Alkalmazott Matematikai Lapok **22** (2004), 107–120.

GLOBÁLIS OPTIMALIZÁLÁS STIEFEL-SOKASÁGOKON – EGY ÉRDEKES DISZKRETIZÁLÁSI EREDMÉNY*

BALOGH JÁNOS, CSENDES TIBOR ÉS RAPCSÁK TAMÁS

Szeged, Szeged, Budapest

Rapcsák néhány korábbi dolgozatában Stiefel-sokaságokon adott optimalizálási problémákat tárgyalt, számos elméleti, és emellett alkalmazási, pl. statisztikai vonatkozásokkal is. Itt az általa is tárgyalt feladat egy speciális diszkretizálását mutatjuk be és vizsgáljuk, eredményül pedig a hozzárendelési feladat egy ekvivalens eseteként kapjuk meg. Ez önmagában is érdekes, de motivációt adhat ehhez néhány példa és numerikus eredmény – amelyeket szintén ismertetünk.

1. Bevezetés

Stiefel 1935-ben vezette be azt a differenciálható sokaságot, amely az összes $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \ldots, \mathbf{x}_k \in R^n$ ortonormált vektorrendszert tartalmazza, ahol R^n az n-dimenziós Euklideszi tér [29]. A Stiefel-sokaságok gyakorlati problémákhoz kapcsolódnak. Tekintsünk többdimenziós idősorokból származó megfigyeléseket, feltételezve, hogy a dimenziószámhoz viszonyítva kevés tényező határozza meg a viselkedésüket. A statisztikai vizsgálatok egyik célja ezeknek a hatásoknak az azonosítása. A statisztika hagyományos eszköze erre a célra a faktoranalízis, ami többdimenziós idősorok esetén pontatlan vagy hibás eredményeket is adhat, különösen, ha az idősorok komponensei között időtől függő összefüggés van. Ennek oka, hogy a faktoranalízist független megfigyelésekre dolgozták ki, mely függetlenség nem jellemző a többdimenziós idősorokra. Mindez új módszertan kidolgozását tette szükségessé, ami figyelembe veszi a megfigyelések dinamikáját is. A dinamikus faktoranalízis fogalmát Geweke [16] és Bánkövi, Veliczky, és Ziermann ([6, 7]) vezették be többdimenziós gazdasági idősorok vizsgálatára. Az azóta ebben a témában megjelent

*Köszönet az Országos Tudományos Kutatási Alapprogramok (OTKA T 034350, T 043241, és T 043276 projektek) és az 5. Európai Uniós Keretprogram APPOL II. Tematikus Hálózati Projekt (FP5, IST-2001-32007) támogatásáért.

munkák a hagyományos faktoranalízis bizonyos tulajdonságainak általánosításait tartalmazzák.

Bánkövi, Veliczky, és Ziermann ([6, 7]) megközelítését alapul véve, Bolla, Michaletzky, Tusnády és Ziermann heterogén kvadratikus alakok maximalizálását vizsgálták Stiefel sokaságokon, feltételezve, hogy a heterogén kvadratikus alakok pozitív definitek. A feladat strukturális vizsgálata során megadták az elsőrendű és a másodrendű szükséges optimalitási feltételeket, valamint egy globális másodrendű szükséges feltételt, és globálisan konvergens, iterációs algoritmust dolgoztak ki kritikus pont meghatározására [9]. Eredményeiket elsősorban mátrixelméleti eszközök felhasználásával érték el. Rapcsák a fenti optimalizálási feladatot kvadratikus célfüggvényű és kvadratikus egyenlőségfeltételeket tartalmazó optimalizálási feladatként fogalmazta meg, amire a Riemann-geometria eszköztárát és ezen keresztül a globális Lagrange-multiplikátor-szabályt alkalmazva, lokális és globális, első- és másodrendű, szükséges és elegendő optimalizálási feltételeket kapott, valamint klasszikus, nemlineáris optimalizálási módszerek erre a feladatra vonatkozó kiterjesztéseit [25, 26].

Márkus, Berke, Kovács és Urfer [23] a dinamikus faktoranalízis módszerének alkalmazását és a kapott eredményeket ismertetik többdimenziós környezeti idősorok esetén. Helmke és Moore könyvében [17] a dinamikus rendszerek strukturális stabilitásának a vizsgálata a Rayleigh-hányados és az általánosított Rayleigh-hányados Stiefel-sokaságokon történő optimalizálására vezet. Edelman és társszerzői elektronikus rendszerek tervezését említik mint a Stiefel-sokaságokon történő optimalizálás egyik lehetséges alkalmazását [13]. A statisztikai alkalmazások közül a főkomponens analízist és a statisztikai vizualizálást lehetne még megemlíteni [27]. Megjegyezzük, hogy gyakorlati problémák független változócsoportjainak modellezésében a Stiefel-sokaságokat alkotó ortogonális vektorrendszerek hatékony eszközt jelenthetnek.

A dolgozatban Stiefel-sokaságokon adott problémák globális optimalizálási feladatait tárgyaljuk. Stiefel-sokaságok fölötti optimalizálást tárgyalt és elemzett Rapcsák néhány korábbi dolgozatában [25, 26, 27]. Az általa, valamint Bolla és szerzőtársai által [9] tanulmányozott feladatot vizsgáljuk ezen dolgozatban, illetve néhány globális optimalizálási módszer is elemzésre kerül Stiefel-sokaságokon [1, 2, 3, 4, 5]-beli eredményeink alapján. Másként fogalmazva, egy Stiefel-sokaságokon megadott globális optimalizálási problémát tanulmányoztunk elméletileg és numerikusan, globális optimalizálási eszközökkel, továbbá globális optimalizálási algoritmusok, szoftverek tesztelésére jól használható, vizsgálható tesztfüggvényeket adunk meg. Itt megvizsgáljuk, elemezzük – utóbbiakat is beleértve – a probléma néhány speciális esetét.

Tekintsük a következő optimalizálási problémát:

$$\min \sum_{i=1}^{k} \mathbf{x}_i^T A_i \mathbf{x}_i \tag{1}$$

$$\mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j = \delta_{ij}, \qquad 1 \le i, j \le k, \tag{2}$$

$$\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^n, \qquad i = 1, \ldots, k, \quad n \ge 2,$$

ahol A_i, $i = 1, \dots, k$, szimmetrikus mátrixok, és δ_{ij} a Kronecker-féle delta. A továbbiakban jelölje $M_{n,k}$ azt a halmazt, amely az n-dimenziós Euklideszi tér összes k elemű ortonormált vektorrendszeréből áll.

Vezessük be a következő jelöléseket:

$$\mathbf{x} = \left(\mathbf{x}_1^T, \mathbf{x}_2^T, \dots, \mathbf{x}_k^T\right)^T \in \mathbb{R}^{kn},$$

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{k} \mathbf{x}_i^T A_i \mathbf{x}_i.$$

A Stiefel-sokaságok szerkezete a következő módon jellemezhető:

1. Tétel [26]. *Az $M_{n,k}$ halmaz kompakt, $kn - \frac{k(k+1)}{2}$ dimenziós, végtelen sokszor differenciálható sokaság minden olyan pozitív egészekből álló (n,k) párra, amelyekre $k \leq n$ teljesül. A Stiefel-sokaságok a $k < n$ esetekben összefüggőek, a $k = n$ esetben két összefüggő komponensből állnak.*

Az ortogonalitás előírásából következően $n \geq k \geq 2$.

A vizsgálandó (1)–(2) optimalizálási probléma speciális típusú, kvadratikus egyenlőség-feltételekkel adott kvadratikus célfüggvényű feladat. Az optimalizálási irodalom szerint nehéz erre általános esetben jó közelítő megoldást (és lehetséges megoldásokat is) adó hatékony módszert adni [18]. Ez indokolja az eredeti probléma néhány speciális esetének tanulmányozását. Az [5] munka alapján megoldási módszereket és technikákat adunk meg az (1)–(2) probléma numerikus optimalizálásához. A dolgozat fejezetei a következő módon tagolódnak: először az optimumpontok struktúráját adjuk meg néhány speciális esetben (lásd még [1]) a [9, 25, 27]-ben tárgyalt és itt is tárgyalandó kvadratikus feladatra, amiből néhány redukciós ötlet, lehetőség és eredmény adódik. Külön foglalkozunk azzal az esettel, amikor a célfüggvény együtthatómátrixai diagonálisak. Mielőtt ezt megtennénk, motivációként, illetve a probléma numerikus nehézségeinek megvilágítása céljából összefoglaljuk a numerikus vizsgálatát ([5] alapján), annak tapasztalatait és nehézségeit különböző technikákat használó numerikus eszközökkel, szoftverekkel. Ez lesz a kiindulópont ahhoz, hogy a dolgozat 3. részében ismert minimumhelyekkel és -értékekkel rendelkező speciális eseteket vizsgáljunk. Ennek kiterjesztéseként [3]-ban tesztfüggvényeket adtunk meg, amik a globális optimalizálásban nagy jelentőséggel bírnak [14, 15].

A dolgozat fő eredményeként a probléma egy olyan megszorítását vetjük fel és elemezzük (4. fejezet), amely egyben annak egy diszkretizálását is jelenti és így egy, a jól ismert hozzárendelési feladattal ekvivalens problémát eredményez.

2. Előzetes numerikus eredmények – mint motiváció

Néhány redukciós lépés és (1)–(2) probléma numerikus megoldásai kerültek bemutatásra [1, 3, 5]-ben. A számítógépes futtatások eredményeit itt foglaljuk össze, ami az (1)–(2) probléma szerkezetének megvilágítását is célozza. Az ennek illusztrálására készült, csatolt numerikus tanulmány (lásd [5]-ben is) két különböző típusú globális optimalizálási algoritmust megvalósító programra épült. Egyrészt, egy intervallumos globális optimalizálási eszköz megbízható eljárására [11, 19, 30, 31], másrészt, hagyományos sztochasztikus globális optimalizálási módszerre [8, 12]. Ennek tanulságai szolgálhatnak motivációul is, először ezeket foglaljuk össze röviden.

Az első lépés célja garantált megbízhatóságú eredmények elérése volt. Amint azt elemezzük (és ahogy [5]-ben beszámoltunk róla) ennek nehézségei, illetve a nagy számítási költségben rejlő nehézségek ebben az esetben nagyrészt a korlátozó feltételek ellenőrzésében rejlenek. Emiatt létjogosultsága lehet más technikák, például büntetőfüggvények alkalmazásának, illetve a redukciós lehetőségekben rejlő felgyorsításnak. Érdemes megemlíteni, hogy a GlobSol program [11, 19] csak polárkoordinátás helyettesítések után adott garantált megoldást. Ilyenfajta transzformáció nélkül egy $M_{3,3}$ fölött definiált hasonló probléma több napig futott – garantált megoldás elérése nélkül.

Ezért elkerülhetetlennek látszik a redukciós lépések használata a numerikus eszközök megbízhatóvá és hatékonyabbá tételéhez. Néhány gyorsítási módosítást javasolunk, és újból fókuszálunk a probléma azon esetére is, amikor az együtthatómátrixok a célfüggvényben diagonálisak.

A feladat megbízható numerikus megoldásának nehézségeit [2]-ben és [5]-ben részletesen illusztráltuk: ahogy ott beszámoltunk tapasztalatainkról, [3] egy egyszerű példája, amely $M_{2,2}$-n adott, diagonális együtthatómátrixú (1)-típusú célfüggvénnyel kb. 3 millió függvény-kiértékelést igényelt, melyek túlnyomó többsége (2,9 millió) a korlátozó feltételek ellenőrzése miatt volt szükséges, ez az ún. „dense constraint" kiértékelés, amit a GlobSol szoftverrel végeztünk el. Az itt eredményül kapott intervallumok, „boxok" nem ellenőrzöttek, bár megvizsgálva őket kimutatható, hogy tartalmazzák az optimális megoldást. Csak a polárkoordinátás transzformáció utáni futtatás adott ellenőrzött megoldásokat. Egy nem túl bonyolult, $M_{3,3}$-n definiált optimalizálási probléma $3,5$ napnyi CPU-időt igényelt számítógépünkön és 36 különböző, nem ellenőrzött megoldást szolgáltatott a GlobSol program alkalmazása során [30, 31]. Másrészt az ismert megoldások [3, 5] körüli megfelelő, szintén nemellenőrzőtt „boxok" burka kb. 10^{-24}-szer kisebb „térfogatú", mint az induló n-dimenziós intervallumé. Ezen értékek helyessége nagyon nehezen ellenőrizhető, mivel ez a feladat ekvivalens az eredeti problémával. Ezért szükséges speciális problémák vizsgálata $M_{n,k}$-n algoritmusaink hatékonyságának és megbízhatóságának tesztelésére, „mérésére". Ilyeneket adtunk meg [3]-ban, de szolgálhatnak hasonló célokat az itt vizsgálandó partikuláris esetek is. Azok a tesztfeladatok, amelyek tetszőleges $M_{n,k}$ Stiefel-sokaságon értelmezhetők, és ahol az optimumpontok és -érték ismertek, könnyebben kezelhetőek. Ezek egyrészt szolgálhatnak a numerikus eszközök „jóságának" mérésére, másrészt kezdőértékül szolgálhatnak az ezt igénylő numerikus algoritmusok, például a Branch-and-Bound típusú módszereknél vagy olyan numerikus algoritmusoknál ahol ezt az algoritmus igényli [10] vagy ahol ez másfajta előnnyel jár [21]. Emiatt van szükségünk megfelelő tesztproblémákra és speciális feladatokra, ismert megoldáshalmazzal.

A numerikus motiváció mellett ez a másik érv a probléma speciális és partikuláris esetei vizsgálata mellett, ami a jelen dolgozat tárgya is.

Továbbá [2, 3]-ban és [5]-ben láttuk, és itt a 3. fejezetben is szerepel, hogy néhány probléma esetén az optimális megoldások az n-dimenziós koordinátatengelyekre esnek, azaz, a vektorkomponensek egyik koordinátája 1 vagy -1, és az összes többi $(n-1)$ koordinátájuk zérus. Látni fogjuk, mint [3, 5]-ben, hogy ha az (1) célfüggvényben szereplő együtthatómátrixok diagonálisak $M_{2,2}$ esetén, akkor az összes optimális megoldás az n-dimenziós hipergömb koordináta-tengelyekkel vett metszéspontjai közül kerül ki (kivéve az elfajuló eset, amikor a célfüggvény konstans az egész $M_{2,2}$-n). Más szavakkal, nem csak a megadott problémák és tesztfeladatok rendelkeznek ilyen tulajdonsággal, de más problémáknak is lehet hasonló a megoldás-szerkezete.

Ez utóbbi észrevétel adta az ötletet [3]-ban a lehetséges megoldások halmazának megszorításánál, és itt ebben a dolgozatban is. Elsőként a fenti (1)–(2) típusú probléma egy partikuláris esetét tekintjük (a legkisebb méretű érdekes esetben) és azt vizsgáljuk, hogy milyen típusú elemi geometriai eszközök alkalmazhatók a probléma egyszerűsítésére. A következő lépésben elemezhetők a választott numerikus eszközök, és megvizsgálható, hogy ezek közül melyek alkalmazhatók ilyen típusú példákra, és melyek az általános, tetszőleges dimenziós esetekben.

3. Néhány bevezető példa és megoldásaik – speciális esetekben

Bevezetésként néhány egyszerű példát elemzünk. Megadjuk az optimumpontok halmazának szerkezetét speciális diagonális problémák esetén. Ez segít a feladat szerkezetének feltárásában, másrészt lehetőséget ad néhány lehetséges egyszerűsítési, redukciós trükkre is. (A nagy számításigény miatt ezek használata elengedhetetlennek látszik.)

Ezen belül a diagonális együtthatómátrixok esetét is vizsgáljuk. Megadjuk a megoldást, és az optimumpontok halmazának szerkezetét, az $M_{2,2}$-n értelmezett diagonális mátrixokkal megadott kvadratikus célfüggvények esetére. (1) ezen speciális esetei gyakran előadódhatnak valódi alkalmazásoknál [26].

1. Példa. Tekintsük a következő feladatot, [26] egy feladatát:

$$\min f(\mathbf{x}) = x_1^2 + \frac{1}{2}x_2^2 + x_3^2 + \frac{3}{2}x_4^2$$

feltéve, hogy

$$\begin{aligned} &x_1^2 + x_2^2 = 1, \\ (3) \qquad &x_3^2 + x_4^2 = 1, \end{aligned}$$

$$x_1x_3 + x_2x_4 = 0,$$
$$\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3, x_4)^T \in \mathbb{R}^4.$$

Megmutatjuk, hogy $M_{2,2}$-n a feladat két fontos (keresett) jellemzője, a minimumhelyek és a maximumhelyek halmaza (a célfüggvény megfelelő függvényértékeivel együtt) explicit módon kiszámíthatók az (1) problémához. Az egyenlőségfeltételekből következik, hogy

$$\begin{aligned} x_1^2 &= 1 - x_2^2, \\ x_3^2 &= 1 - x_4^2, \\ x_1^2x_3^2 &= x_2^2x_4^2, \end{aligned} \tag{4}$$

innen $x_1^2(1 - x_4^2) = (1 - x_1^2)x_4^2$, azaz,

$$x_1^2 = x_4^2 \quad \text{és} \quad x_2^2 = x_3^2. \tag{5}$$

Összevetve ezt (1) korlátozó feltételeivel nyerjük, hogy

$$\left.\begin{aligned} x_1 &= -x_4 \\ x_2 &= x_3, \end{aligned}\right\} \quad \text{vagy} \quad \left\{\begin{aligned} x_1 &= x_4 \\ x_2 &= -x_3. \end{aligned}\right. \tag{6}$$

Ilymódon az $M_{2,2}$ Stiefel-sokaság két komponense a következő alakban áll elő:

$$\begin{aligned} M_{2,2} = \{&\mathbf{x} \in \mathbb{R}^4 \mid x_1^2 + x_2^2 = 1,\ x_1 + x_4 = 0,\ x_2 - x_3 = 0\} \cup \\ \{&\mathbf{x} \in \mathbb{R}^4 \mid x_1^2 + x_2^2 = 1,\ x_1 - x_4 = 0,\ x_2 + x_3 = 0\}. \end{aligned} \tag{7}$$

Kihasználva a fenti egyenleteket, azt nyerjük, hogy a célfüggvény $M_{2,2}$-n a következő:

$$x_1^2 + \frac{1}{2}x_2^2 + x_3^2 + \frac{3}{2}x_4^2 = \frac{5}{2}x_1^2 + \frac{3}{2}x_2^2 = x_1^2 + \frac{3}{2}(x_1^2 + x_2^2) = x_1^2 + \frac{3}{2},$$

így könnyen látható módon a globális minimum értéke csakúgy, mint az eredeti feladatnál $3/2$, az $x_1 = 0$ pontban. Az eredeti feladat globális minimumhelyeire ebből a

$$(0, \pm 1, \pm 1, 0)^T$$

alakú $M_{2,2}$-beli pontok adódnak, míg négy globális maximumhelyként a

$$(\pm 1, 0, 0, \pm 1)^T$$

alakú pontok, ahol a globális maximum értéke $5/2$.

Megjegyezzük, hogy itt mindegyik esetben az előjeleknél az összes eset lehetséges, nincs egyéb függőség, kapcsolat köztük (így a megfelelő értékek között sem).

2. Példa. A következő optimalizálási feladatunk:

$$\min f(\mathbf{x}) = 2x_1^2 + x_2^2 - 2x_3^2 + x_4^2, \quad x \in M_{2,2}. \tag{8}$$

Kihasználva ismét a (4)–(5)-beli technikát, az f függvény

$$2x_1^2 + x_2^2 - 2x_3^2 + x_4^2 = 3x_1^2 - x_2^2$$

alakban adható meg $M_{2,2}$-n. Az első korlátozó feltételt kihasználva (lásd (1), 1. Példa) egyváltozós célfüggvényt kapunk. Egy másik lehetőség közvetlenül a $3x_1^2 - x_2^2$ függvényt tekinteni; az egységkörön ennek szóbajöhető legkisebb lehetséges értéke egyenlő -1-gyel. A célfüggvény ezt az alsó korlátot a $(0, \pm 1)^T$ pontokban veszi fel, és mivel (pl. (4)-ból láthatóan) a hozzájuk tartozó négy

$$(0, \pm 1, \pm 1, 0)^T$$

pont az eredeti négyváltozós feladat lehetséges megoldásai, így ezek globális minimumhelyek is, és ebből következően a minimum értéke $M_{2,2}$-n -1-gyel egyenlő. Könnyen belátható (például az utolsó függvényalakból), hogy minden más pontban a függvényérték nagyobb, így az eredeti, négyváltozós feladat négy megoldásával annak összes megoldását megkaptuk.

Hasonlóan belátható az is, hogy az eredeti négyváltozós feladat globális maximumhelyei a

$$(\pm 1, 0, 0, \pm 1)^T$$

pontok, és csak azok, a maximum értéke pedig 3.

Ennek kiterjesztéseként a diagonális A_i, $i = 1, \ldots, k$, együtthatómátrixok esete könnyen tárgyalható teljesen analóg módon (lásd [1]), ekkor az optimumpontok minden koordinátája szintén a $\{0, +1, -1\}$ halmazból kerül ki (kivéve azt az elfajuló esetet, amikor minden lehetséges megoldás egyben optimális megoldás is). Az általános (1)–(2) feladat optimumpontjai szerkezetének jellemzése $M_{2,2}$-n szintén történhet elemi eszközökkel, például függvény-diszkusszióval; [5]-ben ennek segítségével kritériumot adtunk az optimumpontok számának végességére $M_{2,2}$-n.

Az ismert minimumhelyekkel és -értékekkel rendelkező feladatok és tesztfüggvények $M_{n,k}$-n történő megadása kapcsolódik a diagonális mátrixokkal megadott kvadratikus célfüggvényű feladatokhoz, mivel az így definiált feladatok megoldása(i) szintén a $\{0, +1, -1\}$ értékekből állnak.

A speciális korlátozó feltételekkel rendelkező tesztfüggvényeket minden $M_{n,k}$ Stiefel-sokaság fölött értelmeztük.

Ezen tesztfüggvények előzetes kézi számítással könnyen meghatározható minimumhelyekkel és -értékekkel rendelkeznek. Ez a terület, nevezetesen a tesztfüggvények megadása, fontos szerepet játszik a globális optimalizálásban. A Floudas–Pardalos könyvben [14] megadott tesztproblémák között nem túl sok korlátozó feltételekkel rendelkező probléma található, és az ezen körbe sorolhatók is túlnyomórészt ipari alkalmazásokból származnak [18].

Az általunk javasolt tesztfüggvények jól használhatók az optimalizálási módszerek numerikus vizsgálatánál, mivel minden optimumpont könnyen meghatározható. Ezek és az 1. fejezetben megadott problémák megoldásai is a $\{0, +1, -1\}$ halmaz elemeiből állnak.

4. A lehetséges megoldások halmazának megszorítása – diszkretizálása

Ebben a fejezetben $M_{n,k}$-n a lehetséges megoldások halmazának egy megszorítását – pontjainak egy speciális megszorításán keresztül – vetjük fel. A (2) feltételek speciális diszkretizálása kvadratikus célfüggvény esetén NP-nehéz probléma, amiből kvadratikus hozzárendelési probléma [28] adódik.

Az előző fejezetben is, illetve [5]-ben a példáinkban többhelyütt az optimális megoldások minden vektora egy n-dimenziós koordinátatengelyen helyezkedett el (azaz egy koordinátájuk 1 vagy -1, és a többi $n-1$ darab koordináta zérus volt). Amint az belátható az előző fejezet alapján, $M_{2,2}$-n az optimális megoldások típusa is ilyen, ha az együtthatómátrixok diagonálisak (kivéve azt az elfajuló esetet, amikor a függvény konstans az egész $M_{2,2}$-n) [1]. Ilyen esetekben és az általunk konstruált tesztproblémáknál is minden megoldás az n-dimenziós hipergömb és a koordinátatengelyek metszéspontjainak halmazából kerül ki. Másként fogalmazva, nemcsak az adott problémák, és tesztproblémák rendelkeznek ilyen típusú megoldásokkal, de más problémák is ebbe az osztályba tartozhatnak. Az általunk tárgyalt feladatok azzal a közös tulajdonsággal bírnak, hogy a célfüggvény csak négyzetes tagokat tartalmaz.

Ezen tény szolgált motivációul ahhoz, hogy megszorítsuk a probléma lehetséges megoldásainak halmazát. A lehetséges megoldások halmaza legyen $M_{n,k}$ egy olyan részhalmaza, ahol a lehetséges megoldások pontjaira még azt a feltételt is előírjuk, hogy az n-dimenziós koordinátengelyeknek is pontjai legyenek (mind a k vektor). Az így kapott probléma vizsgálatát – ahol továbbra is az (1) célfüggvény szerepel, de a továbbiakban immár ezen, a továbbiakban L'-vel jelölt megszorításán definiált – három lépésben fogjuk elvégezni. Elsőként olyan $n \times n$-es problémákat tekintünk, amelyeknél a célfüggvényben csak négyzetes tagok szerepelnek (a diagonális mátrixok esete). Ennek megoldása után a hasonló típusú, de ezúttal már $n \times k$ méretű problémák esetét vizsgáljuk meg, és végül az általános problémát. Mindegyik tárgyalt esetben a lehetséges megoldások halmaza a fönti módon megszorított. Amikor a célfüggvény nem (1) típusú, akkor a megoldáshalmaz szerkezete nyitott kérdés még abban az esetben is, ha a lehetséges megoldásokat megszorítjuk az L'-vel jelölt halmazra.

Mire jó egy ilyen megszorítás? Egyrészt, felhasználható az f^* optimumérték közelítésére, másrészt, ezen közelítés alkalmazható néhány optimalizálási eszköz konvergenciájának gyorsítására is (lásd, pl. [10]). Térjünk vissza a fönt említett három lépéses eljárásra. (2) lehetséges megoldásainak fönti, L' megszorítása a hozzárendelési feladatra vezeti vissza a problémát.

2. ÁLLÍTÁS. *Ha az (1)–(2) problémában $M_{n,k}$ lehetséges pontjainak halmazát megszorítjuk arra az L' halmazra, amely az n-dimenziós hipergömb koordinátatengelyekkel vett metszéspontjainak halmaza, akkor az (1) és az így L'-re megszorított (2) által megadott feladat ekvivalens a hozzárendelési problémával.*

Bizonyítás. A bizonyítást három lépésben végezzük. Elsőként azt a speciális esetet vizsgáljuk, amikor az $M_{n,n}$ sokaságon ($k = n$) vagyunk, és az (1) célfüggvény csak diagonális A_i ($i = 1, \ldots, k = n$) együtthatómátrixokat tartalmaz. Ezután felhasználva az első állítást, az könnyen általánosítható $M_{n,k}$-ra (ahol immáron n és k tetszőleges), még mindig a diagonális együtthatómátrixok esetére. A harmadik lépésben az első és második állítást kihasználva befejezzük a bizonyítást. Ez a (tetszőleges) $M_{n,k}$ fölötti tetszőleges alakú (1)-beli mátrixok esete.

1. Az (1)–(2) probléma $M_{n,n}$-en ekvivalens a hozzárendelési feladattal, ha az együtthatómátrixok diagonálisak, és a lehetséges megoldások L' halmaza az n-dimenziós hipergömb és R^n koordinátatengelyei metszéspontjainak halmaza. A jól ismert hozzárendelési feladat a következőképpen adható meg:

$$\min \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} x_{ij} a_{ij} \tag{9}$$

úgy, hogy:

$$\sum_{t=1}^{n} x_{it} = 1 \quad (i = 1, \ldots, n), \tag{10}$$

$$\sum_{t=1}^{n} x_{tj} = 1 \quad (j = 1, \ldots, n), \tag{11}$$

$$x_{ij} \in \{0, 1\} \quad (i = 1, \ldots, n;\ j = 1, \ldots, n), \tag{12}$$

ahol az a_{ij} együtthatók egy $n \times n$-es A' mátrix elemei. Azt kell megmutatnunk, hogy az (1) célfüggvény a (2) korlátozó feltételek mellett (9)–(12)-et eredményezi, ezen új, megszorított L' halmazon.

Először is megjegyezzük, hogy minden x_i $n - 1$ darab zérus komponenssel rendelkezik, és pontosan egy eleme egyenlő eggyel, vagy mínusz eggyel.

Feleltessük meg a hozzárendelési feladat A' mátrixának a_{ij} elemeit (1) $(A_i)_{jj}$ elemeinek, továbbá a hozzárendelési feladat x_{ij} változóinak az (1)-beli $\mathbf{x}_i$ j-dik elemét. Ezen feltételek mellett a hozzárendelési feladat (10)–(12) feltételei egybeesnek az eredeti probléma (2) korlátozó feltételeivel, míg a (9) célfüggvény pontosan az eredeti (1) célfüggvénnyel egyezik meg.

2. A fönti állítás kiterjeszthető az $M_{n,k}$ Stiefel-sokaságra is: az (1)–(2) probléma $M_{n,k}$-n az előző megszorítás mellett ekvivalens egy hozzárendelési feladattal.

Ennek megmutatásához az eredeti, $k \times n$ mátrixméretű probléma helyett tekintsünk egy olyan hozzárendelési problémát, amelyben a mátrix mérete $n \times n$, úgy, hogy töltsük ki a hiányzó $n-k$ sort $M+1$ értékekkel, ahol M az első k oszlop elemeinek abszolútérték-összege.

Megoldva az ily módon nyert hozzárendelési feladatot a „magyar módszer" alkalmazásával [20], és a megoldásból elhagyva az utolsó $n-k$ vektort, a megmaradó k darab vektor-n-esből álló rendszer pontosan az eredeti probléma megoldása lesz, amint az könnyen látható.

Térjünk most vissza a célfüggvény szempontjából az általános esetre: azaz az általános (1)–(2) problémát fogjuk tekinteni, megszorítva $M_{n,k}$-t a koordinátatengelyekkel vett metszéspontjaira.

3. Elegendő azt megmutatni, hogy az utóbbi probléma, azaz amikor az (1)–(2) feladatot vizsgáljuk, ahol (1) immáron tetszőleges alakú, (2) pedig L'-re megszorított, ekvivalens egy olyan problémával, ahol a célfüggvény csak $x_i x_i$ kifejezéseket tartalmaz, amelyek együtthatója $(A_i)_{ii}$ minden i-re. Ezen második feladat ugyanis, mint azt fönt beláttuk már, ekvivalens a hozzárendelési feladattal, így ezzel az egész állítást belátnánk.

Vizsgáljuk meg ehhez (1)-et az L' részhalmazon. L' minden vektora speciális tulajdonságú, nevezetesen egy kivételével minden koordinátája 0. Ezért, az (1) célfüggvényben minden $x_{ij}x_{jl}$ kifejezés együtthatója zérus, kivéve az x_{ii}^2 típusú kifejezéseket. Formálisan:

$$\sum_{i=1}^{k} \mathbf{x}_i^T A_i \mathbf{x}_i = \sum_{i=1}^{k} \left(\sum_{j=1}^{n} \sum_{l=1}^{n} x_{ij} (A_i)_{jl} x_{il} \right) = \sum_{i=1}^{k} x_{ii} (A_i)_{ii} x_{ii} = \sum_{i=1}^{k} x_{ii}^2 (A_i)_{ii}.$$

Ebből következik, hogy a nyert probléma ekvivalens a hozzárendelési feladattal, ahogy azt állítottuk. □

Visszatérve az általános esetre, fölvethető a kérdés: hogyan oldható meg egy általános feladat (ahol a célfüggvény nem feltétlenül az (1) alakban adott), $M_{n,k}$ fenti L' részhalmazára megszorítva.

Ebben a tetszőleges célfüggvényű esetben, ha $n = k$, és a feladat $0-1$ értékű megszorítását tekintjük a $\{0, \pm 1\}$ megszorítás helyett, akkor nyilván szintén egy hozzárendelési feladat feltételrendszerét kapjuk, azaz egy olyan feladatot, amelynek feltételrendszere a hozzárendelési feladatéval egyezik meg. Az optimalizálási feladatunk ekkor: keresendő a célfüggvény minimuma ezen speciális $0-1$ (10)–(12) feltételek mellett. A hozzárendelési feladathoz hasonlóan a lehetséges megoldások halmaza megadható az $\{1 \dots n\}$ halmaz egy permutációjával is. (Ez mátrix alakban úgy is megkapható, hogy 1-eseket írunk a megfelelő helyekre, míg az összes többi helyre 0-kat.) Ha $n \neq k$ akkor a feladatnak, akár lineáris célfüggvényt tekintve is több speciális esete, alkalmazása van, például a szállítási feladat, ami a lineáris hozzárendelési feladat sok speciális esete közül az egyik [20].

Ha a célfüggvény tetszőleges kvadratikus, például a

$$\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\sum_{t=1}^{n}\sum_{r=1}^{n} a_{ij}\mathbf{x}_{it}\mathbf{x}_{jr}b_{tr}$$

függvényt tekintjük, akkor a korlátozó feltételek fenti $(0-1)$ értékű megszorítása esetén is NP-nehéz problémát nyerünk, az ún. kvadratikus hozzárendelési feladatot (lásd pl. [24] vagy [28]). Erre számos fontos elméleti eredmény található az irodalomban. Pardalos és szerzőtársai áttekintő tanulmányában például 254 hivatkozás található a kapcsolódó publikációkra.

Az általunk tekintett (1)–(2) probléma vizsgálata önmagában is érdekes $M_{n,k}$ ezen L' megszorításával, másrészt, ennek a vizsgálatnak számos járuléka, haszna lehet. Amint azt fentebb láttuk, a megoldás diagonális együtthatómátrixok esetén megadható. Általánosítva ezt, ezen technika tetszőleges együtthatómátrixú feladatokra is alkalmazható: megoldva az L'-re megszorított feladatot, az optimum egy közelítése nyerhető. Megjegyezzük ugyanakkor, hogy ezen – a lehetséges pontok halmazának ezen L' megszorításával kapott – feladat megoldása tetszőlegesen távol lehet az eredeti, az $M_{n,k}$-n értelmezett feladatétól.

Egy másik nyitott kérdés az utóbbi észrevétellel kapcsolatban, hogy vajon adható-e jó heurisztika az optimum értékének, f^*-nak a közelítésére abban az esetben, ha a probléma lehetséges megoldásainak halmazát megszorítjuk a koordinátatengelyek pontjaira, hasonlóan a csak négyzetes tagokkal rendelkező problémák esetéhez.

3. Példa. Tekintsünk egy feladatot az $M_{3,2}$ sokaságon, a következő célfüggvénnyel:

$$3x_{11}^2+6x_{12}^2+4x_{13}^2+7x_{11}x_{12}-4x_{11}x_{13}-18x_{12}x_{13}-$$

$$-3x_{21}^2+5x_{22}^2+3x_{23}^2-6x_{21}x_{22}+7x_{21}x_{23}-12x_{22}x_{23},$$

ami minimalizálandó a 0-1 koordinátaértékű pontokra megszorított halmazon.

A feladat tulajdonképpen egy

$$A_1=\begin{pmatrix} 3 & 7/2 & -2\\ 7/2 & 6 & -9\\ -2 & -9 & 4\end{pmatrix},$$

$$A_2=\begin{pmatrix} -3 & -3 & 7/2\\ -3 & 5 & -6\\ 7/2 & -6 & 3\end{pmatrix}$$

mátrixokkal adott (1)–(2) típusú feladat ((2)-nek $0-1$ megszorítása mellett).

Az utolsó eredmény szerint ezen feladat optimális megoldása

$$\mathbf{x}^*=\left((0,0,1)^T,(1,0,0)^T\right)$$

lesz, és az optimum értéke 1.

5. Összefoglalás

Korábban megmutattuk, hogy egy egyszerű $M_{3,3}$ Stiefel sokaságon definiált 9-változós optimalizálási probléma megoldása több mint 3 napig fut egy átlagos számítógépen, ha megbízható megoldást követelünk meg. Ez az oka annak, hogy a felgyorsítási lehetőségeket érdemes elméletileg vizsgálni, akár geometriai redukciókban, akár numerikus módszerekben. Ehhez megfelelő tesztfeladatok szükségesek. Dolgozatunkban előre ismert optimális megoldásokkal rendelkező (teszt)problémákat javasoltunk, melyek a numerikus eszközök „jóságának", hatékonyságának mérésére alkalmazhatók. Egy speciális esetet, a diagonális A_i $(i = 1, \ldots, k)$ mátrixok esetét részletesebben is vizsgáltuk. Ezen túlmenően a megengedett halmaz egy érdekes megszorítását adtuk meg, ami a hozzárendelési feladattal ekvivalens, ahol a minimumpontok száma véges, bár exponenciális az input méretében. Egy érdekes további kérdés, hogyan jellemezhető az optimumpontok halmaza az $M_{n,k}$-n. Szándékaink szerint később más numerikus számítási eszközöket is kipróbálunk ilyen típusú feladatok megoldására, ezen belül intervallum-matematikán alapuló, korlátozó feltételeket kezelő globális optimalizálási módszert is [21, 22].

Hivatkozások

[1] Balogh, J., "Global optimization on Stiefel manifolds – some particular problem instances", *Proceedings of ICAI'2004,* közlésre benyújtva, 2004.
Elérhető: `http://www.jgytf.u-szeged.hu/~balogh/publist.html`.

[2] Balogh, J., Csendes, T. and Rapcsák, T., "Global optimization on Stiefel manifolds", *NMCM-2002 Book of Abstracts,* Miskolc, Hungary (2002), 19–21.

[3] Balogh, J., Csendes, T. and Rapcsák, T., Some global optimization problems on Stiefel manifolds, *Journal of Global Optimization,* megjelenés alatt, 2004.

[4] Balogh J., Rapcsák T., Csendes T. és Tóth B., „Globális optimalizálás Stiefel-sokaságokon", *XXV. Magyar Operációkutatási Konferencia Előadáskivonatai,* Debrecen (2001), 14–15.

[5] Balogh, J. and Tóth, B., Global optimization on Stiefel manifolds: a computational approach, *kézirat, előkészületben a Central European Journal of Operational Research számára,* 2004.
Elérhető: `http://www.jgytf.u-szeged.hu/~balogh/publist.html`.

[6] Bánkövi, Gy., Veliczky, J. and Ziermann, M., "Dynamic models for prediction of the development of national economies", in: *Models and decision making in national economies,* eds.: Janssen, J. M. L., Pau, L. F. and Straszak, A., North-Holland, Amsterdam (1979), 257–267.

[7] Bánkövi, Gy., Veliczky, J. and Ziermann, M., "Dynamic factor analysis", *Karl Marx University of Economics,* Budapest (1982), pp. 81.

[8] Boender, C. G. E., Rinnooy Kan, A. H. G., Timmer, G. T. and Stougie, L., A stochastic method for global optimization, *Mathematical Programming* **22** (1982), 125–140.

[9] Bolla, M., Michaletzky, G., Tusnády, G. and Ziermann, M., Extrema of sums of heterogeneous quadratic forms, *Linear Algebra and its Applications* **269** (1998), 331–365.

[10] Casado, L. G., García, I. and Csendes, T., A new multisection technique in interval methods for global optimization, *Computing* **65** (2000), 263–269.

[11] Corliss, G. F. and Kearfott, R. B., "Rigorous global search: Industrial applications", in T. Csendes (editor): *Developments in Reliable Computing,* Kluwer, Dordrecht, (1999), 1–16.

[12] Csendes, T., Nonlinear parameter estimation by global optimization – efficiency and reliability, *Acta Cybernetica* **8** (1988), 361–370.

[13] Edelman, A., Arias, T. A. and Smith, S. T., The geometry of algorithms with orthogonality constraints, *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications* **20** (1998), 303–353.

[14] Floudas, C. A. and Pardalos, P. M. "A Collection of Test Problems for Constrained Global Optimization Algorithms", *Lecture Notes in Computer Science 455,* Springer-Verlag, Berlin (1990).

[15] Floudas, C. A., Pardalos, P. M., Adjiman, C. S., Esposito, W. R., Gumus, Z. H., Harding, S. T., Klepeis, J. L., Meyer, C. A. and Schweiger, C. A., *Handbook of Test Problems for Local and Global Optimization* (Kluwer, Dordrecht, 1999).

[16] Geweke, J. F., "The dynamic factor analysis of economic time series models", in: *Latent variables in socio-economic models,* eds.: Aigner, D. J. and Goldberger, A. S., North-Holland, Amsterdam (1977), 365–382.

[17] Helmke, U. and Moore, J. B., *Optimization and Dynamical Systems* (Springer-Verlag, Berlin, 1994).

[18] Horst, R. and Pardalos, P. M., *Handbook of Global Optimization* (Kluwer, Dordrecht, 1995).

[19] Kearfott, R. B., *Rigorous Global Search: Continuous Problems* (Kluwer, Dordrecht, 1996).

[20] Klafszky E. és Terlaky T., Magyar Módszer típusú algoritmusok Lineáris Programozási feladatok megoldására, *Alkalmazott Matematikai Lapok* **12** (1986), 1–14.

[21] Markót, M. Cs., Fernandez, J., Casado, L. G. and Csendes, T., New interval methods for constrained global optimization, Mathematical Programming, közlésre elfogadva, 2004. Elérhető: `http://www.inf.u-szeged.hu/~markot/publ.html`.

[22] Markót, M. Cs. and Csendes, T., A new verified optimization technique for the "packing circles in a unit square" problems, SIAM J. on Optimization, közlésre elfogadva, 2004. Elérhető: `http://www.inf.u-szeged.hu/~markot/publ.html`.

[23] Márkus, L., Berke, O., Kovács, J. and Urfer, W., Spatial prediction of the intensity of latent effects governing hydrogeological phenomena, *Environmetrics* **10** (1999), 633–654.

[24] Pardalos, P., Rendl, F. and Wolkowicz, H., "The quadratic assignment problem: A survey and recent developments", *Proceedings of the DIMACS Workshop on Quadratic Assignment Problems,* AMS (1994), 1–41.

[25] Rapcsák, T., "On minimization of sums of heterogeneous quadratic functions on Stiefel manifolds", in: P. Pardalos, A. Migdalas, and P. Varbrand (editors), *From local to global optimization,* Kluwer, Dordrecht (2001), 277–290.

[26] Rapcsák, T., On minimization on Stiefel manifolds, *European Journal of Operational Research* **143** (2002), 365–376.

[27] Rapcsák, T., Optimization problems in statistics, *Journal of Global Optimization* **28** (2004), 217–228.

[28] Sahni, S. and Gonzalez, T., P-complete approximation problems, *J. Assoc. Comput. Moch.* **23** (1996), 555–565.

[29] Stiefel, E., Richtungsfelder und Fernparallelismus in n-dimensionalen Mannigfaltigkeiten, *Commentarii Math. Helvetici* **8** (1935–36), 305–353.

[30] Tóth B. és Vinkó T., Egy hatékony számítógépes eszköz matematikai problémák megoldására, *Polygon* **11** (2002), 19–42.

[31] Vinkó T. és Tóth B., Hatékony globális optimalizázálási módszerek vizsgálata, OTDK (2001), Eger.

(Beérkezett: ???)

BALOGH JÁNOS
SZTE JGYTFK
SZÁMÍTÁSTECHNIKA TANSZÉK
6701 SZEGED, PF. 396.
balogh@jgytf.u-szeged.hu

CSENDES TIBOR
SZTE TTK
ALKALMAZOTT INFORMATIKA TANSZÉK
6701 SZEGED, PF. 652.
csendes@sol.cc.u-szeged.hu

RAPCSÁK TAMÁS
MTA SZTAKI
OPERÁCIÓKUTATÁS ÉS DÖNTÉSI RENDSZEREK LABORATÓRIUM ÉS OSZTÁLY
1518 BUDAPEST, PF. 63.
rapcsak@oplab.sztaki.hu

ANGOL NYELVŰ CÍM

János Balogh, Tibor Csendes and Tamás Rapcsák

Angol nyelvű kivonat