Csakúgy, mint az egydimenziós esetben, a c paraméter a fenti egyenlőtlenségben itt is választható optimálisan. Keressük tehát azt a c^* pontot, amelyre

$$\underline{F}_K(Y, c^*, i) = \max_{c \in Y} \underline{F}_K(Y, c, i) = \max_{c \in Y} \min\{y_R(c, i), y_T(c, i)\}. \quad (4)$$

Az optimális c^* meghatározásához minden koordináta irányra használhatjuk a 6. Tételt.

11. Tétel. [5] Minden $i = 1, \dots, n$ -re létezik egyértelmű $c^* \in Y$, amelyre $y_R(c^*, i) = y_T(c^*, i)$ teljesül, és c^* egy maximumhelye a $\underline{F}_K(Y, c, i)$ függvénynek.

Az itt bemutatott módszer használata a magas műveletigénye miatt önmagában nem javasolt globális optimalizáló módszerekben. Ez az oka annak, amiért a módszert inkább egy gyorsító technika kidolgozására és megvalósítására használjuk.

Komponensenkénti metszés magasabb dimenzióban. A komponensenkénti kite módszer használatához kiszámolt értékek segítségével egy metszési (pruning) technikát dolgozhatunk ki. A következő tétel az ehhez szükséges formulákat ismerteti.

12. Tétel. [5] Legyen $Y \subseteq X \subseteq \mathbb{I}^n$ az aktuálisan vizsgált részintervallum, $c \in Y$, $F'(Y)$ az $f(y)$ gradiensének egy befoglalása és \tilde{f} pedig az aktuális (garantált) felső korlát a globális minimum értékére. Legyen \mathcal{Y}^* az f függvény Y intervallumba eső X intervallumra vonatkozó globális minimumhelyeinek halmaza. Ha $Z \supseteq g_i(c_i)$, $V \supseteq g_i(\underline{Y}_i)$ és $W \supseteq g_i(\bar{Y}_i)$,

$$\begin{aligned} p_i &= \underline{Y}_i + \frac{\tilde{f} - \underline{V}}{\ell_i}, & q_i &= c_i + \frac{\tilde{f} - \underline{Z}}{u_i}, \\ r_i &= c_i + \frac{\tilde{f} - \underline{Z}}{\ell_i}, & s_i &= \bar{Y}_i + \frac{\tilde{f} - \underline{W}}{u_i}, \end{aligned}$$

akkor minden $i \in \{1, \dots, n\}$ indexre a következő állítások teljesülnek.

(a) Ha $\tilde{f} < \min\{\underline{V}, \underline{W}, \underline{Z}\}$, akkor $\mathcal{Y}^* \subseteq Y_1 \times \dots \times Y_{i-1} \times [p_i, q_i] \times Y_{i+1} \times \dots \times Y_n \cup Y_1 \times \dots \times Y_{i-1} \times [r_i, s_i] \times Y_{i+1} \times \dots \times Y_n$.

- (b) Ha $\underline{W} \leq \tilde{f} < \min\{\underline{V}, \underline{Z}\}$, akkor $\mathcal{Y}^* \subseteq Y_1 \times \dots \times Y_{i-1} \times [p_i, q_i] \times Y_{i+1} \times \dots \times Y_n \cup Y_1 \times \dots \times Y_{i-1} \times [r_i, \overline{Y}_i] \times Y_{i+1} \times \dots \times Y_n$.
- (c) Ha $\underline{V} \leq \tilde{f} < \min\{\underline{Z}, \underline{W}\}$, akkor $\mathcal{Y}^* \subseteq Y_1 \times \dots \times Y_{i-1} \times [\underline{Y}_i, q_i] \times Y_{i+1} \times \dots \times Y_n \cup Y_1 \times \dots \times Y_{i-1} \times [r_i, s_i] \times Y_{i+1} \times \dots \times Y_n$.
- (d) Ha $\underline{Z} \leq \tilde{f} < \min\{\underline{V}, \underline{W}\}$, akkor $\mathcal{Y}^* \subseteq Y_1 \times \dots \times Y_{i-1} \times [p_i, s_i] \times Y_{i+1} \times \dots \times Y_n$.
- (e) Ha $\max\{\underline{W}, \underline{Z}\} \leq \tilde{f} < \underline{V}$, akkor $\mathcal{Y}^* \subseteq Y_1 \times \dots \times Y_{i-1} \times [p_i, \overline{Y}_i] \times Y_{i+1} \times \dots \times Y_n$.
- (f) Ha $\max\{\underline{V}, \underline{Z}\} \leq \tilde{f} < \underline{W}$, akkor $\mathcal{Y}^* \subseteq Y_1 \times \dots \times Y_{i-1} \times [\underline{Y}_i, s_i] \times Y_{i+1} \times \dots \times Y_n$.
- (g) Ha $\max\{\underline{V}, \underline{W}\} \leq \tilde{f} < \underline{Z}$, akkor $\mathcal{Y}^* \subseteq Y_1 \times \dots \times Y_{i-1} \times [\underline{Y}_i, q_i] \times Y_{i+1} \times \dots \times Y_n \cup Y_1 \times \dots \times Y_{i-1} \times [r_i, \overline{Y}_i] \times Y_{i+1} \times \dots \times Y_n$.

A javasolt algoritmus. A fenti eredmények alapján az értekezés 2.5.3. szakaszában egy új korlátozás és szétválasztás alapú globális optimalizálási eljárás algoritmikus leírását adtuk. A 3. Következményben kimondtuk, hogy a javasolt algoritmust használva soha nem veszíthetünk el a kiindulási X intervallumban lévő globális minimum pontokat.

Numerikus eredmények. Ez a szakasz a fentiekben ismertett komponensenkénti kite befoglalás és a hozzá kidolgozott metszés eljárás intervallumos globális optimalizálási algoritmusba történt implementálásával és tesztelésével kapott numerikus eredmények diskusszióját tartalmazza. Összefoglalva a numerikus eredményeket megállapíthatjuk, hogy a metszési technikát alkalmazó algoritmus a tesztfeladatsoron bizonyítottan jobb eredményt produkált. A teljesítmény növekedés ráadásul a nehezebb feladatok esetén volt nagyobb.

Elvégeztünk egy összehasonlítást másik két hasonló (AMIGO és MIAG) többdimenziós módszerrel. Megállapíthatjuk, hogy a kite módszer összességében jobban teljesített, a hatékonyság javulás itt 15%, illetve 35% lett rendre az AMIGO-hoz és a MIAG-hoz viszonyítva. Ha azonban az átlagok átlagát számoljuk, akkor rosszabb eredményt kapunk. Így az AMIGO 25%-kal, míg a MIAG 10%-kal volt gyorsabb a kite módszernél, ami azt mutatja, hogy az utóbbi módszerek eredményesebbek a nehezebben megoldható feladatok esetében.

3. Egy módszertan globális optimalizáló programok összehasonlítására

Ebben a fejezetben egy olyan algoritmikus eljárást ismertetünk, amely a teljes globális optimalizáló programok tesztelésére és összehasonlítására szolgál. Eredményeinket a NEUMAIER *et al.* [1] cikk közli. Míg a cikk főleg a konkrét tesztelési eredményeket tartalmazza, jelen értekezésben a munka alapját képező módszertant is részletesen ismertetjük.

Előkészületek

Tesztfeladatok. A tesztelés első lépése, hogy tesztfeladatokkal rendelkezünk. A COCONUT projekt keretében összeállított tesztfeladat gyűjtemény összesen 1322 optimalizálási feladatból áll (ez a COCONUT Benchmarking Set). A feladatokat 3 fő könyvtárra osztottuk, ezek a származásukra és jellegükre utaló osztályozások. Az egyes könyvtárakon belül méret szerint (a feladatokban előforduló változók száma) csoportosítottuk a feladatokat: size1 ($n \leq 10$), size2 ($10 < n \leq 100$), size3 ($100 < n \leq 1000$).

Időzítés. A különböző megoldók futási idejét szeretnénk összehasonlítani és ez alapján (is) rangsorolni őket. Egy nagyméretű tesztfeladatsoron végrehajtott komplett tesztelést nem feltétlenül egyetlen számítógépen végezzük, hanem több, esetleg különböző kapacitású és sebességű gépen. A felhasznált idő mérésére számos javaslat született, alapos megfontolások után a CPU frekvencia MHz-ben mért mérőszámát javasoltuk.

Egységes input. Következő fontos szempont, hogy a tesztfeladatok olyan formátumban legyen elérhetők, amely implicit vagy explicit módon feldolgozhatók a tesztelésben szereplő programok által. Ennek a kérdésnek a megoldására az AMPL modellezési nyelvet választhatjuk, mint kiindulási formátumot. Ehhez mellékelünk olyan konvertereket, amelyek az AMPL formátumból előállítják a megfelelő input formátumot.

Konverterek. A konverterek lehetővé teszik, hogy a széles körben használt input formátumok mind elérhetők legyenek az AMPL teszthalmazból kiindulva. Az egyes feladatok korrekt megoldásához és az egyes megoldók megbízható összehasonlításához fontos biztosítanunk, hogy a konverterek működése helyes legyen. Ennek egy lehetséges tesztelése a következő lépésből áll. Az AMPL tesztfeladatokból csináljunk más formátumokat. Ezeket oldjuk meg a különböző optimalizáló programokkal. Vessük össze a kapott eredményeket. Jegyezzük meg azonban, hogy az utolsó lépésben a kapott eredmények esetleges eltérését okozhatják a megoldó programokban előforduló hibák is. Fontos továbbá, hogy ez a módszer csak szükséges feltételt biztosít a konverterek helyességére.

Teljesítmény kritériumok. Amennyiben a tesztelést különböző teljesítményű gépeken végezzük, akkor az időkorlátokat normalizálni kell úgy, hogy az eredmények végül összevethetők legyenek. Az egyes méret szerinti osztályozásra különböző (lényegében tetszés szerinti) időkorlátokat kell rögzítenünk. Ezen egységek alapján egy konkrét gépre a $\frac{\text{korlát} \times 1000}{\text{CPU MHz}}$ képlet alapján állítottuk be az időkorlátot.

A jelenleg elérhető globális optimalizáló programok egyik leggyengébb része a kapott megoldások osztályozásának megbízhatósága. A módszertanban javaslatot adtunk arra, hogy a programok a keresés végeztével milyen egységes osztályozást adjanak. Ez alapján még könnyebb az egyes megoldók sikeresség szempontjából történő összehasonlítása.

Legjobb függvényértékek előállítása, vizsgálata. Először minden megoldó kimenetét egységesítettük. Az egységes kimeneteket fizibilitási tesztnek vetettük alá. Ez a COCONUT környezetben található `solcheck` programmal történt. Végül a fizibilis megoldások közül (amiből egy-egy feladat esetén több is lehet) kiválasztottuk a legkisebb függvényértékűt.

Ezek után jöhet a legjobb megoldások listájának (hitlist) összeállítása. Ez úgy történik, hogy minden könyvtárra vesszük az összes futtatási értéket és ezek közül minden fela-

datra kiválasztjuk a legkisebb függvényértékkel rendelkező megoldást, illetve ha több ilyen is van, akkor azok közül azt, amelyeknek a maximális fizibilitása a legkisebb; ez lesz a globális optimum. Ha nincs fizibilis megoldás, akkor a korlátok túllépésében a lehető legkisebb eltérésű megoldást választottuk, de megjelölve azt infizibilisként.

Az eredményül kapott legjobb megoldások listája egy internetes oldalról elérhető.

Jelölések a táblázatokban

A tesztkörnyezet számos táblázatba rendezett kimutatást készít a megoldó programok minőségi viselkedéséről.

Összefoglaló statisztikák: a tesztelt megoldó könyvtárakra lebontva hány esetben találta meg helyesen, illetve helytelenül az optimumot, továbbá hány esetben talált helytelenül nem lehetséges megoldást.

Részletező táblázatok: a kimeneti kategóriáknál bevezetett kritériumok alapján egy megoldó egy adott probléma könyvtárra vonatkozó viselkedését vizsgálhatjuk.

Futási idők összehasonlítása: két vagy több megoldó egymáshoz viszonyított gyorsaságának és sikerességének összevetése.

Megbízhatósági analízis segítségével pedig képet kaphatunk a megoldóprogramok megbízhatóságáról.

A teszteredmények összefoglalása. A tesztelt programok közül a BARON a leggyorsabb és legrobosztusabb. Tőle nem sokkal marad le az OQNLP, amelynek hátránya a BARON-nal szemben, hogy lassabb és nem tud információval szolgálni arról, hogy a keresés teljes volt-e. Az elérhető megoldók közül egyik sem teljesen megbízható, egyetlen kivétellel: feltétel kielégítési feladatok megoldására szolgáló ICOS, ami bár lassabb, mint a BARON, kiváló megbízhatósági jellemzőkkel rendelkezik (amikor be tudja fejezni a keresést a rendelkezésre álló időkorláton belül).

A teszteredmények közzététele a fejlesztők számára is hasznos volt. A BARON és az ICOS szerzői az eredmények ismeretében javítani tudtak a megoldóprogramjaik hatékonyságán és megbízhatóságán.

4. Atomklaszter feladatok

Ebben a fejezetben bizonyos tulajdonságoknak eleget tevő atomklaszterek optimális szerkezetének vizsgálatával foglalkozunk. A közölt eredményeket a VINKÓ [2] és a VINKÓ & NEUMAIER [4] cikkek tartalmazzák.

Alapfogalmak

Tekintsünk n darab atomot. Az i -edik atom pozícióját az $x_i \in \mathbb{R}^d$, $i = 1, \dots, n$ és $d = 2, 3, \dots$ jelöli, így egy *atomot* tekinthetünk úgy, mint a (d -dimenziós) Euklideszi-tér egy pontja. Jelen értekezésben olyan energiafüggvények vizsgálatával foglalkozunk, amelyek csak párpotenciál függvényt tartalmaznak, tehát

$$E(x_1, \dots, x_n) = \sum_{i < j} v(r_{ij})$$

alakúak, ahol $r_{ij} := \|x_i - x_j\|$. A bemutatott vizsgálataink és módszereink viszont általánosak abban az értelemben, hogy nem rögzítjük le a párpotenciál függvényt, hanem megadunk egy feltételrendszert, amelynek eleget tevő párpotenciált tartalmazó energiafüggvény bizonyos tulajdonságai meghatározhatók.

Jelölések. A fejezet további részében a következő jelöléseket használjuk. Az E függvény globális minimumhelye az az $x^* \in \mathbb{R}^{3n}$ konfiguráció, amelyre $E^* := E(x^*) = \min_{x \in \mathbb{R}^{3n}} E(x)$. Legyen r_{ij} az x_i^* és x_j^* ($i, j = 1, \dots, n$) pontok közötti Euklideszi távolság. Az i címkéjű atomhoz tartozó potenciális energiát a $E_i(x) = \sum_{i \neq j} v(\|x_i - x_j\|)$ ($i = 1, \dots, n$) egyenlet szerint definiáljuk, valamint $E_i^* = E_i(x^*)$. Nyilvánvaló, hogy $E(x) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n E_i(x)$. Az optimális struktúrában $r_{\min} := \min_{i,j} r_{ij}$ ($i, j = 1, \dots, n$) a *minimális atompár távolság*. A minimális távolság egy alsó korlátját q -val fogjuk jelölni; célunk tehát hogy találjunk lehetőleg minél jobb $q \leq r_{\min}$ alsó becslést. Amennyiben a v párpotenciál függvénynek létezik pozitív zérushelye, azt t -vel jelöljük.

Az általánosság elvesztése nélkül feltesszük, hogy $x_1 = 0$ és $0 = r_1 < r_2 \leq \dots \leq r_n$, ahol $r_j = \|x_j - x_1\| = \|x_j\|$ ($j = 1, \dots, n$) szerint definiált. A továbbiakban (hacsak külön nem hangsúlyozzuk) csak az $n > 2$ esetet vizsgáljuk.

Feltételek a párpotenciál függvényre. A párpotenciál függvényre az elméleti eredményekben a következő feltételrendszer teljesülését feltételezzük.

(P1) v folytonos.

(P2) Egyértelműen létezik egy nemnegatív s úgy, hogy $v(s) < 0$ és ez az egyetlen globális minimumpontja v -nek.

(P3) $v(r) \rightarrow 0$ ($r \rightarrow \infty$).

(P4) $v(r)$ monoton csökkenő ha $r < s$ és monoton növekedő, ha $r \geq s$.

Méretfüggő korlátok

Ebben az alfejezetben a v függvényről feltesszük, hogy teljesíti a (P1)–(P4) tulajdonságokat.

1. Lemma. [4] *Az optimális atomklaszterre érvényesek a*

$$-\frac{n(n-1)}{2}|v(s)| \leq E^*(n) \leq -d(n-d+1)|v(s)|$$

korlátok.

2. Lemma. [4] *Az optimális konfigurációban az i atomhoz tartozó potenciál korlátozható a $(-1)(n-1)|v(s)| \leq E_i^*(n) < -e_d|v(s)|$ értékekkel, ahol $e_d = 1$.*

A 2. Lemmában a felső korlát valójában méret- és dimenziófüggetlen korlát. Létezik továbbá egy sejtés, hogy $e_d = d$ is teljesül, de ennek a bizonyítása egyelőre nyitott. A következőkben a $-e_d|v(s)|$ kifejezést írjuk az E_i^* felső korlátjaként.

3. Lemma. [4] *Ha $n > 2 + e_d$, akkor az optimális konfigurációban a minimális atompár távolságra teljesül a*

$$q(n) := w\left((n-2-e_d)|v(s)|\right) \leq r_{\min} \quad (5)$$

egyenlőtlenség, ahol w a v inverz függvénye, amely a

$$w(x) = \begin{cases} r & \text{akkor és csak akkor, ha } x = v(r) \text{ és } r \geq s, \\ 0 & \text{különben} \end{cases}$$

definiációval adott.

Méretfüggetlen korlátok – első változat

A következőkben a VINKÓ [2] cikk eredményeit közöljük.

Feltételek a párpotenciálra. A módszer használhatóságához szükségünk van a (P1)–(P4) feltételrendszer szigorítására. Nevezetesen felteszük, hogy a v függvényre teljesül (P1), (P2), továbbá

(P3') Ha $r \leq s$, akkor v szigorúan monoton csökkenő és $v(r) \geq r^{-4}$.

(P4') Ha $r > s$, akkor v szigorúan monoton növekvő és $v(r) \geq -r^{-4}$.

A felhasznált korlátok. Könnyű látni, hogy $r_{\min} \leq s$ mindig teljesül, ezt mondja ki a 4. Lemma. Érvényesek továbbá a következők.

5. Lemma. [2] *Ha $\frac{r}{2} < a < b$, akkor az $\mathcal{J}_{ab} = \{j \mid a \leq r_j < b\}$ indexhalmaz méretére érvényes az $|\mathcal{J}_{ab}| \leq \left(\frac{2b}{r} + 1\right)^d - \left(\frac{2a}{r} - 1\right)^d$ korlát.*

6. Lemma. [2] *Ha $pq \geq s$, akkor $\sum_{q \leq r_j < pq} v(r_j) \geq v(q) - ((2p+1)^d - 1)|v(s)|$.*

7. Lemma. [2] *Legyen $s \leq pq = R_0 < R_1 < R_2 < \dots$ egy végtelen, szigorúan növekedő sorozat, és definiáljuk az $\mathcal{I}_k = \{j \mid 2 \leq j \leq n, R_k \leq r_j < R_{k+1}\}$ ($k = 0, 1, 2, \dots$) indexhalmazzt. Ha $pq \geq s$, akkor $\sum_{r_j \geq pq} v(r_j) \geq \frac{1}{q^d} \sum_{k=0}^{\infty} v(R_k) \left((2R_{k+1} + pq)^d - (2R_k - pq)^d\right)$.*

Minimális atompár távolság. A fenti lemmákat használva egy általános módszer adható az optimális szerkezetben előforduló minimális atompár távolság egy alsó korlátjának meghatározására. A 7. Lemmában egy végtelen R_k sorozatot használtunk, amely egy végtelen, egymásba ágyazott gömbsorozatot reprezentál. Ehelyett a sorozat helyett

azonban használhatunk $R : \mathbb{R}_+ \times \mathbb{N}_0 \rightarrow \mathbb{R}_+$ alakú függvényeket is, amelyek az $R(Q, k) < R(Q, k+1)$ és $R(Q, 0) = c$ tulajdonságokkal rendelkeznek, ahol $c \in \mathbb{R}_+$ egy konstans (a 7. Lemmában ez a konstans pq , a végtelen sorozat kezdőpontja). A rövideg kedvéért az R_k^Q jelölést fogjuk használni az $R(Q, k)$ függvényre. Használjuk még továbbá a $U_c^Q := \{R_k^Q \mid R_k^Q < R_{k+1}^Q \text{ és } R_k^Q = c \text{ és } k = 0, 1, \dots\}$ jelölést is. Definiáljuk most a

$$\begin{aligned} F(q, p) &:= v(q) - ((2p+1)^3 - 1) |v(s)|, \\ S(q, p, R) &:= \frac{1}{q^d} \sum_{k=0}^{\infty} v(R_k^Q) \left((2R_{k+1}^Q + q)^d - (2R_k^Q - q)^d \right), \\ G(q, p, R) &:= F(q, p) + S(q, p, R) \end{aligned}$$

függvényeket.

13. Tétel. [2] *Definiáljuk a $g_v(q, p, Q) := G(q, p, R)$ függvényt. Ha $g_v(q, p, Q) > -\infty$, akkor az optimális atomklaszter feladatban a minimális atompár távolság kisebb, vagy egyenlő a*

$$\begin{aligned} \frac{\partial g_v(q, p, Q)}{\partial p} &= 0, \\ \frac{\partial g_v(q, p, Q)}{\partial Q} &= 0, \\ g_v(q, p, Q) + e_d |v(s)| &= 0 \end{aligned}$$

nemlineáris egyenletrendszer megoldásában szereplő q értéknél.

A 13. Tétellel elérhető eredményeket tovább javíthatjuk a következő megfontolások alapján. Ha az R_k sorozat első $m > 1$ tagját a p_1, \dots, p_m változókkal helyettesítjük, akkor egy $m+2$ változós G függvényt kapunk. Nevezetesen a

$$\begin{aligned} G(q, p_1, \dots, p_m, R) &:= F(q, p) + \sum_{i=1}^{m-1} v(p_i q) \left((2p_{i+1} + 1)^d - (2p_i - 1)^d \right) \\ &\quad + \frac{1}{q^d} \sum_{k=0}^{\infty} v(R_k^Q) \left((2R_{k+1}^Q + q)^d - (2R_k^Q - q)^d \right) \end{aligned}$$

függvényt, ahol $F(q, p)$ a (6)-ben definiált, $p_1 q \geq s$, és $R_k^Q \in U_{p_m q}^Q$.

1. Következmény. [2] *Definiáljuk a $g_v(q, p_1, \dots, p_m, Q) := G(q, p_1, \dots, p_m, R)$ függvényt. Ha $g_v > -\infty$, akkor az optimális atomklaszter feladatban a minimális atompár távolság nagyobb vagy egyenlő, mint a*

$$\begin{aligned} \frac{\partial g_v(q, p_1, \dots, p_m, Q)}{\partial p_1} &= 0, \\ &\vdots \\ \frac{\partial g_v(q, p_1, \dots, p_m, Q)}{\partial p_m} &= 0, \\ \frac{\partial g_v(q, p_1, \dots, p_m, Q)}{\partial Q} &= 0, \\ g_v(q, p_1, \dots, p_m, Q) + e_d |v(s)| &= 0 \end{aligned}$$

nemlineáris egyenletrendszer megoldásának q komponense.

Lineáris alsó korlát az optimum értékére. Az előző alfejezet eredményeit használva lineáris alsó korlátot adhatunk az optimális függvény értékére is. Ez a korlát helyes lesz tetszőleges méretű klaszter esetén.

14. Tétel. [2] *Ha q egy olyan alsó korlát a minimális atompár távolságra, amelyet az 1. Következmény felhasználásával kaptunk, akkor létezik olyan B_1 konstans, amelyre $-\frac{B_1}{2}n \leq E^*$. Továbbá B_1 értéke q értékéből meghatározható.*

Méretfüggetlen korlátok – továbbfejlesztett változat

A továbbfejlesztett változatot az a tény inspirálta, hogy a fenti módszer nem alkalmazható direkt módon olyan párpotenciálokra, amelyek nem divergálnak az atompár távolságának csökkenésével. A következőkben ismertetett eredményeket a VINKÓ & NEUMAIER [4] cikk tartalmazza.

Feltételek a párpotenciálra. A módszer alkalmazhatóságához felteszük, hogy v teljesíti a (P1) és (P2) tulajdonságokat, valamint a következőt is.

(P3'') Létezik olyan $R \in [0, s]$, amelyre

$$\int_s^\infty \left[\left(\frac{2r}{R} + 1 \right)^d \right] v'(r) dr < \min \left\{ v(R) + |v(s)|, \frac{1}{2}v(R) + \frac{3}{2}|v(s)| \right\}.$$

Vegyük észre, hogy ez a tulajdonság automatikusan teljesül, ha v divergál az $r \rightarrow 0$ esetben.

Felhasznált korlátok. Az alábbiakban R_k jelöli egy rögzített i indexre az x_i atomtól vett k -adik legkisebb távolságot. Akkor $R_1 = 0$ és

$$R_2 = r_{\min} := \min_{i,j} r_{ij} \quad (i, j = 1, \dots, n) \quad (6)$$

a minimális távolság az optimális konfigurációban. Egy bizonyos atomnak majd az 1 címkét adjuk (ennek meghatározását lásd később) és a többi atomot majd úgy jelöljük, hogy $r_i := r_{1i}$ amelyekre $0 = r_1 \leq r_2 \leq \dots \leq r_n$.

Az E_i^* értékekre vonatkozó méretfüggetlen alsó korlát és a teljes energiára érvényes lineáris alsó korlát megadására a továbbiakban a $\Sigma_m := \sum_{k=2}^m v(r_k)$ értékekre keresünk alsó- és felső korlátokat.

Legyen $N_d(r)$ azon diszjunkt nyílt egységgömbök maximális száma, amelyek elhelyezhetők egy r sugarú gömbben. Egyszerű térfogat összehasonlítással az $N_d(r) \leq \lfloor r^d \rfloor$ felső korlát adódik, amelyet a továbbiakban használunk.

1. Állítás. [4] *Legyen $K(r) := \min_{m \in \mathbb{N}, R_m > 0} (m-1)N_d\left(\frac{2r}{R_m} + 1\right)$. Akkor $k \leq K(r_k)$ ($k = 1, 2, \dots$), és K az r növekvő függvénye. Speciálisan*

$$K(r) \leq (m-1) \left\lfloor \left(\frac{2r}{R_m} + 1 \right)^d \right\rfloor \quad (m = 2, 3, \dots).$$

2. Állítás. [4] Ha $r_m \leq s$, akkor $\Sigma_m \leq -m|v(s)| + E_1^* + \int_s^\infty K(r)v'(r)dr$ és ha $m \geq 2$ is teljesül, akkor $(m-1)v(R_m) + (m+e_d)|v(s)| \leq \int_s^\infty K(r)v'(r)dr$.

Minimális atompár távolság.

15. Tétel. [4] Legyen $[\underline{R}, \overline{R}] \subseteq [0, s]$ olyan intervallum, amelyre

$$\int_s^\infty \left[\left(\frac{2r}{\overline{R}} + 1 \right)^d \right] v'(r)dr \leq v(\overline{R}) + |v(s)| \quad (R \in [\underline{R}, \overline{R}]),$$

és

$$\int_s^\infty \left[\left(\frac{2r}{\underline{R}} + 1 \right)^d \right] v'(r)dr < \min \left\{ v(\underline{R}) + |v(s)|, \frac{1}{2}v(\underline{R}) + \left(1 + \frac{e_d}{2}\right)|v(s)| \right\}$$

teljesülnek. Akkor az $f(q) := v(q) + (2+e_d)|v(s)| - \int_s^\infty \left[\left(\frac{2r}{q} + 1 \right)^d \right] v'(r)dr$ függvény legkisebb q zérushelye benne van az (\overline{R}, ∞) nyílt intervallumban, továbbá $r_{\min} \geq q$.

Vegyük észre, hogy a (P3'') tulajdonság implikálja a tétel feltételének teljesíthetőségét (vegyük az $\underline{R} = \overline{R} = R$ esetet.)

Lineáris alsó korlát az optimumra.

16. Tétel. [4] Ha $B_2 := -|v(s)| + \int_s^\infty K(r)v'(r)dr < \infty$, akkor $E_i^* \geq -B_2$ minden $i = 1, \dots, n$ indexre. Továbbá minden ilyen B_2 konstansra $-\frac{B_2}{2}n \leq E^*$.

2. Következmény. Ha q a minimális atompár távolság egy alsó korlátja, akkor $E_i^* \geq B_2 := -|v(s)| + \int_s^\infty \left[\left(\frac{2r}{q} + 1 \right)^d \right] v'(r)dr$.

A fejezet hátralevő részében két jól ismert és az irodalomban legtöbbször hivatkozott párpotenciál függvényre alkalmazzuk az ismertetett eljárásokat.

Lennard-Jones klaszterek

A Lennard-Jones párpotenciál általános alakja a $v_{t,\varepsilon}(r) = 4\varepsilon \left(\left(\frac{t}{r} \right)^{12} - \left(\frac{t}{r} \right)^6 \right)$ függvénnyel adható meg. A globális optimalizálási irodalomban a az $\varepsilon = t = 1$ és $s = 2^{1/6}$, $v_{1,1}(r) = \frac{4}{r^{12}} - \frac{4}{r^6}$ alakban (reduced unit), vagy az ún. skálázott Lennard-Jones potenciál ($\varepsilon = 1$, $t = 2^{-1/6}$, $s = 1$) $v_{2^{-1/6},1}(r) = \frac{1}{r^{12}} - \frac{2}{r^6}$ alakban szokás vizsgálni. A Lennard-Jones potenciál függvény a az

$$LJ_{t,\varepsilon}(x) = \sum_{1 \leq i < j \leq n} v_{\sigma,\varepsilon}(\|x_i - x_j\|).$$

alakban definiálható.

Méretfüggő korlát a minimális atompár távolságra. A 3. Lemmát alkalmazva kapjuk, hogy $v_{t,\varepsilon} \leq (n-2-e_d)|v(s)|$. Ebből az egyenlőtlenségből következik, hogy az optimális Lennard-Jones klaszterben ha $n > 2 + e_d$, akkor

$$q(n) = s \left(\frac{\sqrt{\varepsilon^2 + \varepsilon|v_{t,\varepsilon}(s)|(n-2-e_d)} - \varepsilon}{(n-2-e_d)|v_{t,\varepsilon}(s)|} \right)^{\frac{1}{6}}$$

egy alsó korlát a minimális atompár távolságra.

Méretfüggetlen alsó korlátok a minimális atompár távolságra. Az általános alak és a skálázott változat között a $v_{\sigma,\varepsilon}(r) = \varepsilon v_{2-1/6,1}(r/s)$ skálázás visz át, tehát a minimális távolságot az s skálázza, míg a potenciál értékét ε . Ezért a skálázott verzióra adjuk meg a számításokat. A 13. Tétellel 0.6187, míg a 15. Tétellel 0.6547 adódik a $d = 3$ esetben a minimális atompár távolság alsó korlátjára.

Lineáris alsó korlát az optimum értékére. A 13. Tétel (tehát az első változat) numerikus értékeit használva az optimális Lennard-Jones potenciál függvényre teljesül a $-138.6775911n \cdot \varepsilon \leq LJ_{\sigma,\varepsilon}^*$ ($n = 2, 3, \dots$) lineáris alsó korlát a $d = 3$ esetben. A 15. Tételből és a 2. Következményből $d = 3$ -ra a $-68.9554\varepsilon n \leq LJ_{t,\varepsilon}^*$, míg $d = 2$ -re a $-9.4478\varepsilon n \leq LJ_{t,\varepsilon}^*$ lineáris alsó korlátokat kapjuk.

Morse klaszterek

A másik népszerű modell a *Morse klaszter*, ahol a párpotenciál függvényt a $v_\rho(r) = e^{\rho(1-r)}(e^{\rho(1-r)} - 2)$ függvénnyel definiáljuk, ahol $\rho > 0$ egy paraméter. A *Morse potenciált* a

$$M_\rho(x) = \sum_{1 \leq i < j \leq n} v_\rho(\|x_i - x_j\|)$$

függvénnyel definiáljuk.

Méretfüggő alsó korlát a minimális atompár távolságra A 3. Lemma használatával kapjuk, hogy $(\exp(\rho(1-r)) - 1)^2 - 1 \leq (n-2-e_d)|v_\rho(s)|$. Ebből az egyenlőtlenségből adódik, hogy

$$q(n) = \max \left\{ 1 - \rho^{-1} \ln \left(\sqrt{|v_\rho(s)|(n-2-e_d)} + 1 \right), 0 \right\},$$

amely egy alsó korlát a minimális atompár távolságra az optimális Morse klaszterben, amennyiben $n > 2 + e_d$.

Méretfüggetlen alsó korlát a minimális atompár távolságra A 4.3.1. szakasz általános módszere itt közvetlenül nem alkalmazható, mert a Morse potenciál nem teljesíti a (P3') feltételt. A magyarázat az, hogy a v_ρ függvény az $r = 0$ esetben is definiált (tehát amikor két atom a tér ugyanazon pontjában van). Ebben az esetben a minimális atompár távolságra vonatkozó előzetes információ segíthet. LOCATELLI & SCHOEN az optimális Morse clusterok ilyen tulajdonságát vizsgálta, és bebizonyította, hogy ha $6 \leq \rho \leq 15$, akkor a minimális atompár távolság határozottan pozitív. Ennek segítségével kiválthatjuk a (P3') tulajdonságot.

Az alábbi táblázat tartalmazza a kapott alsó korlátokat. Az első változattal kapott eredményeket a harmadik oszlopban találhatjuk. A továbbfejlesztett változattal a

$\rho = 4.967$ értékig tudunk alsó korlátokat megadni, amelyeket az ötödik oszlop tartalmaz. Fontos kiemelnünk, hogy itt nincs szükség előzetes információra az r_{\min} értékére vonatkozóan.

ρ	M_ρ alsó korlátja a 14. Tételből	q értéke a 13. Tételből	M_ρ alsó korlátja az 2. Köv.-ből	q értéke a 15. Tételből
15	$-30.370n$	0.854645	$-21.6176n$	0.865683
14	$-32.240n$	0.842336	$-22.5917n$	0.854691
13	$-34.581n$	0.827767	$-23.8037n$	0.841725
12	$-37.594n$	0.810249	$-25.3520n$	0.826193
11	$-41.617n$	0.788778	$-27.3977n$	0.807236
10	$-47.255n$	0.761821	$-30.2230n$	0.783551
9	$-55.712n$	0.726898	$-34.3707n$	0.753054
8	$-69.762n$	0.679650	$-41.0345n$	0.712129
7	$-97.522n$	0.611312	$-53.4416n$	0.653727
6	$-177.619n$	0.498595	$-84.4438n$	0.560668
5	–	–	$-365.2798n$	0.333473
4.967	–	–	$-461.7701n$	0.306227

Lineáris alsó korlát az optimum értékére. A fenti táblázat tartalmazza az ismertett módszereink használatával kapott lineáris alsó korlátokat különböző ρ paraméterekre. A második oszlopban az első módszerrel, a negyedik oszlopban pedig a továbbfejlesztett változattal kiszámolt értékeket tüntettük fel.

Hivatkozások

- [1] A. Neumaier, O. Shcherbina, W. Huyer, and T. Vinkó. A comparison of complete global optimization solvers. *Mathematical Programming*, 103:335–356, 2005.
- [2] T. Vinkó. Minimal inter-particle distance in atom clusters. *Acta Cybernetica*, 17:105–119, 2005.
- [3] T. Vinkó, J.-L. Lagouanelle, and T. Csendes. A new inclusion function for optimization: Kite – the one dimensional case. *Journal of Global Optimization*, 30:435–456, 2004.
- [4] T. Vinkó and A. Neumaier. New bounds for atomic clusters. *Közlésre benyújtva*, 2005.
- [5] T. Vinkó and D. Ratz. A multidimensional branch-and-prune method for interval global optimization. *Numerical Algorithms*, 37:391–399, 2004.