FOLYTONOS ÉS LIPSCHITZ-FOLYTONOS GLOBÁLIS OPTIMALIZÁCIÓ: ALGORITMUSOK ÉS ALKALMAZÁSOK[1]

PINTÉR JÁNOS
Faculty of Management, Dalhousie University, Canada

A dolgozat célja a folytonos és Lipschitz-folytonos szerkezetű globális (többextrémumú) optimalizálási feladatok körének áttekintő tárgyalása. Összefoglaljuk a globálisan konvergens adaptív partíciós algoritmusokra vonatkozó alapfogalmakat és fő eredményeket, és tárgyaljuk az implementáció kérdéseit is. Végül néhány alkalmazási esettanulmányt ismertetünk. A dolgozat a Pintér (1995b) monográfián, illetve az annak alapján benyújtott akadémiai doktori téziseken alapul. A technikai részleteket illetően erre a könyvre, valamint az irodalomjegyzékben felsorolt munkákra utalunk.

Kulcsszavak: Folytonos és Lipschitz-folytonos globális optimalizáció; globálisan konvergens adaptív partíciós algoritmusok; implementációs kérdések; az LGO integrált modellfejlesztési és algoritmus programrendszer; alkalmazási esettanulmányok.

1. Bevezetés

A döntéshozatal alapvető emberi tevékenység. Döntéseink egy része igen egyszerű, és következményeik sem túl lényegesek; sok más döntési szituáció viszont egyáltalán nem triviális, és a döntéshozó(k) felelőssége komoly. A döntési feladatok számszerűsített megfogalmazása nem mindig indokolt, és sok esetben nem könnyű. Az említett nehézségek ellenére, a megfelelő kvantifikáció — döntési modell megfogalmazása és numerikus elemzése — gyakran segíti az objektív(ebb) döntéshozatalt.

A tudományos kutatásban, műszaki és gazdasági feladatok megoldása során megfogalmazott döntési (optimalizációs) modellek tipikus alapszerkezete a következő: optimalizálandó egy kiválasztott (elsődleges) célfüggvény értéke — a döntés realitását biztosító — korlátozó feltételek mellett. Ennek megfelelően, a matematikai programozás alapmodellje a következő generikus

[1] Beérkezett 1996. július 29.

feladattípus vizsgálatával foglalkozik:

$$\min f(x) \qquad x \in D \subset \mathbb{R}^n. \tag{1}$$

Az (1) optimalizálási feladatban x a döntést leíró n-változós valós vektor; a döntési feladat célfüggvényét $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^1$, a megengedett döntések (nem üres) halmazát pedig $D \subset \mathbb{R}^n$ jelöli. A megengedett halmaz tipikusan a

$$D = \{f_j(x) \leq 0 \quad j = 1, \ldots, J\} \tag{2}$$

alakban adott; $f_j : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^1$ $j = 1, \ldots, J$ az x-re vonatkozó feltételeket leíró függvények.

Az (1)–(2) szerkezetű modell globálisan optimális megoldása elemi analitikus feltételek mellett létezik. (Példaként itt Weierstrass tételére utalunk, amelynek értelmében D korlátos és zárt volta, f folytonossága esetén az (1) feladat optimális megoldásainak halmaza nem üres.)

A folytonos numerikus optimalizáció elméletének sarkalatos klasszikus feltevése szerint ez az optimális döntés lokális információn alapuló keresési eljárásokkal egyértelműen meghatározható. Ez a feltevés sok gyakorlatilag fontos esetben helytálló. Példaként a konvex programozási paradigma — konvex D halmaz, szigorúan konvex f függvény — keretében leírható feladatok széles osztálya említhető: itt egy megfelelő lokálisan konvergens algoritmus által meghatározott optimumpont (1) abszolút (globális) megoldása.

A numerikus analízis és operációkutatás modelljeinek, algoritmusainak és modellalkotási-döntéstámogató rendszereinek túlnyomó többsége — lásd pl. Bachem, Grötschel és Korte (1983), Murtagh és Saunders (1983), Hillier és Lieberman (1986), Brooke, Kendrick és Meeraus (1988), Fourer, Gay és Kernighan (1991), Schrage (1991), Wolfram (1991), Powell (1992), Press, Teukolsky, Vetterling és Flannery (1992), Moré és Wright (1993), Winston (1994), Heckert és Filliben (1995), MathWorks (1995), Reinhardt (1995), Schittkowski (1995) munkáit — értelemszerűen lokális megoldások meghatározására szorítkozik.

Nyilvánvaló ugyanakkor, hogy léteznek olyan — gyakorlatilag is fontos — feladatosztályok, amelyek a globális optimum mellett más (lokális) optimumhelyekkel is rendelkezhetnek. Tekintsünk példaként egy nemlineáris egyenletrendszert, amelynek az egzakt megoldás(ok)on túlmenően lokális (pszeudo) megoldásai is vannak. Ezek esetében a megfelelően képezett hibafüggvény abszolút értéke pozitív; az egyenletrendszer megoldására alkalmazott lokális kereső módszerek globális megoldáshoz való konvergenciája pedig általában véve nem biztosított.

Egy másik példaként 'fekete doboz' *(black box, oracle)* rendszerek optimális bemenő paramétereinek meghatározása említhető. A 'fekete doboz' például egy általunk analitikusan nem ismert — vagy explicit formában gyakorlatilag nem kezelhető — rendszermodell lehet, amelyet a modell-output és a rendelkezésre álló mérési adatok összevetése alapján szeretnénk kalibrálni. Az egyes paraméter-kombinációk minősége gyakran csak számításigényes módszerekkel — pl. Monte Carlo szimulációs ciklusok végrehajtása, vagy egy 'beépített' differenciálegyenlet-rendszer numerikus megoldása stb. útján — értékelhető ki.

Az említett példákban — és számos más hasonló esetben — a fent említett konvexitási feltételek nem mindig teljesülnek, illetve azok ellenőrzése nem kényelmes, vagy gyakorlatilag kivihetetlen. Ezért az indukált döntési feladat tetszőleges lokális megoldásának globális optimalitása nem garantált. Mivel a lokális megoldások száma és minősége általában szintén nem ismert, indokolt a globális megoldás meghatározására irányuló, megfelelő módszer alkalmazása.

A globális optimalizáció (GO) a matematikai programozási feladatok abszolút megoldásának meghatározására irányuló algoritmusok elméletével, gépi realizációs kérdéseivel és alkalmazásaival foglalkozik. A GO legelső eredményeit ismertető munkák az 1960-as évek elejétől kezdve jelentek meg az operációkutatási irodalomban (lásd pl. Moore (1962), Kushner (1964), Tuy (1964), Mockus (1967), Piyavskii (1967), Neimark és Strongin (1969)). A tudományterület népszerűsége az utóbbi két évtizedben igen számottevően nőtt: példaként Dixon és Szegő (1975, 1978), Strongin (1978), Wilde (1978), Zielinski és Neumann (1983), Evtushenko (1985), Fedorov (1985), Žilinskas (1986), Pardalos és Rosen (1987), van Laarhoven és Aarts (1987), Forgó (1988), Ratschek és Rokne (1988), Mockus (1989), Rinnooy Kan és Timmer (1989), Törn és Žilinskas (1989), Diener (1990), Horst és Tuy (1990), Zhigljavsky (1991), Zhigljavsky és Žilinskas (1991), Floudas és Pardalos (1992), Hansen (1992), Horst és Pardalos (1995) munkáit említjük meg.

A GO iránti növekvő érdeklődést tükrözi az 1991 óta megjelenő *Journal of Global Optimization*, és a Kluwer Academic Publishers által indított *Nonconvex Optimization and its Applications* című könyvsorozat is. A jelen áttekintő dolgozat alapjául szolgáló monográfia (Pintér, 1995b) ebben a sorozatban jelent meg.

Az említett könyv a folytonos, ill. Lipschitz-folytonos szerkezetű GO feladatok megoldására szolgáló algoritmusok egységes elméletét, implementációját és néhány alkalmazását tárgyalja. Ezen belül különös hangsúlyt kap az adaptív, gradiensmentes *(direct)* partíciós stratégiák osztálya: ezek a módszerek a D megengedett halmaz szekvenciális felosztásához vezetnek, és igen általános feltételek mellett rendelkeznek globális konvergencia-tulajdonságokkal. A determinisztikus partíciós módszerek mellett — véletlen kereső eljárásokon, illetve ezeknek lokális módszerekkel kombinált kiterjesztésein alapuló — adaptív sztochasztikus algoritmusokat is tárgyalunk. Az említett módszertípusok alkalmazása elsősorban olyan esetekben javasolható, amikor a feladattal kapcsolatban rendelkezésre álló strukturális információ 'minimális', illetve annak használata nem kézenfekvő. (Itt utalunk a korábban említett feladattípusokra; további példákat később sorolunk fel.)

A dolgozat célja a folytonos, illetve Lipschitz globális optimalizálási feladatok körének áttekintő tárgyalása, a fent említett könyv alapján. (A dolgozatban alkalmazott jelölések is ezt a munkát követik.) Összefoglaljuk a globálisan konvergens adaptív partíciós algoritmusokra vonatkozó alapfogalmakat és fő eredményeket, és kitérünk az implementáció kérdéseire is. Végül néhány alkalmazási esettanulmányt ismertetünk. A könyvben tárgyalt széles körü irodalomjegyzékből csak a legfontosabbakat emeljük ki.

2. Globális optimalizáció: modelltípusok és algoritmusok

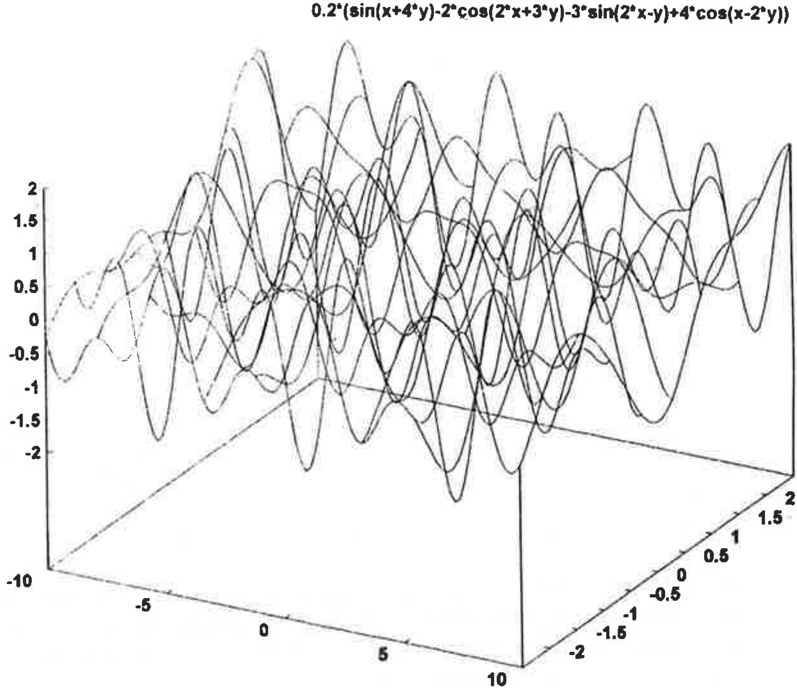
A Pintér (1995b) munka I. része a GO témaköréhez szolgál rövid bevezetésként; két fejezetet foglal magában (terjedelme kb. 40 oldal). Az általános globális optimalizálási probléma (GOP) formálisan azonos az (1) feladattal,

$$\min f(x) \qquad x \in D \subset I\!R^n; \tag{3}$$

a következő — minimálisan előírt — analitikus feltételek mellett:

- a megengedett megoldások D halmaza korlátos és testszerü (*robust*, tehát egy nem üres, nyílt halmaz lezárása) $I\!R^n$-ben;
- az $f : D \to I\!R^1$ célfüggvény folytonos.

Illusztrációképpen tekintsük az 1. ábrát, amely egy GOP-t mutat be: keresendő a Lipschitz-folytonos, többextrémumú célfüggvény abszolút minimuma egy kétdimenziós intervallum-tartomány felett.



1. ábra: Kétdimenziós intervallum felett definiált többextrémumú függvény

Jelölje X^* a (3) feladat globális megoldásainak halmazát. A fenti elemi feltételek biztosítják, hogy X^* nem üres; legyen $x^* \in X^*$ esetén $z^* = f(x^*)$. Nyilvánvaló, hogy z^* garantált becsléséhez — véges számú D-beli pontban meghatározott függvényérték alapján — az f folytonosságánál erősebb feltétel szükséges. Ez leggyakrabban a következő alakú:

- $f : D \longrightarrow I\!R^1$ Lipschitz-folytonos, tehát tetszőleges $x, y \in D$ pontpárra nézve fennáll
$$|f(x) - f(x)| \leq L\|x - y\| \,. \tag{4}$$
$L = L(f, D)$ az f függvény (minimális) Lipschitz-konstansa a D halmazon (ill. annak egy tetszőleges — érvényes — felső becslése); $\|\cdot\|$ pedig az euklideszi norma.

Elméletileg a (3) GOP megoldása X^* összes elemének és a z^* optimum értékének meghatározását jelenti. Az algoritmikus kezelhetőség érdekében feltesszük még, hogy

- X^* legfeljebb megszámlálható.

Megjegyezzük, hogy a legtöbb gyakorlati feladat esetében X^* véges; sok esetben X^* csak egyetlen x^* pontot tartalmaz.

Az általános globális optimalizálási feladatosztály legfontosabb speciális kategóriáit a könyv 1.1. fejezete ismerteti. Ezek a következők:

- konkáv minimalizálás (CM);
- differenciális konvex (DC) programozás;
- folytonos, ill. Lipschitz globális optimalizáció (CGO, ill. LGO).

Itt csak az LGO problémára (LGOP) utalunk, amelyben az $f := f_0$ Lipschitz-folytonos célfüggvény mellett a (2) alakú D halmaz is Lipschitz-folytonos $f_j : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^1$ $j = 1, \ldots, J$ feltételi függvények által definiált. Az LGOP feladatosztály igen általános; egyebek között tartalmazza a CM és DC feladatok osztályát is. (CGOP még ennél is általánosabb, hiszen abban csak a problémát definiáló függvények folytonosságát tételezzük fel.) Az LGOP vizsgálatára irányuló kutatások szinvonalas áttekintését illetően Horst és Tuy (1990), Hansen és Jaumard (1995) munkáit említjük.

Az 1.2. fejezetben a következő gyakran alkalmazott megoldási stratégiákat tárgyaljuk röviden:

- rácsfedéssel, illetve véletlen kereséssel kombinált lokális algoritmusok;
- szekvenciálisan javuló lokális megoldások előállítása (pl. *tunneling*);
- az összes lokális és globális optimum előállítására irányuló (pl. stacionárius pontokat kereső) módszerek;
- relaxációs (szekvenciálisan finomított külső approximáción alapuló) eljárások;
- a korlátozás és szétválasztás *(branch and bound, B&B)* elvén alapuló módszerek.

Megjegyezzük, hogy a jelen dolgozatban (a könyvben) központi témaként tárgyalt adaptív felosztási stratégiák osztályához tartoznak a B&B típusú algoritmusok is.

3. Adaptív partíciós módszerek folytonos és Lipschitz szerkezetű feladatok megoldására

Az elméleti tárgyalás gerincét a könyv II. részének hét fejezete alkotja (mintegy 110 oldalnyi terjedelemben). A 2.1. fejezetben bevezetjük az általános partíciós algoritmus-séma (PAS) fogalmát.

2.1.2. Definíció. *Legyen $D \subset \mathbb{R}^n$ testszerű, I pedig egy véges indexhalmaz. $\{D_i : i \in I\}$ a D halmaz egy testszerű felbontása, ha D_i $i \in I$ testszerű* *halmazok, amelyekre nézve érvényesek az alábbi relációk:*

$$D = \bigcup_{i \in I} D_i \quad \text{és} \quad D_i \cap D_j = \delta(D_i) \cap \delta(D_j) \qquad i, j \in I, \quad i \neq j; \tag{5}$$

itt $\delta(D_i)$ a D_i halmaz határát jelöli.

2.1.3. Definíció. *Legyen adott D egy testszerű felbontása. A $P\{D_i, f(D_i)\}$ partíció operátor egy olyan funkcionál, amelynek értékét a D_i halmazból kiválasztott $x_i(m)$ mintavételi pontok (sample points) és az azokban felvett $z_i(m) = f(x_i(m))$ függvényértékek határozzák meg:*

$$P\{D_i, f(D_i)\} := P\{x_i(m), z_i(m); \quad m = 1, \ldots, M_i\}. \tag{6}$$

Egyszerű példaként egy n-dimenziós intervallum részintervallumokra való felbontását említjük: a mintapontok pl. a részintervallumok kiválasztott csúcspontjai és/vagy belső pontjai lehetnek. Megjegyezzük, hogy $P\{D_i, f(D_i)\}$ értéke tipikusan függ néhány más algoritmus-paramétertől is, mint pl. a Lipschitz-konstans (példákat később idézünk).

Partíciós algoritmus séma

0. (Kezdőértékek beállítása.) Legyen $k := 0$ (iterációs index); az $I_0 := \{0\}$ indexhalmaz és $D_0 := D$, $\{D_i : i \in I_0\} = \{D_0\}$ definiálja a kezdeti felbontást.
1. (Mintavétel.) Minden $i \in I_k$ esetén válasszunk mintapontokat D_i-ből, és határozzuk meg az ezekben felvett függvényértékeket.
2. (Aggregáció.) Az $\{x_i(m), z_i(m); \quad m = 1, \ldots, M_i\}$ információ alapján határozzuk meg a $P\{D_i, f(D_i)\}$ $i \in I_k$ értékeket.
3. (Kiválasztás.) Legyen t olyan index, amely kielégíti a

$$P\{D_t, f(D_t)\} = \max_{i \in I_k} P\{D_i, f(D_i)\} \tag{7}$$

feltételt: ekkor D_t további felbontása következik.

4. (Partíció finomítás.) A D_t halmazt nem-triviális, véges, testszerű felbontásával helyettesítjük:

$$D_t = \bigcup_{l \in L_k} D_{t_l} \quad D_{t_l} \subset D_t \quad l \in L_k \tag{8}$$

Így az új aktuális partíció:

$$\{D_i : i \in I_{k+1}\} \qquad I_{k+1} := I_k \cup \{t_l : l \in L_k\} \setminus \{t\}. \tag{9}$$

Ezután áttérünk az algoritmus következő ciklusának 1. lépésére ($k := k+1$).

Globális optimalizálási algoritmusok széles köre — egyebek között a B&B típusú módszerek osztálya — írható le PAS speciális eseteként. Illusztrációként itt csupán Kushner (1964) és Piyavskii (1967) klasszikus egyváltozós algoritmusait idézzük: ezek a

$$\min f(x) \qquad a \leq x \leq b \tag{10}$$

GOP megoldására szolgálnak. Tetszőleges $[x_{i-1}, x_i] \subset [a,b]$ részintervallum és $z_{i-1} = f(x_{i-1}), z_i = f(x_i)$ függvényértékek esetén a megfelelő $P_i = P\{x_{i-1}, x_i, z_{i-1}, z_i\}$ partíciós operátorok alakja a következő.

Kushner operátor:

$$P_i = \exp\Big\{\frac{-2(f^*_{k_0} - \varepsilon - z_i)(f^*_{k_0} - \varepsilon - z_{i-1})}{\sigma^2(x_i - x_{i-1})}\Big\}, \quad f^*_{k_0} = \min_{1 \leq i \leq k_0} z_i; \tag{11}$$

itt $f^*_{k_0}$ tipikusan egy kezdeti (rögzített) k_0-elemű mintából adódó optimumbecslés, $\varepsilon > 0$, $\sigma > 0$ pedig szintén rögzített algoritmus-, ill. függvénymodell-paraméterek.

Piyavskii operátor:

$$P_i = \frac{1}{2}\{L(x_i - x_{i-1}) - (z_{i-1} + z_i)\}; \tag{12}$$

itt L az f függvény Lipschitz-konstansának egy tetszőleges (érvényes) felső becslése az $[a,b]$ intervallumon.

A 2.2. fejezetben reguláris partíció operátorokat — és ezeknek megfelelő, PAS szerinti algoritmusokat — definiálunk. Ezt követően a reguláris PAS globális konvergenciájára vonatkozó szükséges és elégséges feltételek egy igen általános rendszerét határozzuk meg. A következő öt fejezetben azután ezeket az eredményeket specializáljuk különböző CGOP, ill. LGOP feladatosztályokra. Jelölje N a természetes számok halmazát.

2.2.2. Definíció. *A P partíció operátor reguláris, ha eleget tesz a következő feltételeknek:*

P1. A partíciós részhalmazok minden szigorúan egymásba skatulyázott $\{D_{i_k}\}$ sorozata egyetlen $x = \bigcap_{k \in N} D_{i_k}$ ponthoz konvergál.

P2. A partíció operátor folytonos:

$$P\{D_{i_k}, f(D_{i_k})\} \underset{k\to\infty}{\longrightarrow} P\{\lim_{k\to\infty} D_{i_k}, f(\lim_{k\to\infty} D_{i_k})\}. \tag{13}$$

P3. *Legyen $\{D_{i_k}\}$ partíciós halmazok egy tetszőleges (nem feltétlenül szigorúan) egymásba skatulyázott sorozata. Ekkor minden $x \in \bigcap_{k\in N} D_{i_k}$ esetén fennáll*

$$P\{D_{i_k}, f(D_{i_k})\} > P\{x, f(x)\}, \qquad k \in N. \tag{14}$$

P4. *A P operátor korlátos: minden $D_{i_k} \subset D$ esetén fennáll*

$$-\infty < P\{D_{i_k}, f(D_{i_k})\} < \infty. \tag{15}$$

A részleteket itt szükségképpen mellőzve megjegyezzük, hogy — megfelelően választott partíció finomítási eljárást alkalmazva — pl. a Kushner vagy a Piyavskii partíció operátorok által vezérelt PAS egyaránt reguláris. A továbbiakban kizárólag reguláris partíció operátorokat, ill. PAS-eket tekintünk, és ezekre vonatkozó szükséges és elégséges konvergencia-feltételeket bizonyítunk a könyv 2.2. fejezetében.

Jelölje X^a egy tetszőleges PAS típusú módszer által generált limeszpontok halmazát. A 2.2.1–2.2.7. tételek és a 2.2.1–2.2.3. korolláriumok eredményeit — a tömör leírás érdekében — a következő állításokban foglaljuk össze.

A1. *Minden $x^a \in X^a$ és $x \in D \setminus X^a$ esetén fennáll*

$$P\{x^a, f(x^a)\} = c^a > P\{x, f(x)\} \qquad (c^a \text{ egy alkalmas konstans}). \tag{16}$$

A2. *A $P\{x, f(x)\} = c \quad x \in D$ (c egy alkalmas konstans) reláció ekvivalens az $X^a \equiv D$ relációval.*

A3. *A $P\{x^*, f(x^*)\} = c^* > P\{x, f(x)\}$ ($x^* \in X^*, x \in D \setminus X^*$ tetszőleges pontpár, c^* egy megfelelő konstans) relációk együttesen ekvivalensek az $X^a \equiv X^*$ relációval.*

Ez szavakban kifejezve a következőket jelenti. Minden reguláris partíció operátoron alapuló PAS olyan pontsorozatot generál, amelynek határpontjai a P operátor értelmében 'egyenrangúak'; továbbá 'jobbak', mint a D halmaz határponttól különböző összes pontja (lásd A1-ben a (16) relációt). Ezen belül két fő esetet különböztetünk meg. Az első esetben (A2) a generált pontsorozat mindenütt sűrű a D halmazon; így a mintából nyert minimumbecslések sorozata tart z^*-hoz, és az ezeknek megfelelő mintapontok sorozatának torlódási pontjai X^* elemei. Megjegyezzük, hogy ez az — első pillantásra talán triviálisnak tűnő — eredmény (és ennek megfelelő algoritmus-típus) főként a CGOP vizsgálata kapcsán alkalmazható, tehát amikor a feladatot definiáló függvényekről csupán folytonosságot tételez(het)ünk fel. A második esetben (A3) a PAS olyan mintapont-sorozatot generál, amelynek torlódási ponthalmaza megegyezik az X^* optimális halmazzal. Speciálisan, ha $X^* =$

$\{x^*\}$, akkor a generált pontsorozat egyetlen torlódási pontja éppen a globális optimumhely. Az A3. eset eredménye elsősorban az általános LGOP kapcsán alkalmazható.

Hangsúlyozzuk, hogy a fentiekben összefoglalt általános eredmények tetszőleges, a PAS által leírható algoritmus-realizáció esetére nézve érvényesek. Példaként néhány ismert, PAS típusú algoritmust említünk, amelyek — megfelelő parametrizáció esetén — a következőképpen osztályozhatók:

- A2. eset: Kushner (1964), Mockus (1967), Mockus, Tiesis és Žilinskas (1978), Žilinskas (1981);
- A3. eset: Piyavskii (1967), Neimark és Strongin (1969), Shubert (1972), Strongin (1978), Boender (1984).

Megjegyezzük, hogy az itt felsorolt módszerek közvetlenül kizárólag adott (véges) intervallum felett definiált, egyváltozós GOP megoldására szolgálnak. Ezt a feladattípust elemezzük a 2.3. fejezetben, specializálva 2.2. eredményeit. A fejezetet egy általános érvényű hatékonysági becslés zárja, amely számszerűsíti a passzív rácsfedés (*grid search*) és a PAS algoritmusosztály elemei közötti minőségi különbséget (2.3.1. tétel, 2.3.1–2.3.2. korolláriumok).

Mivel (10) a legegyszerűbb (általunk vizsgált) standard GO feladattípus, megoldására kb. három évtized óta ismertek egyedi globálisan konvergens algoritmusok; ezek hatékony többváltozós kiterjesztésének módja azonban a legutóbbi évekig nem volt ismert. A 2.4. fejezetben az n-dimenziós intervallumon definiált GOP-t vizsgáljuk:

$$\min f(x) \quad a \le x \le b \quad a, x, b \in I\!R^n \quad f : I\!R^n \to I\!R^1 , \tag{17}$$

és megadjuk 2.3. eredményeinek közvetlen kiterjesztését. Az n-változós esetre érvényes globális konvergencia-eredmény (2.4.1. tétel) és hatékonysági becslés (2.4.2. tétel, 2.4.1–2.4.2. korolláriumok) bizonyításán túlmenően bevezetjük a felbontható partíció operátorok fogalmát.

2.4.2. Definíció. *$\{P_i\}$, $P_i = P_i\{D_i, f(D_i)\}$ multiplikatívan felbontható partíció operátorok sorozata, ha minden P_i felírható a következő alakban:*

$$\begin{gathered} P_i\{D_i, f(D_i)\} = P_i^1\{\{x_i(m)\}\} \times P_i^2\{\{z_i(m)\}\}, \\ m = 1, \ldots, M_i, \quad i = i(k), \quad k \in N \, . \end{gathered} \tag{18}$$

Szavakban kifejezve: P_i dekompozíciójának első tényezője csak a mintapontoktól, második tényezője pedig csak az ezeknek megfelelő függvényértékektől függ.

2.4.3. Definíció. *$\{P_i\}$, $P_i = P_i\{D_i, f(D_i)\}$ additívan felbontható partíció* *operátorok sorozata, ha P_i felírható a következő alakban:*

$$P_i\{D_i, f(D_i)\} = P_i^1\{\{x_i(m)\}\} + P_i^2\{\{z_i(m)\}\}\ , \qquad m = 1, \ldots, M_i, \quad i = i(k), \quad k \in N\ . \tag{19}$$

Ismét a korábbi példákra támaszkodva: Kushner (1964) operátorának logaritmusa a 2.4.2. definíció szerinti, míg Piyavskii (1967) operátora a 2.4.3. definíció értelmében közvetlenül felbontható.

2.4.3. Tétel. *Tegyük fel, hogy a $\{P_i\}$ multiplikatívan felbontható partíció operátorok sorozata kielégíti a következő feltételt: $x = \bigcap_k [xl_i, xu_i]$, $i = i(k)$, $k \in N$ esetén fennáll*

$$P_i^1\{\{x_i(m)\}\} \underset{k}{\rightarrow} 0, \quad \text{vagy} \quad P_i^2\{\{z_i(m)\}\} \underset{k}{\rightarrow} 0. \tag{20}$$

Ekkor a $\{P_i\}$ operátor-sorozat által irányított PAS típusú módszer mindenütt sűrű pontsorozatot generál a $D = [a, b]$ halmazon; így a minimumbecslések sorozata f^*-hoz tart, és az ezeket szolgáltató pontsorozat minden torlódási pontja X^*-hoz tartozik.

2.4.4. Tétel. *Tegyük fel, hogy a $\{P_i\}$ additívan felbontható partíció operátor-sorozat kielégíti a következő feltételt: $x = \bigcap_k [xl_i, xu_i]$, $i = i(k)$, $k \in N$, $z = f(x)$ esetén fennáll*

$$P_i^1\{\{x_i(m)\}\} \underset{k}{\rightarrow} 0 \quad \text{és} \quad P_i^2\{\{z_i(m)\}\} \underset{k}{\rightarrow} P_i^2(z), \tag{21}$$

ahol P_i^2 a z argumentum szigorúan monoton csökkenő függvénye. Ekkor a $\{P_i\}$ operátor-sorozat által irányított PAS típusú módszer olyan pontsorozatot generál a $D = [a, b]$ halmazon, amelyre nézve fennáll az $X^a \equiv X^*$ reláció.

A 2.4.3–2.4.4. tételek alapján közvetlenül definiálhatunk n-változós — globálisan konvergens — PAS módszerekhez vezető partíció operátorokat. Példaként itt csak Piyavskii operátorának egy lehetséges n-dimenziós általánosítását mutatjuk be:

$$P_i = L\|xu_i - xl_i\| - \frac{1}{M_i} \sum_{m=1}^{M_i} z_i(m)\ . \tag{22}$$

Így olyan új algoritmusok széles osztályához jutunk, amelyek konvergencia-tulajdonságai azonnal megadhatók, az egyváltozós módszerek alapjául szolgáló célfüggvénymodellek — gyakorlatilag analitikusan és/vagy numerikusan nem kezelhető — általánosításának bevezetését elkerülve.

Szimplex tartományon definiált partíciós algoritmusokat tárgyalunk a 2.5. fejezetben. Tekintsük a (3) alakú LGOP-t, amelyben D egy — az adott $v_0, v_1, \ldots, v_n \in I\!R^n$ vektorok által meghatározott — n-dimenziós szimplex:

$$D = D(v_0, v_1, \ldots, v_n) =$$
$$\left\{x \in I\!R^n : x = \sum_{j=0}^{n} \alpha_j v_j, \ \alpha_j \geq 0 \ \ j = 0, 1, \ldots, n, \ \ \sum_{j=0}^{n} \alpha_j = 1\right\}. \qquad (23)$$

Az általános PAS-t erre az esetre alkalmazva, a konvergencia-feltételeket elemezzük, és példaként egy megfelelő partíció operátort definiálunk. Erre az esetre is kiterjesztjük — valamivel általánosabb formában — a felbontható operátorok fogalmát.

A 2.6. fejezetben az általános konvex halmazon, illetőleg a csillaghalmazon (*star set*) definiált LGOP-t vizsgáljuk. Ezt a feladatosztályt — a Lipschitz-folytonos célfüggvény alkalmas kiterjesztésével — egy a D halmazt befoglaló n-intervallumon definiált LGOP-ra vezetjük vissza (2.6.1–2.6.2. lemmák). Így közvetlenül adódik a konvex, ill. csillagalakú megengedett tartomány esetére érvényes konvergencia-eredmény (2.6.1. tétel). Ezt követően numerikus szempontból külön elemezzük a konvex D tartományt meghatározó lineáris és nemlineáris feltételek kezelését, valamint a csilaghalmaz D esetét.

A 2.7. fejezet tárgya az általános LGOP megoldására alkalmas PAS bevezetése, és az erre az esetre vonatkozó globális konvergencia-eredmény bizonyítása. Tekintsük ismét az f_j $j = 0, 1, \ldots, J$ ($f_0 := f$) Lipschitz-függvények által definiált optimalizálási feladatot:

$$\min f(x) \quad x \in D \subset I\!R^n, \qquad D = \{f_j(x) \leq 0 \ \ j = 1, \ldots, M\}. \qquad (24)$$

A (24) feladat kapcsán — a korábbiakkal összhangban — feltesszük, hogy

- $D \subset [a, b]$, és az f_j $j = 0, 1, \ldots, J$ Lipschitz-függvények értelmezve vannak az $[a, b]$ intervallumon;
- ha $D \neq \emptyset$, akkor előállítható véges számú testszerű halmaz uniójaként;
- az X^* halmaz legfeljebb megszámlálható.

Ezt az igen általános feladattípust illusztrálandó, tekintsük pl. egy nemlineáris egyenletrendszer megoldását az $[a, b]$ tartományon, a megoldásra vonatkozó további explicit feltételek mellett.

Az alapvető PAS sémát a (24) LGOP feladat esetére — a B&B algoritmusok szellemében — kiterjesztjük. Nevezetesen, a Lipschitz-információ alapján a D nem-megengedett, illetve szuboptimális részhalmazainak kizárására irányuló lépéseket iktatunk be, és megadjuk a korlátok megfelelő finomításának módját is. Így a következő általános eredményhez jutunk.

2.7.1. Tétel. *Tegyük fel, hogy a (24) LGOP rendelkezik a fent részletezett szerkezeti tulajdonságokkal, és az LGOP megoldására szolgáló algoritmus a PAS megfelelő B&B típusú kiterjesztésén alapszik. Ekkor a következő állítások érvényesek:*

- *ha $D = \emptyset$, akkor ezt véges számú lépésben megállapítva az algoritmus véget ér;*
- *ha D nem üres, és az algoritmus véges számú lépésben befejeződik, akkor a talált optimumbecslés globálisan optimális;*
- *ha D nem üres, és az algoritmus végtelen, akkor a generált mintapont-sorozat torlódási pontjainak X^a halmaza azonos a globális megoldások X^* halmazával.*

A 2.7.1. és 2.7.2. korolláriumok ezt az eredményt specializálják, a PAS-B&B algoritmus posztulált tulajdonságainak függvényében.

2.7.2. Korollárium. *Tegyük fel, hogy a 2.7.1. tételben a (24) feladat szerkezetére előírt követelmények fennállnak, és a PAS-B&B algoritmust egy additívan felbontható partíció operátor-típus irányítja, amely kielégíti a 2.4.4. tétel feltételeit. Ekkor — minden ilyen típusú algoritmus-realizációra nézve — érvényes a 2.7.1. tétel.*

Megjegyezzük, hogy a mindenütt sűrű mintapont-halmazt generáló algoritmusok esetére vonatkozó eredmények természetesen ebben a legáltalánosabb tárgyalt esetben is fennállnak (tehát elvileg a 2.5–2.7. fejezetek keretében is alkalmazhatók). A CGOP esetére nézve számítási szempontból szintén ígéretes sztochasztikus stratégiák vizsgálatával a könyv III. részében foglalkozunk.

4. Implementációs kérdések, módosítások és sztochasztikus algoritmus kiterjesztések

Az adaptív partíciós algoritmusok elméleti kerete rendkívül általános, így tág teret biztosít számítógépi megvalósításukra. A globális optimalizálási probléma inherens nehézsége szükségessé teszi olyan realizációk megvalósítását, amelyek elfogadható megbízhatósággal és hatékonysággal oldanak meg reális méretű GOP-kat. A könyv III. része ennek a kérdéskörnek a vizsgálatával foglalkozik (hét fejezetben, kb. 100 oldalnyi terjedelemben).

A 3.1. fejezetben elsőként egyváltozós GO algoritmusok hatékony ('takarékos') n-dimenziós kiterjesztéseit vizsgáljuk. Tekintsük ismét a $\min f(x)$, $a \le x \le b$ ($a, x, b \in I\!R^n$) feladatot; a $D = [a, b]$ n-intervallum $D_i = [xl_i, xu_i]$ ($i = i(k)$, $k \in N$) részintervallumokra való felbontására irányuló, PAS típusú módszereket vizsgálunk.

3.1.1. Definíció. *A P_i partíció operátor diagonális típusú, ha*

$$P_i\{D_i, f(D_i)\} = P_i\{xl_i, xu_i, f(xl_i), f(xu_i)\} \tag{25}$$

alakban felírható: P_i értéke tehát csupán az intervallum végpontjaitól és az ott felvett függvényértékektől függ (esetleges további függvénymodell-paraméterek mellett).

A jelölés egyszerűsítése érdekében az i indexet elhagyjuk, és a $zl = f(xl)$, $zu = f(xu)$ jelölést alkalmazzuk.

3.1.2. Definíció. *A P diagonális operátor multiplikatívan felbontható, ha*

$$P\{xl, xu, zl, zu\} = P_1\{xl, xu\} \times P_2\{zl, zu\} \tag{26}$$

alakban felírható.

3.1.3. Definíció. *A P diagonális operátor additívan felbontható, ha*

$$P\{xl, xu, zl, zu\} = P_1\{xl, xu\} + P_2\{zl, zu\} \tag{27}$$

alakban felírható.

3.1.1. Tétel. *Tegyük fel, hogy a P multiplikatív diagonális operátor rendelkezik a következő tulajdonsággal: tetszőleges $x \in D$ esetén*

$$\lim_k xl = \lim_k xu = x, \quad xl \le x \le xu, \quad xl = xl(k), \quad xu = xu(k), \quad k \in N \tag{28}$$

maga után vonja a

$$\lim_k P_1\{xl, xu\} = 0, \quad \text{vagy} \quad \lim_k P_2\{zl, zu\} = 0 \tag{29}$$

relációt. Ekkor a P által irányított PAS — egy CGOP-ra alkalmazva — mindenütt sűrű pontsorozatot generál a $D = [a, b]$ halmazon; így a minimumbecslések sorozata $f(x^*)$-hoz tart, és az optimumbecslések sorozatának minden torlódási pontja X^*-hoz tartozik.

3.1.2. Tétel. *Tegyük fel, hogy a P additív diagonális operátor rendelkezik a következő tulajdonsággal: tetszőleges $x \in D$ esetén (28) maga után vonja a*

$$\lim_k P_1\{xl, xu\} = 0, \quad \text{és} \quad \lim_k P_2\{zl, zu\} = P_2(z) \tag{30}$$

relációkat; itt $z = f(x)$ és P_2 szigorúan monoton csökkenő függvénye z-nek. Ekkor a P által irányított PAS — egy LGOP-ra alkalmazva — olyan pontsorozatot generál a D halmazon, amelynek limeszpont-halmaza azonos X^*-gal.

Általános diagonális partíció operátorok esetére nézve a következő eredmények adódnak.

3.1.3. Tétel. *Tegyük fel, hogy a $P\{xl, xu, zl, zu\}$ diagonális operátor rendelkezik a következő tulajdonsággal: tetszőleges $x \in D$ esetén (28)-ból következik, hogy alkalmas c konstanssal fennáll*

$$P\{x, x, z, z\} = \lim_k P\{xl, xu, zl, zu\} = c. \tag{31}$$

Ekkor a 3.1.1. tétel állítása érvényes.

3.1.4. Tétel. *Tegyük fel, hogy a P diagonális operátor rendelkezik a következő tulajdonsággal: tetszőleges $x \in D$ esetén (28) alapján következik, hogy a*

$$P\{x, x, z, z\} = \lim_k P\{xl, xu, zl, zu\} \tag{32}$$

határérték x-re nézve transzláció-invariáns, z-nek pedig szigorúan monoton csökkenő függvénye. Ekkor a 3.1.2. tétel állítása érvényes.

A 3.1.1–3.1.4. tételek dimenzió-független volta lehetővé teszi — egyebek között — az ismert egyváltozós algoritmusok n-dimenziós diagonális kiterjesztését. A könyvben részletezett példák közül itt csak Strongin (1978) operátorának közvetlen általánosítását idézzük:

$$P\{xl, xu, zl, zu\} = K\|xu - xl\| + \frac{(zu - zl)^2}{K\|xu - xl\|} - 2(zl + zu); \tag{33}$$

itt $K > 4L$ tetszőleges valós szám (L az f függvény Lipschitz-konstansa).

A 3.2. fejezetben a Lipschitz-konstans becslésének — gyakorlati szempontból igen fontos — kérdését vizsgáljuk. Ennek során rámutatunk arra, hogy az elméleti konvergenciához elegendő részhalmaz-specifikus becslések érvényes sorozatát szolgáltatni: az ebből származó numerikus előnyök igen számottevőek lehetnek. Vizsgáljuk a PAS egy megfelelő realizációja során adódó — determinisztikus és/vagy sztochasztikus módszerrel generált — mintapontok alapján megadható alsó korlátok különböző formáit is. Ezt követően az extremális statisztikák elméletének klasszikus eredményeit foglaljuk össze. Végül egyszerűen realizálható numerikus módszert adunk az említett elméleti eredmények algoritmusokba való beépítésére nézve.

Az általános (24) alakú LGOP megoldására a 2.7. fejezetben javasolt PAS-B&B algoritmus-keret elméletileg korrekt (2.7.1. tétel), ennek hatékony implementációja és konkrét feladatok kapcsán történő alkalmazása azonban nem feltétlenül egyszerű. Ezért a 3.3. fejezetben röviden foglalkozunk (24)-nek a standardizált (n-dimenziós intervallumon definiált) LGOP-ra történő redukciójával. A klasszikus büntetőfüggvény-transzformáció (lásd pl. Fletcher

(1983), Hillier és Lieberman (1986)) a célfüggvény és a korlátozó feltételek együttesét egy parametrikus aggregált függvénnyel helyettesíti: példaként az LGOP esetén jól alkalmazható

$$f(x,p) := p_0 f_0(x) + \sum_{j=1}^{J} p_j \max\{f_j(x), 0\} \tag{34}$$

alakot javasoljuk ($p = (p_0, p_1, \ldots, p_J)$, $p_j > 0$ alkalmasan választott szorzótényezők). Így olyan LGOP-hoz jutunk, amelyben a (Lipschitz-folytonos) célfüggvény ugyan meglehetősen bonyolult lehet, a megengedett halmaz közelítése viszont igen egyszerű, és ezért az hatékonyan particionálható. A 3.3.2–3.3.3. — szakirodalomból idézett — tételek a büntetőfüggvény-eljárás elméleti hátterére utalnak; ennek alapján iteratívan parametrizált PAS típusú módszerek ciklikus (interaktív vagy automatikus) vegrehajtása javasolható.

A 3.4. fejezetben a CGOP/LGOP feladatosztályok megoldására általunk kifejlesztett LGO nevű programrendszert írjuk le. LGO egyesíti a modellépítés és numerikus megoldás folyamatának fő lépéseit, egy — a felhasználó által aktivizálható — menü-rendszer keretében. Ez a menü lehetővé teszi a felhasználó által elemzett CGOP/LGOP feladatok (tetszés szerinti módon ismételhető) megfogalmazását, szintaktikus ellenőrzését, összeszerkesztését, futtatását és az — alfanumerikus formában előállított és grafikusan is megjeleníthető — eredmények elemzését. A felhasználónak a menü alatt 'elrejtett' operatív környezettel csak a minimálisan szükséges mértékben kell érintkeznie; így szabadon koncentrálhat a modellfejlesztés feladatára.

Az LGO-ba épített globális és lokális (komponens-)algoritmusok végrehajtása az említett menü-rendszerhez kapcsolódik. Az optimalizációs rendszerbe a következő megoldó eljárások vannak beépítve (interaktív vagy automatikus végrehajtást egyaránt megengedő módon):

- adaptív partíción alapuló globális keresés;
- egyszerű (globális) véletlen keresés;
- Fletcher-Reeves-Polak-Ribière lokális kereső algoritmus (általunk megfelelően módosított formában);
- Powell-Brent lokális kereső algoritmus (ismét: módosított formában).

Az LGO programrendszert Lahey, illetve Unix professzionális Fortran 77 és 90 környezetben fejlesztettük ki; IBM-kompatibilis személyi számítógépeken, illetve egyedi *workstation* gépeken és -hálózatokon installáltuk (a jelen dolgozat elkészítése idején: az Egyesült Államok, Hollandia, Indonézia, Kanada és Németország néhány kutatóintézetében, illetve egyetemein). Megemlítjük, hogy természetesen más *hardware/software* környezet is alkalmas platformként szolgálhat (a programrendszer fő alkotóelemei standard Fortran nyelven írottak; a menü és grafika viszont értelemszerűen környezetfüggő).

Itt nem térhetünk ki az implementációk részleteire; további információt tartalmaz Pintér (1995c; 1996a, b). Így csak megemlítjük, hogy a könyv 3.4. fejezetében LGO-t illusztrációképpen 50-változós tesztfeladatok megoldására alkalmazzuk. (Gyakorlati alkalmazásokat alább tárgyalunk; időközben oldottunk meg nagyobb változószámú, CGOP/LGOP szerkezetű feladatokat is.)

A III. rész hátralévő 3.5–3.7. fejezeteiben sztochasztikus elemektől is függő döntési modelleket, illetve globális optimalizálási eljárásokat vizsgálunk. Ezt nem csak a véletlentől (is) függő döntési feladatok gyakorlati jelentősége indokolja, hanem az a körülmény is, hogy a globális optimalizációs — különösképpen a CGOP megoldására irányuló — módszerek között a sztochasztikus algoritmusok igen fontos szerepet játszanak. Mivel a könyvnek ezek a fejezetei részben a sztochasztikus programozás szakirodalmán, részben pedig korábbi (dokumentált) munkánkon alapszanak, itt csak igen rövid áttekintést nyújtunk. A sztochasztikus döntéselemzés és optimalizáció széleskörű irodalmából példaként Dempster (1980), Berger (1985), Ermoliev és Wets (1988), Kushner és Dupuis (1992), Prékopa (1995) munkáit említjük; a sztochasztikus GO módszereivel kapcsolatban pedig Boender és Romeijn (1995) *state-of-the-art* áttekintő tanulmányára utalunk.

A 3.5. fejezetben röviden ismertetjük a sztochasztikus döntési modellek fogalmát, majd néhány modell-variánst tárgyalunk (ezek egy része a könyv IV. részében alkalmazásra kerül). Igen tömören kitérünk néhány megoldási stratégia bemutatására is.

A 3.6. fejezetben adaptív sztochasztikus optimalizálási eljárások egy általános osztályának vizsgálatával foglalkozunk. A 3.6.1. tétel a sztochasztikus programozási feladatok széles osztályára nézve ad feltételeket, amelyek garantálják a globális optimumpont(ok) létezését. Ezt követően a Borel-Cantelli lemmát általánosítjuk (3.6.1–3.6.2. lemmák), az adaptív algoritmusokra való alkalmazás érdekében. Ezt az eredményt felhasználva, adaptív véletlen keresési eljárás-variánsok 1 valószínűségű konvergenciáját igazoljuk (3.6.2. tétel, 3.6.1. korollárium, 3.6.3. tétel).

A konvergencia-tulajdonságok megőrzése, egyben a lokális hatékonyság növelése érdekében sztochasztikusan kombinált (hibrid) algoritmusok egy igen általános osztályát vezetjük be. Ezek fő iterációi lehetővé teszik — minden egyes lépésben — egy globális (adaptív véletlen kereső típusú) algoritmus, illetve egy lokális (pl. konjugált irányokon alapuló) algoritmus soron következő lépésének (ciklusának) randomizált megválasztását. A 3.6.3. lemma a Borel-Cantelli lemma további — a hibrid stratégiának megfelelő — kiterjesztését szolgáltatja. Ennek alapján egy igen általános szerkezetű sztochasztikus programozási feladat megoldására adunk olyan hibrid algoritmus-sémát, amelynek alkalmazása során a feltételi függvények és a célfüggvény véletlen zaj által torzított értékeit megfelelő módon növekvő pontossággal határozzuk meg. Így sztochasztikus CGOP-kra vonatkozó — 1 valószínűségű — globális konvergencia-eredmény igazolható (3.6.4. tétel).

A 3.7. fejezetben zaj által torzított függvényértékek hatékony becslésének kérdéseit vizsgáljuk. Feltesszük, hogy a becslés Monte Carlo szimulációs ciklusok realizációin alapszik; így — adott pontosságot és becslési megbízhatóságot előírva — a véletlen realizációk számának lehető redukciójára törekszünk. A valószínűségszámítás klasszikus eredményeinek (Csebisev- és Bernstein-egyenlőtlenség és kiterjesztéseik) felhasználásával bizonyítjuk a 3.7.1–3.7.2. lemmákat és a 3.7.1. tételt: a tétel felső becslést ad a szükséges független realizációk számára nézve. A 3.7.1. korollárium ezt az eredményt specializálja ismeretlen valószínűségek becslésére.

Amint erre már utaltunk, a 3.5–3.7. fejezetekben tárgyalt modellek és eredmények az LGO algoritmus-implementációba építve, illetőleg a sztochasztikus modellekhez vezető alkalmazások kapcsán kerültek felhasználásra.

5. Alkalmazási esettanulmányok

CGOP és LGOP típusú feladatokra vezető alkalmazásokat tárgyalunk részletesen a könyv IV. részében (tizenkét fejezetben, mintegy 200 oldalon keresztül). A leírt alkalmazások közül néhányat önálló kutatásként, másokat pedig teammunka keretében dolgoztunk ki; a globális optimalizálási stratégia és algoritmus-implementáció minden esetben saját munkánk.

Néhány bemutatott feladattípus kapcsán tesztproblémák megoldására szorítkozunk, ezek jellege és mérete azonban nem-triviális. Más esetekben a vizsgált döntési feladatot egy nagyobb volumenű kutatási project szerves részeként oldottuk meg, és így közvetlen gyakorlati hasznosításra is sor került.

Az alkalmazott optimalizálási metodika (különösen az algoritmusok adott implementációja) értelemszerűen a konkrét GO feladat vizsgálata idején rendelkezésre álló szintet tükrözi. A közölt számítási eredményeket — megoldható feladatok mérete, műveletigény, gépidő — természetesen ennek függvényében kell értelmezni; erre vonatkozó adatok tehát kizárólag illusztratív jelleggel szerepelnek itt, vagy a könyvben.

Az alábbiakban a könyvben tárgyalt feladattípusok igen tömör ismertetésére szorítkozunk. Az alkalmazott matematikai jelölések az egyedi feladattípusokra vonatkoznak (tehát nem feltétlenül követik minden tekintetben a korábban bevezetett jelöléseket).

Nemlineáris approximáció; egyenlet- és egyenlőtlenség-rendszerek megoldása

Egyenletek és egyenlőtlenségek rendszerének megoldása a numerikus matematika és — természettudományi, műszaki, közgazdasági — alkalmazásainak egyik kiemelkedő fontosságú területe. Tekintsük az

$$f_i(x) = 0 \quad i = 1, \ldots, m, \qquad x \in D \subset I\!R^n \qquad (m \geq n) \tag{35}$$

nemlineáris egyenletrendszert, amelynek általános értelemben vett legjobb — egzakt vagy közelítő — megoldását keressük. Tegyük fel ismét, hogy az f_i $i = 1, \ldots, m$ függvények Lipschitz-folytonosak a D korlátos, testszerű tartományon (gyakran $D = [a, b] \subset I\!R^n$); az általános értelemben tekintett globális megoldások X^* halmaza pedig legfeljebb megszámlálható. Legyen $F = \{f_1, \ldots, f_m\}$ $F : I\!R^n \to I\!R^m$, $N\{\cdot\}$ pedig egy tetszőleges adott norma az $I\!R^m$ térben. Ekkor a keresett X^* halmaz megegyezik a

$$\min N\{F(x)\} \qquad x \in D \tag{36}$$

LGOP megoldáshalmazával. (Ha (35) egzakt megoldásainak halmaza üres, akkor (36) megoldása a legjobb — normafüggő — közelítő megoldás.) Nemlineáris egyenlőtlenségek rendszere könnyen illeszthető ehhez a leírásmódhoz: az $f_i(x) \leq 0$ feltételt pl. a $\max\{f_i(x), 0\}$ komponens képviselheti a megfelelően kibővített F vektorfüggvényben.

A javasolt megközelítésen alapuló módszert részletesen teszteltük, több száz véletlenszerűen generált feladatra vonatkozó eredményeket összesítve. A tesztfeladatok többextrémumú jellegét polinomargumentumú trigonometrikus függvények lineáris kombinációi és más — pl. a GO irodalmából ismert Shekel-típusú — függvények szolgáltatták; 1–5 változós egyenletrendszereket vizsgáltunk. Az elmúlt években további — esetenként bonyolultabb és nagyobb változószámú — (35) típusú feladatokat is megoldottunk.

A részleteket mellőzve megjegyezzük, hogy igen általános (Lipschitz-struktúrájú) nemlineáris approximációs feladatok is tárgyalhatók és oldhatók meg LGOP-ként: néhány erre vonatkozó példát az alábbiakban is bemutatunk.

Adatosztályozás (cluster analysis) és konfiguráció-tervezés

Egy véges elemszámú halmaz elemeinek megadott kritérium szerinti csoportosítása az operációkutatás és alkalmazott statisztika számos feladatának lényeges része. Legyen

$O = \{o_k \mid k = 1, \ldots, N\}$ az osztályozandó elemek halmaza;

$d_{kl} = d(o_k, o_l)$ $\quad o_k, o_l \in O$ az elempárok különbözőségének mérőszáma;

$\mathcal{D} = \{d_{kl} \mid k, l = 1, \ldots, N\}$ a különbözőségi mátrix;

$P_M = \{C_1, \ldots, C_M\}$ az O halmaz egy M számú csoportra (clusterre) való diszjunkt felbontása ($C_j \neq \emptyset$, $C_i \cap C_j = \emptyset$, $\bigcup_j C_j = O$);

π_M a lehetséges P_M partíciók halmaza.

A fenti jelölésekkel az optimális halmaz-felbontás feladatának (*Optimal Set Partition*, OSP) szokásos megfogalmazása a következő: keresendő az a $P_M \in \pi_M$ felbontás, amely — a $\mathcal{D}$ mátrix által kifejezett értelemben — 'leginkább homogén', illetve 'leginkább diszkriminatív' osztályozást biztosít.

Megjegyezzük, hogy (OSP) számos kritériumfüggvény-variáns által kifejezhető; a problémakör nagyfokú kombinatorikus bonyolultsága szintén ismert. A feladat megoldására olyan GO megközelitést javasolunk, amely a clusterek magpontjainak *(seed point)* pozicióját optimalizálja: az egyes magpont-konfigurációk iteratív megválasztását követően az O halmaz elemeinek osztályozása adott — a $\mathcal{D}$ mátrix definícióját tükröző szabály (pl. a 'legközelebbi magpont') szerint automatikusan adódik. A vázolt módszert néhány száz (kétdimenziós) vektor 3–5 csoportba való sorolásán teszteltük először; azóta nagyobb méretű feladatok megoldására is alkalmaztuk.

Megemlítjük még, hogy ez a megközelítés jóval általánosabb konfigurációtervezési problémák kapcsán is használható; erre a következő alkalmazási feladattípus is példaként szolgál.

Egyeztetett szakértői vélemények optimalizált összegzése

Szakértői becslések és vélemények (poziciók) összegzése sok esetben szükséges és indokolt: példaként időjárás-előrejelzésre, pénzpiacok és tőzsdék mozgásának követésére, természeti erőforrások feltárásával kapcsolatos hozambecslésekre, vagy — egészen más területről — kiszolgálási csomópontok *(service facilities)*, illetve zajos, veszélyes stb. létesítmények egyeztetésen alapuló elhelyezésére utalunk. (Nyilvánvaló e problémakörnek az adatosztályozási feladattal és kiterjesztéseivel való rokonsága is.)

Adott kvantitatív vélemények egyeztetésen alapuló aggregációja matematikailag pl. a következő alakban fogalmazható meg:

$$\min_{x \in D} \|(w_1 d(a_1, a_c), \ldots, w_n d(a_n, a_c))\|, \qquad a_c = T\{a, x\} \in A. \tag{37}$$

Itt $a = (a_1, \ldots, a_n)$ az adott szakértői poziciók (vektorok, valószínűségeloszlások stb.) vektora; a_c az $x \in D$ vektorral parametrizált T operátor által definiált (aggregált) és az $a_c \in A$ feltételt kielégítő pozició; $d(\cdot, \cdot)$ a vélemények különbözőségét kifejező függvény; $w_1, \ldots, w_n$ az egyes szakértők 'súlyát' kifejező szorzók; $\|\cdot\|$ pedig adott norma. Ez az általános feladat-megfogalmazás igen sokféleképpen specializálható. Numerikus példákban vektorok és valószínűségeloszlások globálisan optimalizált aggregációját vizsgáltuk (pl. binomiális és Poisson-eloszlások keverékének aggregációját meghatározó LGOP-kat oldva meg).

Termék (keverék) tervezés

A fentiekben röviden bemutatott problémákkal való szoros kapcsolat miatt itt csak megemlítjük, hogy megfelelő keverékek tervezése szintén modellezhető LGOP-ként. (A könyvben leírt numerikus példák gyakorlati hátterét egy mosószergyártási feladat szolgáltatta.) Matematikailag egy adott Lipschitz-folytonos egyenlőtlenségrendszer megengedett megoldásait kerestük egy szimplex-tartományon, amelynek csúcspontjai a gyártási alapanyagokat reprezentálták. Ezek a feladatok még kis méretek (pl. 3–5 gyártási komponens és 5–15 nemlineáris egyenlőtlenség-feltétel) esetén sem feltétlenül egyszerűek: a megengedett megoldások halmazának relatív mértéke ugyanis igen kicsi lehet, és ez a halmaz gyakran 'bonyolult' (konvex és nem-konvex, diszjunkt részhalmazokból is állhat).

Komplex rendszermodellek kalibrációja

Összetett rendszerek modellezése a tudományos és alkalmazott kutatásokban alapvető szerepet játszik. A kvantitatív modellalkotás folyamata a következő fő fázisokra bontható:

- identifikáció: a modellvizsgálat célkitűzéseinek megfogalmazása, a modell alapszerkezetének kiválasztása;
- kalibráció: a modell illesztése (parametrizációja) a rendelkezésre álló információ alapján;
- verifikáció és alkalmazás (elemzés, előrejelzés, szabályozás).

A modellkalibráció feladata matematikai szempontból gyakran egy 'fekete doboz' jellegű nemlineáris approximációs problémához vezet. A témakör irodalmából példaként itt csupán a Beck (1985) által nyújtott (a könyvben ismertetett alkalmazások témájához kapcsolódó) áttekintést, a hazai — globális optimalizációhoz vezető — kutatások közül pedig Csendes (1993) munkáját említjük.

A könyvben (4.5. fejezet) először egy általános iteratív kalibrációs sémát írunk le, és azt a GO témakörének keretébe illesztjük. A kalibrációs feladat megfogalmazását speciális részletek — modell-diszkrétizáció, statisztikus leírásmód, többcélú modell-paraméterezés és a globális optimum meghatározásának szükségessége — tárgyalása követi.

Ezt követően kalibrációs modell-variánsokat és illusztratív gyakorlati példákat elemzünk. Ennek során bevezetjük az l_p-norma fogalmán alapuló illeszkedési kritériumok osztályát, és foglalkozunk a lehetséges *(acceptable)* kalibrációk kérdéskörével is. Példaként a következő esettanulmányokat tárgyaljuk (igen röviden, a könyv 4.6. fejezetének szakaszaiként):

- szélkeltette üledék-felkeveredés sekély tavakban (Balaton);
- mikroszennyezők transzportja, eloszlása és elbomlása tavakban (Ketelmeer, Hollandia);
- egydimenziós (longitudinális) folyami vízállás-vízhozam modell (Noordelijk Deltabekken, Hollandia).

A matematikai modell-leírás általában véve megfelelő közönséges, ill. parciális differenciálegyenletek rendszeréhez vezet; a kalibráció tehát ezek optimált paraméterezését jelenti. A Balatonnal kapcsolatos feladatban a — modell-parametrizációtól függő — numerikus megoldás előállítása viszonylag egyszerű, a másik két modell kiértékelése viszont komolyabb számításigényű. Mindhárom feladat esetében a korábban alkalmazott leírást helyettesítő, számottevő minőségi javulást eredményező modellalakot és paramétereket találtunk GO metodika alkalmazásával. Ezek az eredmények a modellek alkalmazása során közvetlenül hasznosíthatók.

Sekély tavak eutrofizációjának vizsgálata esetén az üledékből kibocsátott tápanyagok elemzése az ökoszisztéma leírása szempontjából nagy fontossággal bír, lásd pl. Somlyódy és van Straten (1986). A SED modell a foszforkibocsátás dinamikáját írja le; a modell illesztését a Veluwe tó (Hollandia) adataira nézve végeztük el (4.7. fejezet). Ennek során részletesen elemeztük a különböző modell-variánsoknak az eredményre gyakorolt hatását, és így a megfelelő kalibrációs modellformák kiválasztásának kérdését is.

A fentiekben említettt modellkalibrációs esettanulmányokban az illesztendő paraméterek száma viszonylag kicsi (3-6) volt, kivéve a Noordelijk Deltabekken modell néhány variánsát. A 4.8. fejezetben egy felszín alatti vízvezető réteg *(aquifer)* modelljének paramétereit határozzuk meg, a Wolfville Formation (Nova Scotia, Kanada) esetére alkalmazva. A felszín alatti vízkészletek mozgásának és minőségének nyomon követése során adódó modellillesztési feladatok nehézsége az e területen dolgozó szakemberek körében jól ismert. A nehézségek fő oka — a 'beágyazott' multiextremális paraméterezési problémán túlmenően — az, hogy a parciális differenciálegyenleteken alapuló rendszermodellek numerikus kiértékelése rendkívül számításigényes. (Esettanulmányunkban a modellparaméterek száma 60 felett volt; a *workstation* gépi környezetben végrehajtott kalibrációs futtatások időigénye néhány perctől több óráig terjedt.) Az LGO programrendszer alkalmazása igen számottevően javította a modell mérési adatokhoz való illeszkedését.

Ipari szennyvíztisztító rendszer tervezése és üzemeltetése

A reálisan fenntartható gazdasági fejlődés stratégiájának kialakítása szükségessé teszi a környezetvédelmi szempontok fokozott érvényesítését is. Az ESIS *(Environmentally Sensitive Investment System)* Project (Halifax, Kanada) keretében egy olyan döntéstámogató rendszert dolgoztunk ki, amely lehetővé teszi ipari szennyvízkezelési stratégiák kiértékelését és optimalizálását, adott műszaki feltételek és környezetvédelmi (szennyezőanyag-kibocsátást limitáló) előírások mellett. Ezt a munkát a 4.9. fejezetben ismertetjük. Az ESIS prototípust a kanadai papíripar egy meghatározott szektorára nézve dolgoztuk ki, de a koncepció széles körű (hatósági, ipari, konzulensi és kutatási) alkalmazásának lehetősége — más iparágak kapcsán is — nyilvánvaló.

Az interaktív ESIS programrendszer — amelynek optimalizálási modulja teljes egészében, szennyvíztisztítómű modellje pedig részben saját munkánk — jelenlegi változatában a következő típusú *on-line* alkalmazásokat teszi lehetővé:

- műszaki, gazdasági és környezetvédelmi információ (alapadatok), valamint tisztítómű modell-paraméterek ellenőrzése és módosítása;
- adott (kiválasztott) paraméterézésű szennyvízkezelő rendszerek működésének determinisztikus szimulációja;
- optimalizált paraméterézésű tisztítómű-tervezési és -üzemeltetési variánsok meghatározása.

Matematikai szempontból az utóbbi feladat ismét egy 'fekete doboz' jellegű rendszer globálisan optimalizált paraméterezéséhez vezet (a műszaki rendszermodell számítógépi programja több ezer soros). A döntési változók száma — a vizsgált tisztítómű típusától és a modelltől függően, a jelenlegi programrendszerben — 10 és 20 között változik.

Regionális szennyvíztisztítási stratégia optimalizálása

Hatékony regionális szennyvízkezelési stratégiák kialakítása az utóbbi évtizedekben intenzív kutatások tárgya: lásd pl. Bower (1977), Deininger (1977), Beck (1985), Somlyódy és van Straten (1986), Patry és Chapman (1989). A legtöbb ez irányú vizsgálat lényegileg determinisztikus rendszer-leírásra épített szabályozási modelleken alapszik, bár léteznek fejlettebb — és reálisabb — sztochasztikus modellvariánsok is. A 4.10 fejezetben leírt sztochasztikus döntési modell olyan megközelitésen alapszik, amely a vízminőségi előírásoknak a szokásosnál pontosabb érvényesítését teszi lehetővé; a modell megoldása ismét egy 'fekete doboz' rendszer globális optimalizációjához vezet. A Zala folyó térségére vonatkozó illusztratív esettanulmány optimalizálási feladatát az LGO rendszer egy korábbi változatának felhasználásával oldottuk meg, négy szennyvíztisztítómű egyedi hatásfokának költséghatékony kombinációit határozva meg. Ennek kapcsán parametrikus érzékenységi vizsgálatot is végeztünk, és az eredményeket egyszerűsített determinisztikus approximáción alapuló eredményekkel vetettük össze.

Eutrofizáció szabályozása

A Balaton vízminőségének vizsgálatára és szabályozására irányuló project keretében (korábban) kidolgozott sztochasztikus döntési modelleket írunk le a 4.11. fejezetben. (A project kapcsán végzett kutatásokat illetően lásd pl. a Somlyódy és van Straten (1986) által szerkesztett kötetet.) Az általunk tárgyalt döntési modellekben adott erőforrás-korlátok mellett keressük az elérhető 'legjobb' környezetállapotot, amelynek statisztikusan változó jellegét explicit módon figyelembe vesszük. Így különböző — statisztikai alapokon nyugvó, nem feltétlenül konvex — sztochasztikus modellvariánsokhoz jutunk. Az egyes regionális vízminőségszabályozási stratégiák kiértékelése Monte Carlo szimuláció alapján hajtható végre. Az így nyert 'fekete doboz' modell optimális megoldására (a tanulmány készítésének idején) egy egyszerű — általunk kidolgozott — adaptív véletlen kereső eljárásnak az ismert MINOS nemlineáris programozási rendszerrel (Murtagh és Saunders, 1983) való kombinációját alkalmaztuk.

Baleset jellegű vízszennyezés elhárítása

A baleset jellegű (véletlen) környezetszennyezési események hatékony megelőzése, ill. elhárítása világszerte növekvő fontosságú feladat: gondoljunk pl. olajszállító tankhajók — gyakran igen jelentős negatív következményekkel járó — baleseteire. A könyv 4.12. fejezetében egy illusztratív esettanulmányt írunk le, amelyben a Duna (hipotetikus) baleset jellegű szennyezését, és ennek az ivóvízszolgáltató kútrendszerre gyakorolt potenciális hatását vizsgáljuk. (A Duna baleseti szennyezésének kockázatát és néhány korábbi esetét vizsgálja pl. Benedek (1988) munkája.)

Az esettanulmány kapcsán egy általános sztochasztikus kockázatelemzési döntési modell-keretet specializálunk. Ezt követően elemezzük egy vegyi anyagokat gyártó üzemből tartály-meghibásodás következtében kibocsátott szennyezés útját, a folyóban történő elkeveredését és az ivóvíz kútrendszerbe való bejutását. A baleseti kár elhárításának módját és költségvonzatait az üzemben alkalmazandó ellenőrzési-karbantartási stratégia költségeivel vetjük össze: így lehetővé válik egy megbízható és költséghatékony stratégia megválasztása. Ez a feladattípus matematikai szempontból ismét egy 'fekete doboz' jellegű, sztochasztikus rendszer globálisan optimált bemenő paramétereinek meghatározásához vezet. Az egyszerűsített numerikus példában csak egyetlen modellparamétert optimalizálunk; ez a példa azonban evidens módon terjeszthető ki reálisabb — és jóval bonyolultabb — GO feladatok irányába.

A könyv IV. része további perspektivikus alkalmazások felsorolásával fejeződik be. Az Olvasó tájékozódását segíti a könyv kiterjedt irodalomjegyzéke is (41 oldal terjedelemben). A munkát a legfontosabb tárgyszavak jegyzéke zárja.

Köszönetnyilvánítás

A jelen dolgozat alapjául szolgáló munka témaköre kb. két évtized óta foglalkoztat. Szeretném köszönetemet kifejezni legalább néhány professzoromnak és kutató-kollégámnak, ösztönző hatású munkájukért és gondolatébresztő eszmecserékért. Alfabetikus felsorolásban ezek a személyek a következők:

Blair T. Bower, Ekaterina V. Bulinskaya, Rolf A. Deininger, Forgó Ferenc, Boris V. Gnedenko, Pierre Hansen, Reiner Horst, Brigitte Jaumard, Klafszky Emil, Kovács László Béla, Majthay Antal, Prékopa András, Charles R. Scherer, Somlyódy László, Roman G. Strongin és Szöllősi-Nagy András.

Társszerzőként való közreműködésükért szeretném köszönetemet kifejezni következő kollégáimnak:

Carlijn Bak-Ijsberg, Benedek Pál, Johan G. Boon, C. Fodor János, Roger M. Cooke, Csendes Tibor, Darázs Attila, Willem J. de Lange, Jacques J. B. de Swart, Mort Fels, Russell J. Finley, Sjur D. Flåm, Eligius M. T. Hendrix, David S. Lycon, Dirk J. Meeuwig, Jay W. Meeuwig, Pesti Géza, Mysore G. Satish, Somlyódy László, Walter J.H. Stortelder, Szabó János, Dorien ten Hulscher, Diederik T. van der Molen, Johan van Zetten és Leo Voogt.

Munkámat elsősorban a következő intézmények támogatták (ahol hosszabb vagy rövidebb ideig dolgoztam a könyvben tárgyalt problémákon):

- Egyetemi Számitóközpont, Budapest
- Eötvös Loránd Tudományegyetem, Budapest
- Közgazdaságtudományi Egyetem, Budapest
- Kaliforniai Egyetem (UCLA); és számos más amerikai egyetem, ill. kutatóintézet
- Moszkvai Állami (Lomonoszov) Egyetem
- Vízgazdálkodási Tudományos Kutató Központ (VITUKI), Budapest
- Delfti Műszaki Egyetem
- Vízgazdálkodási és Szennyvízkezelési Kutatóintézet (RIZA), Lelystad
- Dalhousie Egyetem, Halifax
- Atlanti Ipari Kutatóintézet (AIRI), Halifax
- Nova Scotia-i Műszaki Egyetem (TUNS), Halifax

- Matematikai és Számitástudományi Kutatóintézet (CWI), Amsterdam
- Agrártudományi Egyetem, Bogor
- Sriwijaya Egyetem, Palembang

Itt szeretném megköszönni az Országos Tudományos Kutatási Alap (OTKA), a Holland Kutatási Alapítvány (STW), és a Német Kutatási Társulat (DFG) támogatását; valamint néhány — az irodalomjegyzékben felsorolt — kutató kollégától és software-fejlesztő intézménytől kapott információt és támogatást is.

Köszönöm John Martindale-nek és a Kluwer Akadémiai Kiadónak a könyvproject kezdeményezését, valamint a munka elkészítése során nyújtott támogatást.

A könyv alapjául szolgáló anyagok, illetve egyes fejezetek átnézésével és nagyszámú konstruktív megjegyzéssel elsősorban Ray Côtè, Csendes Tibor, Fülöp János, Eldon Gunn, Eligius Hendrix, Reiner Horst, Don Jones, Walter Stortelder és Terlaky Tamás segítette munkámat. Természetesen hasonló értelmű köszönet illeti társszerzőimet is. Csendes Tibor és Fülöp János a jelen dolgozat anyagát is szívesek voltak átnézni.

Megkülönböztetett köszönettel tartozom Leslie Stockhausen-nek a könyv elkészítése során végzett rendkívül gondos szövegszerkesztői munkájáért, és minden határon túlmenő segítőkészségéért.

Végül — de nem utolsó sorban — szeretném köszönetemet kifejezni Susannak és Jocinak, a Pintér és Pitman családtagoknak, közeli és távoli barátaimnak.

Irodalom

I. A dolgozat témaköréhez kapcsolódó munkák (más szerzőktől)

1. Bachem, A., Grötschel, M., and Korte, B., eds. (1983) *Mathematical Programming: The State of the Art.* Springer, Berlin.
2. Beck, M.B. (1985) *Water Quality Management: A Review of the Development and Application of Mathematical Models. Lecture Notes in Engineering 11.* Springer, Berlin.
3. Benedek, P. (1988) River Danube pollution and its risk assessment. In: *Risk Assessment of Chemicals in the Environment.*, (ed. M. L. Richardson). The Royal Society of Chemistry, London.
4. Berger, J. O. (1985) *Statistical Decision Theory and Bayesian Analysis* (2nd edn.) Springer, Berlin.
5. Boender, C. G. E. (1984) The generalized multinomial distribution: A Bayesian analysis and applications. Ph.D. Dissertation. Erasmus University, Rotterdam.

6. Boender, C. G. E., and Romeijn, E. H. (1995) Stochastic methods. In: *Handbook of Global Optimization* (ed. R. Horst and P. M. Pardalos), pp. 829–869. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht.
7. Bower, B. T., ed. (1977) *Regional Residuals Environmental Quality Management.* Johns Hopkins University Press, Baltimore.
8. Brooke, A., Kendrick, D., and Meeraus, A. (1988) *GAMS: A User's Guide.* Scientific Press, Palo Alto.
9. Csendes, T. (1993) A paraméterbecslési feladat néhány számítógépes eljárása. Kandidátusi értekezés, József Attila Tudományegyetem, Szeged.
10. Deininger, R. A., ed. (1977) *Systems Analysis for Water Quality Management.* University of Michigan Press, Ann Arbor.
11. Dempster, M. A. H., ed. (1980) *Stochastic Programming.* Academic Press, London.
12. Diener, I. (1990) *Einführung in die Methoden der globalen Optimierung* (2nd edn.) Lecture Notes, Institute for Applied Math., University of Göttingen.
13. Dixon, L. C. W., and Szegő, G. P., eds. (1975, 1978) *Towards Global Optimisation.* Vols. 1–2. North-Holland, Amsterdam.
14. Ermoliev, Yu. M., and Wets, R. J.-B., eds. (1988) *Numerical Techniques for Stochastic Optimization.* Springer, Berlin.
15. Evtushenko, Yu. G. (1985) *Numerical Optimization Techniques.* Springer, Berlin.
16. Fedorov, V. V., ed. (1985) *Problems of Cybernetics: Models and Methods in Global Optimization.* USSR Academy of Sciences, Moscow. (Orosz nyelven.)
17. Fletcher, R. (1983) Penalty functions. In: *Mathematical Programming: The State of the Art,* (ed. A. Bachem, M. Grötschel, and B. Korte), pp. 87–114. Springer, Berlin.
18. Floudas, Ch. A., and Pardalos, P. M., eds. (1992) *Recent Advances in Global Optimization.* Princeton University Press.
19. Forgó, F. (1988) *Nonconvex Programming.* Akadémiai Kiadó, Budapest.
20. Fourer, R., Gay, D. M., and Kernighan, B. W. (1993) *AMPL: A Modelling Language for Mathematical Programming.* The Scientific Press, San Francisco.
21. Hansen, E. R. (1992) *Global Optimization Using Interval Analysis.* Marcel Dekker, New York.
22. Hansen, P., and Jaumard, B. (1995) Lipschitz optimization. In: *Handbook of Global Optimization,* (ed. R. Horst and P. M. Pardalos), pp. 407–493. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht.
23. Heckert, A. and Filliben, J. J. (1995) *DATAPLOT Reference Manual.* US National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg.
24. Hillier, F. S., and Lieberman, G. J. (1986) *Introduction to Operations Research* (4th edn.). Holden Day, Oakland.
25. Horst, R., and Pardalos, P. M., eds. (1995) *Handbook of Global Optimization.* Kluwer Academic Publishers, Dordrecht.

26. Horst, R., and Tuy, H. (1990) *Global Optimization – Deterministic Approaches.* Springer, Berlin.

27. Kushner, H. J. (1964) A new method of locating the maximum point of an arbitrary multipeak curve in the presence of noise. *Transactions of ASME, Series D, Journal of Basic Engineering* 86, 97–105.

28. Kushner, H. J., and Dupuis, P. G. (1992) *Numerical Methods for Stochastic Control Problems in Continuous Time.* Springer, New York.

29. Lahey Computer Systems, Inc. (1994) *Fortran 90 – User's Guide.* Incline Village, Nevada.

30. MathWorks, Inc. (The) (1995) *MATLAB – High Performance Numeric Computation and Visualization Software. User's Guide.* Natick.

31. Mockus, J. (1967) *Multiextremal Problems in Design.* Nauka, Moscow. (Orosz nyelven.)

32. Mockus, J. (1989) *Bayesian Approach to Global Optimization.* Kluwer Academic Publishers, Dordrecht.

33. Mockus, J., Tiesis, V., and Žilinskas, A. (1978) The application of Bayesian methods for seeking the extremum. In: *Towards Global Optimisation,* Vol. 2, (ed. L. C. W. Dixon and G. P. Szegő), pp. 117–129. North-Holland, Amsterdam.

34. Moore, R. E. (1962) Interval arithmetic and automatic error analysis in digital computation. Ph.D. Dissertation, Stanford University.

35. Moré, J. J., and Wright, S. J. (1993) *Optimization Software Guide.* SIAM, Philadelphia.

36. Murtagh, B. A., and Saunders, M. A. (1983) MINOS 5.1. User's Guide. Report SOL 83-20R, Stanford University.

37. Neimark, J., and Strongin, R. G. (1969) Informational approach to the problem of search for the extremum of a function. *Engineering Cybernetics* 4, 17–26. (Orosz nyelven.)

38. Pardalos, P. M., and Rosen, J. B. (1987) *Constrained Global Optimization: Algorithms and Applications. Lecture Notes in Computer Science* 268. Springer, Berlin.

39. Patry, G. G., and Chapman, D. T., eds. (1989) *Dynamic Modelling and Expert Systems in Wastewater Engineering.* Lewis, Chelsea.

40. Piyavskii, S. A. (1967) An algorithm for finding the absolute minimum. In: *Theory of Optimal Solutions,* pp. 13–24. Institute of Cybernetics (IK AN USSR), Kiev. (Orosz nyelven.)

41. Powell, M. J. D. (1992) A direct search optimization method that models the objective and constraint functions by linear interpolation. *Numerical Analysis Report DAMTP 1992/NA 5,* University of Cambridge.

42. Press, W. H., Teukolsky, S. A., Vetterling, W. T., and Flannery, B. (1992) *Numerical Recipes in FORTRAN: The Art of Scientific Computing,* Cambridge University Press.

43. Prékopa, A. (1995) *Stochastic Programming.* Kluwer Academic Publishers, Dordrecht; és Akadémiai Kiadó, Budapest.

44. Ratschek, H., and Rokne, J. G. (1988) *New Computer Methods for Global Optimization.* Ellis Horwood, Chichester.

45. Reinhardt, R. (1995) *ISYTOP: Interactive System for Teaching Optimization.* Institute for Mathematics, Technical University of Ilmenau.

46. Rinnooy Kan, A. H. G., and Timmer, G. T. (1989) Global optimization: A survey. In: *Handbooks of Operations Research,* Vol. 1. *Optimization,* (eds. G. L. Nemhauser, A. H. G. Rinnooy Kan, and M. J. Todd), pp. 631–662. North-Holland, Amsterdam.

47. Schittkowski, K. (1995) *Parameter Estimation in Dynamical Systems with EASY-FIT. User's Guide.* Institute for Mathematics, University of Bayreuth.

48. Schrage, L. (1991) *User's Manual for LINGO.* LINDO Systems Inc., Chicago.

49. Shubert, B. O. (1972) A sequential method seeking the global maximum of a function. *SIAM Journal on Numerical Analysis* 9, 379-388.

50. Somlyódy, L., and van Straten G., eds. (1986) *Modeling and Managing Shallow Lake Eutrophication.* Springer, Berlin.

51. Strongin, R. G. (1978) *Numerical Methods for Multiextremal Problems.* Nauka, Moscow. (Orosz nyelven.)

52. Törn, A. A., and Žilinskas, A. (1989) *Global Optimization. Lecture Notes in Computer Science* 350. Springer, Berlin.

53. Tuy, H. (1964) Concave programming under linear constraints. *Soviet Mathematics Doklady* 5, 1437–1440. (Orosz nyelven.)

54. van Laarhoven, P. J. M., and Aarts, E. H. L. (1987) *Simulated Annealing: Theory and Applications.* Kluwer Academic Publishers, Dordrecht.

55. Wilde, D. J. (1978) *Globally Optimal Design.* Wiley Interscience, New York.

56. Winston, W. L. (1994) *Operations Research: Applications and Algorithms* (3rd edn.). Wadsworth, Belmont.

57. Wolfram, S. (1991) *Mathematica – A System for Doing Mathematics by Computer.* (2nd edn.) Addison-Wesley, Redwood City.

58. Zhigljavsky, A. A. (1991) *Theory of Global Random Search,* (ed. J. Pintér). Kluwer Academic Publishers, Dordrecht.

59. Zhigljavsky, A. A., and Žilinskas, A. (1991) *Methods for Searching the Global Extremum.* Nauka, Moscow. (Orosz nyelven.)

60. Zielinski, R., and Neumann, P. (1983) *Stochastische Verfahren zur Suche nach dem Minimum einer Funktion.* Akademie–Verlag, Berlin.

61. Žilinskas, A. (1981) Two algorithms for one-dimensional multimodal minimization. *Optimization* 12, 53–63.

62. Žilinskas, A. (1986) *Global Optimization.* Mokslas, Vilnius. (Orosz nyelven.)

II. A dolgozatban összegzett – önálló, ill. társszerzőkkel készített – munkák

1. Pintér, J. (1981) Sztochasztikus módszerek optimalizálási feladatok megoldására. *Alkalmazott Matematikai Lapok* 7, 217-252.
2. Pintér, J. (1982) *Sztochasztikus eljárások nem-differenciálható, sztochasztikus szerkezetű, globális optimalizálási feladatok megoldására.* Kandidátusi értekezés. Moszkvai Állami (Lomonoszov) Egyetem. (Orosz nyelven.)
3. Pintér, J. (1982) Hibrid algoritmusok többextrémumú, nem-differenciálható, sztochasztikus programozási feladatok megoldására. *Vestnik MGU, Ser. VMK* 1982 No. 1, 39-49. (Orosz nyelven; angol fordításban: *Bulletin of the Moscow University Ser. 15 Computational Mathematics and Cybernetics* 1982, No.1.)
4. Pintér, J. (1983) A unified approach to globally convergent one-dimensional optimization algorithms. *Research Report IAMI-83.5, Istituto per le Applicazioni della Matematica e dell'Informatica CNR*, Milano, Italy.
5. Pintér, J. (1984) Stochastic optimization methods for solving mathematical programming problems. In: *Statistics and Probability*, (ed. J. Mogyoródi, I. Vincze, and W. Wertz), pp. 271–282. Akadémiai Kiadó, Budapest.
6. Pintér, J. (1984) Convergence properties of stochastic optimization procedures. *Optimization* 15, 405–427.
7. Flåm, S. D., and Pintér, J. (1985) Selecting oil exploration strategies: Some stochastic programming formulations and solution methods. *Research Report CMI 852611-1, Christian Michelsen Institute*, Fantoft, Norway.
8. Pintér, J. (1985) A modified Bernstein-technique for estimating noise-perturbed function values. *Calcolo* 22, 241-247.
9. Pintér, J. (1986a) Globally convergent methods for n-dimensional multiextremal optimization. *Optimization* 17, 187–202.
10. Pintér, J. (1986b) Extended univariate algorithms for n-dimensional global optimization. *Computing* 36, 91–103.
11. Pintér, J. (1986c) Global optimization on convex sets. *OR Spektrum* 8, 197–202.
12. Pintér, J., Szabó, J., and Somlyódy, L. (1986) Multiextremal optimization for calibrating environmental models. *Environmental Software* 1, 98-105.
13. Somlyódy, L., and Pintér, J. (1986) Water quality management: Methodology and applications. *Foundations of Control Engineering* 11, 177-189.
14. Pintér, J. (1987a) A conceptual optimization framework for regional acidification control. *Systems Analysis, Modelling and Simulation* 4, 213-226.
15. Pintér, J. (1987b) Convergence qualification of partition algorithms in global optimization. *Research Report 87-61, Faculty of Mathematics and Informatics, Delft University of Technology*, The Netherlands.
16. Pintér, J., and Somlyódy, L. (1987) Optimization of regional water quality monitoring strategies. *Water Science and Technology* 19, 721-727.

17. Somlyódy, L., and Pintér, J. (1987) Optimization models in water quality control. In: *Systems Analysis in Water Quality Management,* (ed. M.B. Beck), pp. 201-210. Pergamon Press, Oxford.

18. C. Fodor, J., and Pintér, J. (1988) Extreme order statistics applied for optimum estimation in 'hard' MP problems. In: *Transactions of the Tenth Prague Conference on Information Theory, Statistical Decision Functions, and Random Processes,* pp. 321-328. Academia Publishing House of the Czechoslovakian Academy of Sciences, Prague.

19. Pintér, J. (1988) Branch-and-bound algorithms for solving global optimization problems with Lipschitzian structure. *Optimization* 19, 101-110.

20. Boon, J. G., Pintér, J., and Somlyódy, L. (1989) A new stochastic approach for controlling point source river pollution. International Association for Hydrologic Sciences (London); *IAHS Publication* No. 180, 241-249.

21. Pintér, J. (1989) Deterministic approximations of probability inequalities. *ZOR - Methods and Models of Operations Research, Ser. Theory* 33, 219–239.

22. Cooke, R., and Pintér, J. (1989) Optimization in risk management. *Civil Engineering Systems* 6, 122–128.

23. Pintér, J. (1990a) Solving nonlinear equation systems via global partition and search: Some experimental results. *Computing* 43, 309–323.

24. Pintér, J. (1990b) On the convergence of adaptive partition algorithms in global optimization. *Optimization* 21, 231–235.

25. Pintér, J. (1990c) Globally optimized calibration of environmental models. *Annals of Operations Research* 25, 211–222.

26. Pintér, J. (1990d) Model calibration: Problem statement, solution method and implementation manual. *Research Report 90.024, National Institute for Inland Water Management and Wastewater Treatment,* Lelystad, The Netherlands.

27. Pintér, J. (1990e) Simplicial partition strategies for Lipschitzian global optimization. *Working Paper, National Institute for Inland Water Management and Wastewater Treatment,* Lelystad.

28. Pintér, J. (1990f) Stochastic decision models for risk analysis and management: A brief methodological overview. *Research Report 90.068, National Institute for Inland Water Management and Wastewater Treatment,* Lelystad.

29. Pintér, J., Benedek, P., and Darázs, A. (1990) Risk management of accidental water pollution: An illustrative application. *Water Science and Technology* 22, 265–274.

30. Pintér, J. (1991a) Stochastic modelling and optimization for environmental management. *Annals of Operations Research* 31, 527-544.

31. Pintér, J. (1991b) Global convergence revisited: Reply to A. Žilinskas. *Computing* 47, 87-91.

32. Pintér, J. (1991c) Adaptív partíciós módszerek globális optimalizálási feladatok megoldására. *Alkalmazott Matematikai Lapok* 15, 329-352.

33. ten Hulscher, D., Bak-Eijsberg, C., and Pintér, J. (1991) Calibration of the model system DELWAQ-IMPAQT for the lake Ketelmeer. *Research Report 91.001, National Institute for Inland Water Management and Wastewater Treatment*, Lelystad.

34. Voogt, L., van Zetten, J., Bak-Eijsberg, C., and Pintér, J. (1991) Calibration of the one-dimensional flow model ZWENDL in the Noordelijk Deltabekken region: Some illustrative results. *Research Report 91.028, National Institute for Inland Water Management and Wastewater Treatment*, Lelystad.

35. de Lange, W. J., and Pintér, J. (1991) Groundwater quality assessment and management: Illustrative numerical results. *Research Report 91.031, National Institute for Inland Water Management and Wastewater Treatment*, Lelystad.

36. Hendrix. E. M. T., and Pintér, J. (1991) An application of Lipschitzian global optimization to product design. *Journal of Global Optimization* 1, 389–401.

37. Pintér, J., and Pesti, G. (1991) Set partition by globally optimized cluster seed points. *European Journal of Operational Research* 51, 127–135.

38. Pintér, J. (1992a) Convergence qualification of partition algorithms in global optimization. *Mathematical Programming* 56, 343–360.

39. Pintér, J. (1992b) Lipschitzian global optimization: Some prospective applications. In: *Recent Advances in Global Optimization* (ed. C. A. Floudas and P. M. Pardalos), pp. 399-432. Princeton University Press.

40. Pintér, J. (1993) *Environmentally Sensitive Investment System (ESIS) Project: Final Report.* School for Resource and Environmental Studies, and School of Business Administration, Dalhousie University, Halifax, Canada. (185 pp.)

41. Csendes, T., and Pintér, J. (1993a) The impact of accelerating tools on the interval subdivision algorithm for global optimization. *European Journal of Operational Research* 65, 314–320.

42. Csendes, T., and Pintér, J. (1993b) A new interval method for locating the boundary of level sets. *International Journal of Computer Mathematics* 49, 53–59.

43. van der Molen, D. T., and Pintér, J. (1993) Environmental model calibration under different problem specifications: An application to the model SED. *Ecological Modelling* 68, 1–19.

44. Finley, J. R., Pintér, J., and Satish, M. (1994) Aquifer model calibration applying global optimization. *Research Report 94-05, Department of Industrial Engineering, Technical University of Nova Scotia*, Halifax. (Appeared in modified form in: Proc. 3rd IASTED Conf. Reliability, Control, and Risk Assessment, Washington, D.C., Oct. 1994.)

45. Pintér, J., and Cooke, R. (1994) Combining negotiated expert opinions: A global optimization approach. *Working Paper, Department of Industrial Engineering, Technical University of Nova Scotia; and Faculty of Technical Mathematics and Informatics, Delft University of Technology.* (Közlésre benyújtva.)

46. Fels, M., Pintér, J. and Lycon, D. S. (1994) Optimized design of wastewater treatment systems: Application to the mechanical pulp and paper industry. *The Canadian Journal of Chemical Engineering.* (Megjelenés alatt.)

47. Pintér, J., Fels, M., Lycon, D. S., Meeuwig, J. W., and Meeuwig, D. J. (1995) An intelligent decision support system for assisting industrial waste management. *Annals of Operations Research* 58, 455–477.

48. Pintér, J. (1995a) *Environmental Studies Centers Development in Indonesia (ESCDI) Project. End of Assignment Report (Work at Sriwijaya University, Palembang, South Sumatra).* PPPSL Jakarta, and ESCDI Project, Dalhousie University, Halifax. (74 pp.)

49. Pintér, J. (1995b) *Global Optimization in Action. (Continuous and Lipschitz Optimization: Algorithms, Implementations and Applications.)* Kluwer Academic Publishers, Dordrecht. (508 pp.)

50. Pintér, J. (1995c) LGO: An implementation of a Lipschitzian global optimization procedure — User's guide. *Research Report NM-R9522, Department of Numerical Mathematics, National Research Institute for Mathematics and Computer Science (CWI)*, Amsterdam.

51. Pintér, J., Stortelder, W. J. H., and de Swart, J. J. B. (1996) Numerical approximation of elliptic Fekete point sets applying LGO and DAE solvers: A global optimization approach. *Research Report, Department of Numerical Mathematics, National Research Institute for Mathematics and Computer Science (CWI)*, Amsterdam. (Megjelenés alatt.)

52. Pintér, J. (1996a) LGO — A program system for continuous and Lipschitz global optimization. In: *Developments in Global Optimization*, (ed. I. M. Bomze, T. Csendes, R. Horst and P. M. Pardalos), Kluwer Academic Publishers, Dordrecht. (Megjelenés alatt.)

53. Pintér, J. (1996b) *LGO — A Program System for Continuous and Lipschitz Global Optimization. User's Guide.* Pintér Consulting Ser., Halifax. (43 pp.)

54. Pintér, J. (1996c) Continuous global optimization software: A brief review. Optima (Megjelenés alatt.)

CONTINUOUS AND LIPSCHITZ-CONTINUOUS GLOBAL OPTIMIZATION: ALGORITHMS AND APPLICATIONS

This paper reviews the subject of continuous and Lipschitz-continuous global (multiextremal) optimization. The essentials of globally convergent adaptive partition algorithms — basic concepts and main results — are summarized. Implementation aspects and extensions are also discussed. Finally, several case studies are highlighted. The paper is based upon the research monograph Pintér (1995b). For details, the interested Reader is referred to that book, and to the extensive list of references. *Keywords:* Continuous and Lipschitz-continuous global optimization; globally convergent adaptive partition algorithms; implementation aspects; the LGO integrated model development and solver system; application case studies.