Markót Mihály Csaba

Garantált megbízhatóságú globális optimalizálási módszerek továbbfejlesztése korlátozásos feladatokra és alkalmazásuk körpakolási feladatok megoldása esetén

Doktori értekezés tézisei

Témavezető:
Dr. Csendes Tibor

Szegedi Tudományegyetem, 2003.

1. Bevezetés

Jelen összefoglalás fejezeteinek, definícióinak, és tételeinek számozása a könnyebb azonosítás végett az értekezésbeli sorszámozásukkal egyezik meg.

Jelölési konvenciók

A valós skalárokra a kisbetűs, az intervallumokra pedig a nagybetűs jelölést használjuk. A valós, illetve intervallumvektorokat félkövér szimbólumokkal, a vektorok elemeit, illetve pont- és intervallumsorozatok elemeit pedig alsó indexeléssel jelöljük. $\mathbb{R}$ a valós számok halmazát, $\mathbb{I}$ a valós intervallumok halmazát jelenti. Egy $D \subseteq \mathbb{R}^n$ halmaz esetén $\mathbb{I}(D)$-vel jelöljük azon $\boldsymbol{X}$ n-dimenziós boxok halmazát, melyekre $\boldsymbol{X} \subseteq D$. A valós függvények jelölésére kisbetűk, az intervallumos befoglaló függvények jelölésére a megfelelő nagybetűk szolgálnak.

Intervallum analízis, befoglaló függvények

Valós intervallum: $\mathbb{R}$ elemeinek azon nemüres, zárt és korlátos részhalmaza, melyre $X = [\underline{X}, \overline{X}] = \{x \in \mathbb{R} \mid \underline{X} \leq x \leq \overline{X}\}$, ahol $\underline{X}$, illetve $\overline{X}$ jelöli az X intervallum *alsó*, illetve *felső korlát*ját. Intervallumok *szélességé*e a $w(X) := \overline{X} - \underline{X}$ módon, intervallumok *relatív szélességé*e pedig az alábbi formulával definiált: $w_{rel}(X) := w(X)/(\min\{|x| \mid x \in X\})$, ha $0 \notin X$, illetve $w_{rel}(X) := w(X)$ egyébként. A valós számokon értelmezett *elemi művelet*ek intervallumokra vonatkozó kiterjesztései az $X \circ Y := \{x \circ y \mid x \in X,\ y \in Y\} \in \mathbb{I},\quad \circ \in \{+, -, \cdot, /\}$ formula által adottak. Intervallumvektorokon végzett elemi műveletek komponensenként definiáltak. Ha $\varphi : D \subseteq \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ *egy valós, standard matematikai függvény*, mely folytonos minden D-beli zárt intervallumon, akkor φ intervallumos kiterjesztését a $\Phi(X) := \{\varphi(x) \mid x \in X\}$ formulával definiáljuk minden $X \in \mathbb{I}(D)$ esetén.

1. Definíció. *Az $F : \mathbb{I}^n \to \mathbb{I}$ intervallumos függvény az $f : D \subseteq \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ függvény* befoglaló függvény*e $\boldsymbol{X} \in \mathbb{I}(D)$-n, ha minden $\boldsymbol{Y} \subseteq \boldsymbol{X}$ esetén $\boldsymbol{y} \in \boldsymbol{Y}$-ból $f(\boldsymbol{y}) \in F(\boldsymbol{Y})$ következik.*

4. Definíció. *Az $F : \mathbb{I}^n \to \mathbb{I}$ befoglaló függvény* izoton *tulajdonságú az $\boldsymbol{X} \in \mathbb{I}^n$ boxon, ha minden $\boldsymbol{Y}, \boldsymbol{Z} \subseteq \boldsymbol{X}$ és $\boldsymbol{Y}, \boldsymbol{Z} \in \mathbb{I}^n$ esetén $\boldsymbol{Y} \subseteq \boldsymbol{Z}$-ből $F(\boldsymbol{Y}) \subseteq F(\boldsymbol{Z})$ következik.*

5. Definíció. *Az $F : \mathbb{I}^n \to \mathbb{I}$ befoglaló függvény* konvergencia rendje $\alpha > 0$ *(vagy másképp fogalmazva, F* α-konvergens*) az $\boldsymbol{X} \in \mathbb{I}^n$ boxon, ha létezik olyan $c \in \mathbb{R}$ pozitív konstans, hogy bármely $\boldsymbol{Y} \subseteq \boldsymbol{X}$, $\boldsymbol{Y} \in \mathbb{I}^n$ esetén*

$$w(F(\boldsymbol{Y})) - w(f(\boldsymbol{Y})) \leq c(w(\boldsymbol{Y}))^\alpha$$

teljesül, ahol $f(\boldsymbol{Y})$ az f (valós) függvény értékkészletét jelöli $\boldsymbol{Y}$-on.

7. Definíció. *Az $F : \mathbb{I}^n \to \mathbb{I}$ befoglaló függvény teljesíti a* zéró-konvergencia tulajdonság*ot $\boldsymbol{X} \in \mathbb{I}^n$-en, ha $w(F(\boldsymbol{Z}_i)) \to 0$ teljesül minden olyan $\{\boldsymbol{Z}_i\}$, $\boldsymbol{Z}_i \in \mathbb{I}^n$, $i = 1, 2, \ldots$ intervallumsorozat esetén, melyre $\boldsymbol{Z}_i \subseteq \boldsymbol{X}$, valamint $w(\boldsymbol{Z}_i) \to 0$.*

A vizsgált optimalizálási feladatok

Legyenek f és g_j $(j = 1, \ldots, r)$ az $\boldsymbol{X}_0$ n-dimenziós intervallumvektoron értelmezett, és a teljes $\boldsymbol{X}_0$-on folytonos valós függvények. A vizsgált feladatosztályok:

$$\min_{\boldsymbol{x} \in \boldsymbol{X}_0} f(\boldsymbol{x}), \tag{$*$}$$

(*korlátozó feltétel nélküli feladat*), illetve

$$\begin{aligned} \min \quad & f(\boldsymbol{x}), \\ \text{s.t.} \quad & g_j(\boldsymbol{x}) \leq 0, \ j = 1, \ldots, r, \\ & \boldsymbol{x} \in \boldsymbol{X}_0, \end{aligned} \tag{$**$}$$

(*egyenlőtlenség alakú korlátozó feltételeket tartalmazó feladat*). Mindkét esetben f összes globális minimumhelyének és a minimum f^* értékének meghatározása a cél.

Az intervallumos korlátozás és szétválasztás típusú algoritmus fő lépései

Az algoritmusban két listát aktualizálunk: a további feldolgozásra váró boxokat az $\mathcal{L}_\mathcal{W}$ Munkalistában, a megállási feltételt teljesítő boxokat (a minimumhelyek esetleges befoglalásait) az $\mathcal{L}_\mathcal{S}$ Eredménylistában tároljuk.

Az intervallum-felosztási irány választása. Az aktuális $\boldsymbol{Y}$ box felosztása a k-adik komponensre merőlegesen történik meg, ahol $k := \min\{j \mid j \in \{1, 2, \ldots, n\}, D(j) = \max_{i=1}^{n} D(i)\}$.

'A'–stratégia: $D(i) := w(Y_i)$.

'B'–stratégia: $D(i) := w(\boldsymbol{\nabla}_i F(\boldsymbol{Y})) \cdot w(Y_i)$.

'C'–stratégia: $D(i) := w(\boldsymbol{\nabla}_i F(\boldsymbol{Y}) \cdot (Y_i - m(Y_i)))$.

'D'–stratégia: $D(i) := w_{rel}(Y_i)$. ($w_{rel}(X)$ az X relatív szélessége.)

Intervallum-felosztási szabályok. Hagyományos felező (*bisection*) stratégiák: az aktuális boxot két részre osztjuk. *Multisection*: két, vagy több irányban több részre darabolunk. Új típusú (adaptív) felosztási szabályokkal a 3. Fejezetben foglalkozom.

Gyorsító lépések. Az értekezés algoritmusaiban alkalmazott gyorsítótesztek: lehetséges megoldások tesztje, középponti (kivágási) teszt, monotonitási teszt, konkavitási teszt, intervallumos Newton-lépés. Probléma-specifikus gyorsítótesztek kidolgozására a 4. Fejezet mutat példát.

Intervallum-kiválasztási szabályok. *Moore–Skelboe-szabály*: Válasszuk a következő lépésben felosztásra azt a Munkalistabeli $\boldsymbol{Y}$ boxot, melyre $\underline{F}(\boldsymbol{Y})$ minimális. *Hansen-szabály*: Válasszuk felosztásra azt a Munkalistabeli $\boldsymbol{Y}$ boxot, amely a legrégebben szerepel a Munkalistán. További, heurisztikus mutatókon alapuló kiválasztási szabályokkal a 3. Fejezet foglalkozik.

9. DEFINÍCIÓ. *Tekintsük a felosztásra kiválasztott boxok által adott* $\{\boldsymbol{Y}_i\}_{i=1}^{\infty}$ *sorozat (egymásba ágyazott boxokból álló) konvergens részsorozatainak határértékeit. Legyen*

ezen határértékek halmazának uniója $A \subseteq \boldsymbol{X}_0$. Ekkor a vizsgált algoritmus változatra azt mondjuk, hogy az az A halmazhoz konvergál.

2. Multisection felosztási szabályok

A disszertáció 2. Fejezetében néhány, több koordináta irány szerint felosztó (multisection) stratégiát, illetve az ezekre vonatkozó empirikus eredményeket mutatom be [5] alapján. Az alkalmazott szabályokhoz hasonló, ún. szeletelő eljárásokat, és az előálló algoritmusok konvergencia-sebességét Csallner és munkatársai [1] vizsgálták elméleti úton. A numerikus elemzés során az 'A', 'B', 'C' és 'D' irányválasztási szabályok mindegyikét az alábbi intervallum-felosztási stratégiákkal kombináltam:

– /2 szabály: a klasszikus felezés módszere;

– /3 szabály: az aktuális box 3 részre osztása; először az irányválasztási szabály szerinti legígéretesebb irányban felezünk, majd az egyik kapott boxot tovább felezzük a második legígéretesebb irányban;

– /4 szabály: 4 részre osztás: a két legjobbnak vélt irányban egyidejűleg felezünk.

Numerikus eredmények. A numerikus teszteket a széles szakmai kör által tanulmányozott és elfogadott 37 elemű feladatcsoporton hajtottam végre. Az eredmények összegzéseként megállapíthatjuk, hogy a bemutatott multisection szabályok nehezen megoldható feladatok esetén számottevő mértékben javíthatnak az alapalgoritmus hatékonyságán. Összességében a C/3, illetve C/4 stratégiák tekinthetők a legkedvezőbbnek. A multisection előnye ugyanakkor mind a 'B', mind a 'C' szabályok esetén fennáll, azaz a tradicionális A/2 módszerhez képest az új típusú irányválasztási szabályok, illetve a több részre osztó szabályok erősítik egymás hatását. Ez különösen figyelemreméltó annak fényében, hogy az algoritmusokban kifinomult gyorsítóteszteket alkalmaztam. Nehéz feladatokon a multisection használata a legjobb felező szabályokhoz képest várhatóan kb. 22, illetve 25 százalékkal csökkenti az időigényt, illetve a célfüggvényhívások számát. Emellett a multisectiont használó módszerek tárigénye nem nőtt jelentős mértékben a bisection változatokhoz képest.

3. Egy új heurisztikus mutató vizsgálata

A 3. Fejezetben egy, a (∗∗) alakú feladatok esetén alkalmazható új heurisztikus mennyiséget mutatok be [6]. Az új mutató arra ad becslést, hogy egy box milyen mértékben tartalmaz lehetséges megoldásokat, ezzel lehetőséget biztosítva a korlátozó feltételekből fakadó információ felhasználására.

Az alapul vett mutató

Az utóbbi években Casado, Csendes, García és Martínez korlátozás nélküli – (∗) alakú – feladatok megoldása esetére javasolta a

$$pf^*(\boldsymbol{X}) = p(f^*, \boldsymbol{X}) = \frac{f^* - \underline{F}(\boldsymbol{X})}{w(F(\boldsymbol{X}))}$$

paraméter használatát. A paraméter egy heurisztikus becslést szolgáltat arra nézve, hogy a vizsgált box mennyire ígéretes a globális minimumhely tartalmazása szempontjából. A gyakorlatban a globális minimum értéke, f^* általában nem ismert. Ekkor f^* helyett annak egy $\hat{f}$ közelítése használható. Csendes az $\hat{f}$ értékeket egy általános $\{f_k\}_{k=1}^{\infty}$ sorozat aktuális tagjaiként tekintette.

Az új heurisztikus mutató

A vizsgált heurisztikus mennyiséget J. Fernández Hernández javasolta: számítsuk ki minden korlátozó feltételre a

$$pu_{G_j}(\boldsymbol{X}) = \min\left\{\frac{-\underline{G_j}(\boldsymbol{X})}{w(G_j(\boldsymbol{X}))}, 1\right\}, \tag{1}$$

mennyiséget. Ha a nevező 0 értéket venne fel, akkor $\boldsymbol{X}$-en a g_j függvény konstans. Ekkor, ha a $g_j(\boldsymbol{X}) \in \mathbb{R}$ értékkészlet pozitív, akkor $\boldsymbol{X}$ törölhető a lehetséges megoldások tesztjével, ellenkező esetben legyen $pu_{G_j}(\boldsymbol{X}) = 1$. Legyen ezután

$$pu(\boldsymbol{X}) = \prod_{j=1}^{r} pu_{G_j}(\boldsymbol{X}), \quad \text{majd} \quad pup(\hat{f}, \boldsymbol{X}) = pu(\boldsymbol{X}) \cdot p(\hat{f}, \boldsymbol{X}),$$

ahol $\hat{f}$-t ismét valamely f_k értékek sorozata által tekintjük adottnak. A javasolt $pu(\boldsymbol{X})$ tehát a $p(\hat{f}, \boldsymbol{X})$ értéket korrigálja a lehetséges megoldások tartalmazására vonatkozó információ felhasználásával.

A tekintett intervallum-kiválasztási szabályok

Klasszikus stratégiák:

– **C1:** Moore–Skelboe-szabály.

– **C2:** Hansen-szabály.

A $p(f_k, \boldsymbol{X})$ mutatón alapuló szabályok:

– **C3:** Az $\mathcal{L}_{\mathcal{W}}$ Munkalista elemei közül a maximális $p(f_k, \boldsymbol{X})$ értékkel rendelkező box legyen kiválasztva.

– **C4:** Hibrid szabály $p(f_k, \boldsymbol{X})$-szel: legyen N_m egy rögzített pozitív konstans, és minden iterációban válasszuk ki $\mathcal{L}_{\mathcal{W}}$ elemei közül a legnagyobb $p(f_k, \boldsymbol{X})$ értékkel rendelkező N_m darab boxot. A kiválasztott boxok alkotják az aktualizált Munkalistát, míg a többi box egy másodlagos listára kerül, és az algoritmus végén, egy második fázisban lesz feldolgozva a hagyományos **C1** szabály alkalmazásával.

A C3 szabályt használó algoritmusok konvergencia-tulajdonságait Csendes, a C3 és C4 szabályok gyakorlati viselkedését Casado és munkatársai vizsgálták részletesen.

A $pup(f_k, \boldsymbol{X})$ indexen alapuló új stratégiák:

– **C5:** A legnagyobb $pup(f_k, \boldsymbol{X})$ értékkel rendelkező box kiválasztása.

– **C6:** A C4-beli hibrid szabály $pup(f_k, \boldsymbol{X})$-t használva.

Az egyszerre magas $pup(f_k, \boldsymbol{X})$ értékkel és alacsony $\underline{F}(\boldsymbol{X})$ értékkel rendelkező boxok preferálása: legyen

$$pupb(f_k, \boldsymbol{X}) = \begin{cases} \underline{F}(\boldsymbol{X})/pup(f_k, \boldsymbol{X}) & \text{ha } pup(f_k, \boldsymbol{X}) \neq 0, \\ M & \text{egyébként,} \end{cases}$$

ahol M egy előre beállított nagy pozitív szám.

– **C7:** A *legkisebb* $pupb(f_k, \boldsymbol{X})$ értékkel rendelkező box kiválasztása.

– **C8:** A C4 hibrid szabály a *minimális* $pupb(f_k, \boldsymbol{X})$ értéket használva.

A tekintett intervallum-felosztási szabályok

Statikus bisection és multisection szabályok:

– **S1_/2:** klasszikus bisection a legszélesebb komponensre merőlegesen;

– **S2_/4:** felezés a két legszélesebb komponensre merőlegesen, azaz 4 részboxra osztás (/4 multisection);

– **S3_/9:** három egyforma részre darabolás a két legszélesebb komponensre merőlegesen, tehát 9 részboxra történő felosztás (/9 multisection).

Adaptív multisection $p(f_k, \boldsymbol{X})$-szel: Legyenek $0 \leq P_1 < P_2 \leq 1$ alkalmas küszöbértékek.

– **S4_pf_/2,4,9:**
(a) Ha $p(f_k, \boldsymbol{X}) < P_1$, akkor $\boldsymbol{X}$-re bisection alkalmazása;
(b) ha $P_1 \leq p(f_k, \boldsymbol{X}) \leq P_2$, akkor $\boldsymbol{X}$-re /4 multisection alkalmazása;
(c) ha $p(f_k, \boldsymbol{X}) > P_2$, akkor $\boldsymbol{X}$-re /9 multisection alkalmazása.

Adaptív multisection $pup(f_k, \boldsymbol{X})$-szel:

– **S5_pup_/2,4,9:** mint S4, de $p(f_k, \boldsymbol{X})$ helyett $pup(f_k, \boldsymbol{X})$-et használva.

Az S4 szabály viselkedését korábban Casado és munkatársai tanulmányozták.

Konvergencia vizsgálatok

Az új intervallum-kiválasztási szabályok konvergencia-tulajdonságai. Az értekezés 3.3.1 szakaszában a C5 és C7 szabályokat használó algoritmusok konvergencia jellemzőit mutatom be [6] alapján. Az algoritmusokról a konvergencia-vizsgálat miatt feltételezzük, hogy a megállási feltételeknek egy box sem tehet eleget. Az egyes algoritmusok gyorsítótesztjeként csak a lehetséges megoldások tesztjét használom, kivéve azokat az eseteket, ahol az alkalmazott tesztek használatát külön kiemelem.

17. Tétel. *[6] Tegyük fel, hogy a célfüggvény befoglaló függvénye izoton, zéró-konvergens, a korlátok befoglaló függvényei ugyancsak izoton tulajdonságúak, a $p(f_k, \boldsymbol{Z})$ paraméterek pedig egy $\{f_k\}_{k=1}^{\infty}, f_k \rightarrow \hat{f} > f^*$ sorozat segítségével adottak, ahol $\hat{f} = f(\hat{\boldsymbol{x}})$ valamely $\hat{\boldsymbol{x}} \in \boldsymbol{X}_0$ lehetséges megoldás esetén. Akkor az intervallumos B&B algoritmus, mely minden lépésben a legnagyobb $pup(f_k, \boldsymbol{Z})$ értékkel rendelkező intervallumot választja ki felosztásra (azaz a C5 szabályt használja)* konvergálhat *egy olyan*

$\hat{\boldsymbol{x}} \in \boldsymbol{X}_0$ lehetséges megoldáshoz, melyre $f(\hat{\boldsymbol{x}}) > f^*$ áll, azaz, amely nem globális minimumhelye a megoldandó feladatnak.

Az értekezés 18. Tételében hasonló állítást igazolok abban az esetben is, ha a korlátok befoglaló függvényei α-konvergensek (és akár nem izoton tulajdonságúak).

A kivágási teszt és a célfüggvény befoglaló függvényének zéró-konvergenciája elegendő lehet az algoritmus globális minimumpontokhoz történő konvergenciájához még abban az esetben is, amikor f_k nem tart f^*-hoz.

1. LEMMA. *[6] Tételezzük fel, hogy a korlátok befoglaló függvényei izoton tulajdonságúak. Legyen $\{\boldsymbol{X}_k\}_{k=1}^{\infty}$ az algoritmus által generált egymásba ágyazott boxok egy olyan sorozata, mely az $\boldsymbol{x}$ lehetséges megoldáshoz konvergál. Akkor az alábbi három állítás ekvivalens:*

1. *Egy alkalmas i indexre $pu(\boldsymbol{X}_i) = 0$.*

2. *Egy alkalmas i indexre $pu(\boldsymbol{X}_k) = 0 \ \forall k \geq i$.*

3. *Egy alkalmas i index és $\forall k \geq i$ esetén $\boldsymbol{X}_k$ nem tartalmaz szigorúan lehetséges megoldásokat, továbbá létezik olyan s indexű korlátozó feltétel, melyre $g_s(\boldsymbol{x}) = 0$, valamint a G_s befoglaló függvény az alsó korlátjában pontos minden $\boldsymbol{X}_k$ esetén.*

19. TÉTEL. *[6] Tegyük fel, hogy a célfüggvény és a korlátok befoglaló függvényei zéró-konvergensek, továbbá nem létezik olyan $\{\boldsymbol{X}_k\}_{k=1}^{\infty}$, $\boldsymbol{X}_k \subseteq \boldsymbol{X}_0$ boxsorozat, melynek valamely konvergens $\{\boldsymbol{X}_{k_l}\}$ részsorozatára $\lim_{l\to\infty} pu(\boldsymbol{X}_{k_l}) = 0$ teljesül, valamint az f_k értékek sorozata egy $\hat{f} < f^*$ számhoz konvergál. Akkor az intervallumos B&B algoritmus, mely minden lépésben a legnagyobb $pup(f_k, \boldsymbol{Z})$ értékkel rendelkező $\boldsymbol{Z}$ intervallumot választja ki felosztásra, a maximális $pup(f_k, \boldsymbol{Z})$-vel rendelkező boxok közül pedig a maximális $p(f_k, \boldsymbol{Z})$ értékűt választja, a felosztásra kijelölt boxok olyan részsorozatait állítja elő, melyek az $\boldsymbol{X}_0$ keresési tartomány minden lehetséges megoldásához konvergálnak, függetlenül az azokban számított célfüggvényértékektől.*

20. TÉTEL. *[6] Tegyük fel, hogy mind a célfüggvény, mind a korlátok befoglaló függvényei izoton tulajdonságúak és zéró-konvergensek. Tekintsük azt az intervallumos B&B algoritmust, amely a lehetséges megoldások tesztje mellett esetlegesen a kivágási, illetve a monotonitási tesztet is tartalmazza, és amely minden lépésben a legnagyobb $pup(f_k, \boldsymbol{Z})$ értékkel rendelkező boxot választja ki felosztásra, a maximális $pup(f_k, \boldsymbol{Z})$-vel rendelkező boxok közül pedig a legnagyobb $p(f_k, \boldsymbol{Z})$ értékűt választja. Ha az $\{f_k\}$ sorozat a globális minimumhoz, f^*-hoz tart, továbbá $\{f_k\}$ véges sok eleme kisebb, mint f^*, akkor az algoritmus globális minimumpontok egy halmazához tart.*

A globális minimum aktualizált legjobb felső korlátját ($\tilde{f}$-t) használva az alábbi korolláriumhoz jutunk:

1. KOROLLÁRIUM. *[6] Tekintsük azt az algoritmust, amely a lehetséges megoldások tesztje mellett esetlegesen a kivágási, illetve a monotonitási tesztet is tartalmazza, és amely minden lépésben a legnagyobb $pup(\tilde{f}, \boldsymbol{Z})$ értékkel rendelkező boxot választja*

ki felosztásra, a maximális $pup(\tilde{f}, \boldsymbol{Z})$*-vel rendelkező boxok közül pedig a maximális* $p(\tilde{f}, \boldsymbol{Z})$ *értékűt választja. Ha biztosak lehetünk abban, hogy az* $\tilde{f}$ *értékek sorozata* f^**-hoz tart, akkor az algoritmus által felosztásra kijelölt intervallumok konvergens részsorozatai a globális minimumpontok egy halmazához tartanak.*

Az egyes intervallum-kiválasztási szabályok egy $u : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ hasznossági függvény használatával kombinálhatók:

21. Tétel. *[6] Tegyük fel, hogy mind a célfüggvény, mind a korlátok befoglaló függvényei izoton tulajdonságúak és zéró-konvergensek. Tekintsük azt az intervallumos B&B algoritmust, amely a lehetséges megoldások tesztje mellett esetlegesen a kivágási, illetve a monotonitási tesztet is tartalmazza, és amely minden lépésben a legnagyobb* $u(pup(f_k, \boldsymbol{Z}), -\underline{F}(\boldsymbol{Z}))$ *értékkel rendelkező boxot választja ki felosztásra, a maximális* $u(x, y)$ *mennyiséggel rendelkező boxok közül pedig a legnagyobb* $p(f_k, \boldsymbol{Z})$ *értékűt választja.*

(a) *Ha az* $\{f_k\}$ *sorozat a globális minimumhoz,* f^**-hoz tart, ezen sorozat véges sok eleme kisebb, mint* f^**, valamint u szigorúan monoton növő mindkét változójában, akkor az algoritmus a globális minimumpontok egy halmazához tart.*

(b) *Másrészről, ha* $f_k > f^* + \delta$ *valamely* $\delta > 0$*-ra, akkor az algoritmus még az (a)-beli tulajdonsággal rendelkező u függvények esetén is konvergálhat egy nemoptimális ponthoz.*

Amennyiben az algoritmusban előírjuk a kivágási teszt használatát az $\tilde{f}$ értékek alapján, akkor egy általános, az összes ismertetett kiválasztási szabályra érvényes konvergencia-feltétel fogalmazható meg:

22. Tétel. *[6] Tegyük fel, hogy mind a célfüggvény, mind a korlátok befoglaló függvényei zéró-konvergensek. Tekintsük azt az intervallumos B&B algoritmust, mely a lehetséges megoldások tesztje mellett a kivágási tesztet (illetve esetlegesen a monotonitási tesztet) is tartalmazza, és tetszőleges intervallum-kiválasztási szabályt használ (pl. a C1,…,C8 szabályok valamelyikét). Ha az* f_k *értékek sorozata* f^**-hoz tart, valamint véges sok iterációs lépés kivételével minden lépésben* $f_k = f(\boldsymbol{x}_k)$ *teljesül valamely* $\boldsymbol{x}_k \in \boldsymbol{X}_0$ *lehetséges megoldásra, akkor az algoritmus által felosztásra kijelölt intervallumok konvergens részsorozatai a globális minimumpontok egy halmazához tartanak.*

Ha biztosak lehetünk abban, hogy az $\tilde{f}$ értékek sorozata f^*-hoz tart, akkor a 22. Tétel feltételei mellett a C1–C8 szabályokat használó algoritmusváltozatok a globális minimumpontok egy halmazához tartanak.

A tárgyalt algoritmus globális minimumpontokhoz történő konvergenciájához elengedhetetlen egy, a globális minimum értékéhez tartó sorozat megadása. A globális minimum egy hagyományosan használt becslése

$$\tilde{f}_k := \min\{\tilde{f}_{k-1}, \overline{F}(\boldsymbol{Y}^1), \ldots, \overline{F}(\boldsymbol{Y}^s)\}, \tag{2}$$

ahol $\boldsymbol{Y}^1, \ldots, \boldsymbol{Y}^s$ a k-adik iterációs lépés intervallumfelosztása során előálló boxok, valamint $\tilde{f}_0 = \overline{F}(\boldsymbol{X}_0)$. A globális minimum egy másik szokásos becslése:

$$f_k := \underline{F}(\boldsymbol{X}_k), \tag{3}$$

ahol $\boldsymbol{X}_k$ a k-adik iterációs lépésben felosztandó box.

2. Korollárium. *[6] Tegyük fel, hogy mind a célfüggvény, mind a korlátok befoglaló függvényei izoton tulajdonságúak és zéró-konvergensek. Tekintsük azt az intervallumos B&B algoritmust, amely a lehetséges megoldások tesztje mellett esetlegesen a kivágási, illetve a monotonitási tesztet is tartalmazza, valamint az alábbi szabályok egyike alapján választja ki a felosztandó intervallumot:*

- *maximális* $pup(f_k, \boldsymbol{X})$ *érték (C5 szabály),*
- *maximális* $u(pup(f_k, \boldsymbol{X}), -\underline{F}(\boldsymbol{X}))$ *érték,*
- *minimális* $pupb(f_k, \boldsymbol{X})$ *érték (C7 szabály).*

Ekkor mind a (2) által adott $\{\tilde{f}_k\}$*-ra, mind pedig a (3) által definiált* $\{\underline{F}(\boldsymbol{X}_k)\}$*-ra igaz az, hogy az illető sorozat nem feltétlenül tart* f^**-hoz.*

Az intervallum-felosztási szabályok tulajdonságai. A disszertáció 3.3.2 szakaszában a $pup(\tilde{f}, \boldsymbol{X})$ mutató által irányított adaptív intervallum-felosztási szabályt vizsgálom ([6]). Az $\tilde{f}$ becsléseinek sorozatát a (2) összefüggés alapján állítjuk elő.

23. Tétel. *[6] Tekintsük azt az intervallumos B&B algoritmust, amely a Munkalistából minden iterációs lépésben a legkisebb* $\underline{F}(\boldsymbol{X})$ *értékkel rendelkező boxot választja ki felosztásra (azaz a C1 szabályt alkalmazza). Ekkor léteznek olyan (∗∗) alakú optimalizálási feladatok, melyekre a célfüggvény és a korlátok befoglaló függvényei izotonok és* α*-konvergensek, és amelyekre a következő állítások teljesülnek:*

1. *Tetszőlegesen nagy rögzített* $N > 0$*-ra az algoritmus által* N *db egymás utáni lépésben felosztásra kiválasztott boxok egyike sem tartalmaz globális minimumhelyet, és minden ilyen boxon vett* $pup(\tilde{f}, \boldsymbol{X})$ *érték nagyobb, mint egy előre rögzített* $P_2 < 1$ *szám.*
2. *Megadható az algoritmus által felosztásra kijelölt boxok sorozatának egy olyan, globális minimumhelyhez tartó részsorozata, melynek minden elemére* $pup(\tilde{f}, \boldsymbol{X}) < P_1$*, egy előre rögzített* $0 < P_1$ *esetén.*

Számítógépes vizsgálatok

Az értekezés 3.4 alfejezetében részletesen összehasonlító vizsgálatot végzek a korábban már tanulmányozott és az új heurisztikus mutatón alapuló eljárásváltozatok között. A tekintett tesztproblémák:

1. Elhelyezési feladatok: a ‘taszításon alapuló elhelyezési problémák’ (obnoxious facility location problems).

2. Standard globális optimalizálási feladatok korlátozó feltételekkel ellátott változatai.

Az intervallum-kiválasztási szabályok vizsgálata. A generált feladatokat a C1–C8 szabályokat használó algoritmusokkal oldottam meg. Az intervallum-kiválasztási szabályok numerikus vizsgálatának összefoglalásaként megállapíthatjuk, hogy a C5, C6, C7, C8-cal jelzett újonnan javasolt szabályok a korlátokból fakadó információ felhasználásával jelentősen megnövelhetik az algoritmus hatékonyságát. Ez a javulás a nehezen megoldható feladatokon, a klasszikus módszerekhez képest már az önmagukban igen hatékony $p(f_k, \boldsymbol{Z})$-típusú szabályokhoz viszonyítva is megfigyelhető. Sőt, a legnehezebb feladatok esetén számos esetben kizárólag a korlátokat figyelembe vevő kiválasztási szabályokkal rendelkező algoritmusokkal vált lehetővé a feladatok megoldása. A hatékonyság-növekedés különösen azon feladatok esetén jelentős, amelyekben az optimumpontok a lehetséges megoldások halmazának határához közel találhatók.

Az adaptív intervallum-felosztási szabályok vizsgálata. Az S1–S5 felosztási szabályok viselkedését megvizsgáltam mind az elhelyezési, mind a korlátozásos standard tesztfeladatok esetére. A kapott eredmények szerint minden feladatnál az adaptív S4 módszer némiképp jobbnak bizonyult az S5 szabálynál. Az utóbbi szabályra kapott zömében negatív eredmények oka nagy valószínűséggel a P_1 és P_2 értékek beállítása: a kifinomultabb S5 felosztási szabályhoz várhatóan a küszöbértékek előzetes meghatározásának eddiginél pontosabb módszerei lesznek szükségesek.

4. Körpakolási feladatok megoldása

A disszertáció 4. Fejezetében az egybevágó körök négyzetbe történő optimális pakolásainak megadását vizsgálom. A feladat speciális tulajdonságainak felhasználásával teljes egészében megbízhatóságú számításokon alapuló bizonyító erejű algoritmusokat ismertetek.

A körpakolási feladatok megfogalmazásai

Legyen $n \geq 2$ rögzített egész. A tekintett feladat leggyakoribb megfogalmazásai az alábbiak:

1. *Helyezzünk el n számú egybevágó kört az egységnégyzetben átfedés nélkül úgy, hogy a körök sugara maximális legyen.*

Ezzel egy ekvivalens feladatot eredményez az alábbi megfogalmazás:

2. *Helyezzünk el n számú pontot az egységnégyzetben úgy, hogy a pontpárok közötti távolságok minimuma maximális legyen.*

Az értekezésben a feladat 2. reprezentációjával foglalkozom, távolságok helyett távolság*négyzetekkel* számolva. Legyen az egységnégyzet a $[0,1]^2$ halmaz, és jelöljük a pakolandó pontokat $((x_1, y_1), \ldots, (x_n, y_n))$-nel (a továbbiakban a fenti párokat a tömörebb $(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) \in [0,1]^{2n}$ formában adom meg). Az (x_i, y_i) és (x_j, y_j) pontok *távolságnégyzet*ét jelöljük d_{ij}-vel. A megoldandó optimalizálási feladat a következő:

$$\begin{array}{ll} \max & \min_{1\le i\ne j\le n} d_{ij}, \\ \text{s.t.} & 0 \le x_i, y_i \le 1, \quad i = 1, 2, \ldots, n. \end{array} \tag{4}$$

Az (4) feladathoz tartozó célfüggvény az alábbi alakú:

$$f_n(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = \min_{1\le i\ne j\le n} (x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 = \min_{1\le i\ne j\le n} d_{ij}. \tag{5}$$

Az értekezés eredményeit megelőzően az $n = 2, \ldots, 27, 36$ esetek megoldásai voltak ismertek. Az optimalitási bizonyítások jó része számítógépes eljárások eredménye volt, de az eddigi eljárások hagyományos lebegőpontos számításokkal dolgoztak.

Intervallumos befoglaló függvény megadása

A disszertáció 4.3 szakaszában az (5) függvény egy nem-triviális befoglaló függvényét adom meg:

24. Tétel. *[2] Legyen $(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{Y}) \subseteq [0,1]^{2n}$, és legyen*

$$D_{ij} = (X_i - X_j)^2 + (Y_i - Y_j)^2, \qquad \text{minden } 1 \le i \ne j \le n \text{ −re.}$$

Ekkor az $a := \min_{1\le i\ne j\le n} \underline{D_{ij}}$, $a \in \mathbb{R}$, valamint a $b := \min_{1\le i\ne j\le n} \overline{D_{ij}}$, $b \in \mathbb{R}$ értékekkel definiált $F_n(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{Y}) := [\,a, b\,]$ intervallum az $f_n(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$ célfüggvény értékkészletének befoglalását adja az $(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{Y})$ $2n$-dimenziós intervallumvektoron.

A megkonstruált befoglaló függvény legfontosabb tulajdonságaiként az alábbi állításokat bizonyítom:

– $F_n(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{Y})$ kiszámítása (hasonlóan $f_n(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$ kiértékeléséhez) $\Theta(n^2)$ műveletigényű;

– $F_n(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{Y})$ az $n = 2$-re pontos (az intervallumos műveletvégzés kifelé kerekítéseitől eltekintve); $n \ge 3$ esetén viszont $F_n(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{Y})$ csupán az alsó korlátjában pontos, a felső korlátban túlbecslést eredményezhet;

– $F_n(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{Y})$ izoton;

– $F_n(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{Y})$ zéró-konvergens.

A kifejlesztett algoritmus első változata

A 4.4 szakaszban áttekintem az optimalizáló kereteljárás további részeinek specifikációját:

Monotonitási tulajdonságok.

25. Tétel. *[2] Legyen $(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{Y}) \subseteq [0,1]^{2n}$ tetszőleges $2n$-dimenziós box. Ha valamely k indexre ($k \in \{1, 2, \ldots, n\}$) fennáll, hogy minden $j(\ne k)$ esetén vagy $\overline{X_k} \le \underline{X_j}$, vagy pedig $\underline{D_{kj}} > \overline{F_n}(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{Y})$ teljesül, akkor f_n monoton csökkenő $(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{Y})$-n az x_k változójában. Ekkor az X_k-t $[\underline{X_k}, \underline{X_k}]$-ra módosíthatjuk.*

A célfüggvény vizsgálata hasonlóképpen történik mind a monoton növekedés, mind az y_k változók esetén.

A "szabad körök" kezelésének módszere.

12. DEFINÍCIÓ. *Tekintsük a (4) által adott pontpakolási feladatot valamely rögzített $n \geq 2$ esetén. Tekintsük továbbá az $(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = (x_1, \dots, x_n, y_1, \dots, y_n)$ optimális pontpakolást, amelyre tehát f_n maximális. A $p_k = (x_k, y_k)$, $k \in \{1, \dots, n\}$ pontot az $(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$ pakolás* szabad pontjának *nevezzük, ha létezik olyan p_k végpontú H félegyenes, és létezik valamely pozitív ε valós szám, hogy*

$$f_n(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = f_n(x_1, \dots, x'_k, \dots, x_n, y_1, \dots, y'_k, \dots, y_n)$$

teljesül minden $(x'_k, y'_k) \in H \cap \Delta_\varepsilon(p_k)$ esetén, ahol $\Delta_\varepsilon(p_k)$ jelöli a p_k pont ε sugarú környezetét.

Egy optimális pontpakolásban található szabad pontok a megfelelő optimális körpakolásban a szabad körök középpontjaival feleltethetők meg. A szabad pontok jelenléte kontinuum sok ekvivalens optimális megoldást eredményez, ezek hatékony kezelése tehát rendkívül fontos.

27. TÉTEL. *[2] alapján. Legyen $(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{Y}) \subseteq [0,1]^{2n}$ tetszőleges $2n$-dimenziós box. Ha valamely k indexre ($k \in \{1, 2, \dots, n\}$) fennáll, hogy minden $j(\neq k)$ esetén $\underline{D_{kj}} > \overline{F_n}(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{Y})$, akkor az $(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{Y})$-ban esetlegesen létező összes optimális $(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$ pakolás esetén a pakolás (x_k, y_k) pontja szabad, és ez a pont szabadon mozoghat (X_k, Y_k)-ban. Ezért a box további vizsgálatához elegendő az (X_k, Y_k) egy pontjának, és az (X_k, Y_k) 'kizárólag szabad pontokat tartalmaz' információnak a tárolása.*

Az aktív pontok módszere. Az eljárás szerepe meghatározó volt a korábbi hagyományos, illetve számítógépes megoldó eljárásokban. A kidolgozott megbízható változatok bizonyultak a kifejlesztett algoritmus leghatékonyabb gyorsítótesztjének. A módszer alapelve a következő: Tegyük fel, hogy a pontpárok minimális távolságának maximumára ismert egy $\tilde{f}_0$ alsó korlát. Az aktuálisan tekintett keresési tartomány (X_i, Y_i) komponenseiből iteratívan törölhetők azok a pontok, amelyek valamely másik komponens megmaradt területének *összes* pontjától $\tilde{f}_0$-nél kisebb távolságra vannak.

Kiindulásként minden aktív (nem törölt) területet minden köztes fázisban téglalapként reprezentáltam, ezen feltételek mellett egy intervallumos elemi törlő eljárást dolgoztam ki. Az eljárás hatékonnyá tételéhez az első algoritmusváltozatban minden, kiinduláskor tekintett téglalapot mindkét irányban több kisebb cellára osztottam, és az ezekből képzett, a távolságaik alapján releváns *cellasor*okra, illetve *cellaoszlop*okra hajtottam végre az elemi eliminációs eljárást.

A lokális ellenőrzés numerikus eredményei. A futtatások során a korábbról ismert optimális megoldások, azaz az $n = 2, \dots, 27, 36$-ra vonatkozó eredmények intervallumos, garantált megbízhatóságú ellenőrzését tűztem ki célul. A felhasznált eredmények egy részét tehát a hagyományos valós aritmetikát alkalmazó módszerekkel érték el. Az algoritmus induló keresési tartományának komponensei 0.01 szélességűek voltak. Az ellenőrzés lehetséges eredményei az alábbiak lehetnek:

– *Megerősítés*: a feladat maximumára kapott befoglalás tartalmazza a közölt maximumot, illetve $\mathcal{L}_\mathcal{S}$ egy eleme tartalmazza az előre megadott optimális megoldást.

– *Elvetés*: mind $\mathcal{L}_\mathcal{W}$, mind $\mathcal{L}_\mathcal{S}$ üres az algoritmus terminálásakor. Ekkor a feladatnak nem létezik a publikált maximumértékkel rendelkező megoldása a keresési tartományon belül.

A bemutatott eljárás 4 kivételtől eltekintve az összes korábbról ismert optimális megoldás ellenőrzését (megerősítését) elvégezte a 2 órás futásidőn belül. A feladatsor mintegy próbaként tartalmazott egy feladatot, amiben 21 kör esetére egy korábbi közleményben hibásan megadott pakolási értéket kellett megvizsgálni. Ezt az értéket a módszer elvetette – helyesen.

A globális ellenőrzés numerikus eredményei. A legnagyobb nehézség a geometriailag ekvivalens, ugyanakkor az optimalizálási modellekben különböző megoldások hatékony kezelése volt. Az eddig ismert legjobb módszer az egységnégyzet *csempék*re osztása. Az összes optimális pakolás felderítése az összes n elemű csempe-*kombináció* átvizsgálásával végezhető el. A korábbi és jelen algoritmusokban a csempézés az egységnégyzet $k \times l$ egyforma részre osztásával történik.

A globális ellenőrzés során a futási időt 4 órában maximalizáltam. Az ellenőrizendő optimumok és optimális megoldások ismét az $n = 2, \dots, 27, 36$ esetén ismertek voltak. Az $n = 2, \dots, 20$ értékekre 3 kivétellel minden esetben sikerült megerősíteni a megadott optimumhelyek és értékek helyességét (a használt tolerancia értéken belül). A meg nem oldott esetek mindegyikében egy-egy egyedi kombináció vizsgálata ütközött nehézségbe.

A továbbfejlesztett algoritmus

További kutatásaim [3, 4] eredményeként a 4.4 szakaszban ismertetett algoritmus továbbfejlesztésként egy olyan módszer jött létre, amely az eddig megoldatlan $n \geq 28$, $n \neq 36$ esetek közül néhány újnak a megoldására is alkalmas. A 4.5 szakaszban ezt az algoritmust mutatom be.

A szabad körök módszerének kifinomultabb változata.

1. Legyen az $(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{Y}) \in \mathbb{I}^{2n}$ box az $\mathcal{L}_\mathcal{W}$-ben és $\mathcal{L}_\mathcal{S}$-ben tárolt összes box befoglalása a B&B algoritmus futtatásakor tetszőleges számú iterációs lépés elvégzése után. Legyen $\tilde{f}$ az aktuálisan használt kivágási érték.
2. Tegyük fel, hogy léteznek olyan $p_{k_1}, \dots, p_{k_t}$, $p_{k_s} \in (X_{k_s}, Y_{k_s})$, $s \in \{1, \dots, t\}$ *gépi pontok* az $(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{Y})$ box t különböző tartományában úgy, hogy $\underline{D}(p_{k_s}, (X_j, Y_j)) > \overline{F}(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{Y}) \geq \tilde{f}$ minden $s \in \{1, \dots, t\}$, és minden $j \neq k_s$, $j \in \{1, \dots, n\}$ esetén. Jelölje K a $\{k_1, \dots k_t\}$ indexhalmazt.
3. Cseréljük az (X_i, Y_i) komponenseket a p_i pontszerű intervallumokra minden $i \in K$-ra. Futtassuk az így előálló $(\boldsymbol{X}', \boldsymbol{Y}')$ boxon a B&B algoritmust a korábban talált $\tilde{f}$-t használva.
4. Tartalmazza $(\boldsymbol{X}'', \boldsymbol{Y}'') \in \mathbb{I}^{2n}$ a megmaradt összes boxot. Az eljárás output boxa az alábbi módon adott: (X_i, Y_i), ha $i \in K$ és (X_j'', Y_j''), ha $j \notin K$.

28. Tétel. *[4] Az ismertetett eljárás korrekt, azaz az előálló output box a kiinduló $(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{Y})$ -ban elhelyezkedő összes optimális megoldást tartalmazza.*

Az aktív pontos módszer továbbfejlesztése: terület-eliminálás poligonokkal. A cellázó módszer alternatívájaként Nurmela és Östergård az aktív területek *poligonok*kal történő közelítését javasolta. Az eredeti eljárás több helyen is kritikus a számítógépes számábrázolás szempontjából. Megoldásként a poligon-közelítéses módszer egy megbízható számításokon alapuló változatának fő vonásait ismertetem.

Rész-csempekombinációk vizsgálata. Az $n > 27$, $n \neq 36$ esetek számítógépes megoldásának legnagyobb akadálya jelen értekezés eredményeit megelőzően a végigvizsgálandó csempe-kombinációk száma volt. (A kombinációk szekvenciális feldolgozása – még hagyományos lebegőpontos számításokkal is – mintegy 3 nagyságrenddel több processzoridőt, összességében több évtizedet igényelne $n = 28$-ra a 27 kör esetéhez képest.) A csempe-kombinációk szekvenciális feldolgozása helyett javasolt eljárás lényege a csempék elhelyezkedéséből adódó lokális információk felhasználása kombináció-csoportok egyidejű eliminálására. Jelöljük a pontpakolási probléma egyfajta általánosításának egy példányát $P(n, X_1, \ldots, X_n, Y_1, \ldots, Y_n)$ -nel, ahol n a pakolandó pontok száma, $(X_i, Y_i) \in \mathbb{I}^2$, $i = 1, \ldots, n$ a keresési tartomány komponensei, a feladat célfüggvénye pedig (5) által adott. Az alábbi tétel azt mutatja, hogyan lehet egy $2m$-dimenziós pakolási feladaton kapott eredményt egy $2n$-dimenziós feladatra alkalmazni $n \geq m \geq 2$ esetén:

30. Tétel. *[4] Legyenek $n \geq m \geq 2$ egészek, és tekintsük a*

$$P_m = P(m, Z_1, \ldots, Z_m, W_1, \ldots, W_m) = P(m, (\boldsymbol{Z}, \boldsymbol{W})), \text{ illetve}$$

$$P_n = P(n, X_1, \ldots, X_n, Y_1, \ldots, Y_n) = P(n, (\boldsymbol{X}, \boldsymbol{Y}))$$

pontpakolási feladatokat ($X_i, Y_i, Z_i, W_i \in \mathbb{I}$; $X_i, Y_i, Z_i, W_i \subseteq [0,1]$). Futtassuk P_m-re a B&B algoritmust egy $\tilde{f}$ kivágási értéket használva a gyorsítótesztekben, de kihagyva az $\tilde{f}$-t aktualizáló lépést. Állítsuk meg az algoritmus futását tetszőleges számú iterációs lépés elvégzése után. Jelölje $(Z_1', \ldots, Z_m', W_1', \ldots, W_m') = (\boldsymbol{Z}', \boldsymbol{W}')$ az $\mathcal{L}_{\mathcal{W}}$-ben és $\mathcal{L}_{\mathcal{S}}$-ben található boxokat befoglaló intervallumvektort. Tegyük fel, hogy létezik egy φ invertálható távolságtartó geometriai transzformáció, amelyre $\varphi(Z_i) = X_i$, $\varphi(W_i) = Y_i$, $\forall i = 1, \ldots, m$. Ekkor minden $(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) \in \mathbb{R}^{2n}$ pontpakolásra, melyre $(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) \in (\boldsymbol{X}, \boldsymbol{Y})$ és $f_n(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) \geq \tilde{f}$ áll, egyidejűleg az alábbi összefüggés is teljesül:

$$(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) \in (\varphi(Z_1'), \ldots, \varphi(Z_m'), \ldots, X_n, \varphi(W_1'), \ldots, \varphi(W_m'), \ldots, Y_n) := (\boldsymbol{X}', \boldsymbol{Y}').$$

3. Korollárium. *[4] Legyen φ az identitás transzformáció, és tegyük fel, hogy a B&B algoritmus üres Munkalistával és üres Eredménylistával terminál, azaz a teljes $(\boldsymbol{Z}, \boldsymbol{W}) = (Z_1, \ldots, Z_m, W_1, \ldots, W_m) = (X_1, \ldots, X_m, Y_1, \ldots, Y_m)$ keresési tartomány eliminálható az $\tilde{f}$ érték használatával. Ekkor $(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{Y})$ nem tartalmaz olyan $(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) \in \mathbb{R}^{2n}$ vektort, amelyre $f_n(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) \geq \tilde{f}$ teljesül.*

Az optimalitási bizonyításokban használt eljárások. Az optimalitási bizonyítások során alacsony dimenziójú, könnyen feldolgozható rész-csempekombinációkból indulok ki, és lépésről lépésre térek át egyre nagyobb csempehalmazokra. Maga a teljes eljárás tehát egymásra épülő fázisokból áll. A felhasznált két elemi algoritmus:

– Grow(): egy csempekombináció-halmaz minden eleméhez egy új oszlopból származó csempék hozzáadása.

– Join(): két csempekombináció-halmaz elemeinek páronkénti összeillesztése.

Numerikus eredmények: 28, 29 és 30 kör optimális pakolása. A kapott eredmények az alábbiakban foglalhatók össze ($n = 28, 29, 30$):

– Szimmetrikus esetektől eltekintve, egy kezdeti csempe-kombináció (illetve annak megmaradt aktív területe) tartalmazza n pont összes optimális pakolását.

– A három feladat maximumainak garantált befoglalásai a következők:

$$
\begin{aligned}
F_{28}^{*} &= [\underline{0.23053549364266}73, \underline{0.23053549364267}43], \quad w(F_{28}^{*}) \approx 7 \cdot 10^{-15},\\
F_{29}^{*} &= [\underline{0.2268829007442}089, \underline{0.2268829007442}240], \quad w(F_{29}^{*}) \approx 2 \cdot 10^{-14},\\
F_{30}^{*} &= [\underline{0.22450296453108}81, \underline{0.22450296453109}03], \quad w(F_{30}^{*}) \approx 2 \cdot 10^{-15}.
\end{aligned}
$$

– Az egyes feladatok maximumainak pontos értéke legfeljebb $w(F_n^*)$-gal térhet el az ismert legjobb célfüggvényértékektől.

– Szimmetrikus esetektől eltekintve, n pont optimális pakolásának összes globális maximumhelye az ismertetett $(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{Y})_n^*$ boxban található. A boxok komponensei (az esetleges szabad pontokat befoglaló tartományoktól eltekintve) igen szűkek.

– A kiinduló és az eredmény boxok térfogata közötti csökkenés $n = 28, 29, 30$-ra rendre több mint 711, 764, illetve 872 nagyságrendnyi.

– A teljes bizonyítási eljárás időigénye rendre kb. 53, 50 illetve 20 óra volt.

A korábbról ismert legjobb pakolásokhoz tartozó struktúrák optimalitása. Egy pakolási struktúra megadja, mely pontok helyezkednek el a négyzet oldalán, mely pontpárok között minimális a távolság, illetve melyek a szabadon mozgó pontok. A merev pontok halmazára vonatkozó vektorokat az r felső index-szel jelöljük. Az értekezésben az alábbi állításokat igazolom numerikus úton:

– Az n ponthoz tartozó pontpakolási struktúra merev részhalmazát leíró egyenletrendszernek pontosan egy $(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})_n^r$ megoldása létezik $(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{Y})_n^{*,r}$-ben.

– Az $(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})_n^r$ pontpakolás $n = 28, 29$-re valóban kiegészíthető egy-egy szabadon mozgó ponttal úgy, hogy az illető pont $(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{Y})_n^*$ megfelelő komponensében található.

– $(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})_n^r$ az egyetlen optimális pontpakolás $(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{Y})_n^{*,r}$*-ben.*

Irodalomjegyzék

[1] A.E. Csallner, T. Csendes, and M.Cs. Markót (2000), *Multisection in interval branch–and–bound methods for global optimization. I. Theoretical results*, J. Global Optimization 16, 371–392.

[2] M.Cs. Markót (2000), *An interval method to validate optimal solutions of the "packing circles in a unit square" problems*, Central European Journal of Operations Research 8, 63–78.

[3] M.Cs. Markót, *Optimal Packing of 28 Equal Circles in a Unit Square – the First Reliable Solution.* Publikálásra elfogadva a Numerical Algorithms folyóiratban. Elérhető: `http://www.inf.u-szeged.hu/~markot/opt28.ps.gz`.

[4] M.Cs. Markót and T. Csendes, *A New Verified Optimization Technique for the "Packing Circles in a Unit Square" Problems.* Publikálásra benyújtva. Elérhető: `http://www.inf.u-szeged.hu/~markot/impcirc.ps.gz`.

[5] M.Cs. Markót, T. Csendes, and A.E. Csallner (2000), *Multisection in interval branch–and–bound methods for global optimization. II. Numerical tests*, Journal of Global Optimization 16, 219–228.

[6] M.Cs. Markót, J. Fernández, L.G. Casado, and T. Csendes, *New interval methods for constrained global optimization.* Feltételesen elfogadva a Mathematical Programming folyóiratban. Elérhető: `http://www.inf.u-szeged.hu/~markot/mathprog.ps.gz`.