

Szakmai zárójelentés

Első- és másodrendű algoritmusok kiterjesztése optimalizálási problémák bonyolultabb osztályaira ipari kérdések megoldása céljából

című NKFIH 125700 SNN pályázathoz

2017. december 1. – 2021. szeptember 30.

Készítette Dr. Illés Tibor, a pályázat vezető kutatója.

1. Bevezetés

A pályázatot a szlovén féllel (Ljubljana Egyetem, Gépészmérnöki Kar) közösen nyújtottuk be. A pályázatban résztvevő kutatók a pályázat elindításakor a következők voltak:

- Dr. Eisenberg-Nagy Marianna, egyetemi docens, BME Differenciálegyenletek Tanszék (DET), Optimalizálási Kutatócsoport (OKCS)
- Dr. Illés Tibor, egyetemi docens, BME DET, OKCS (2021. október 15-én sikeresen habilitált a BCE-n)
- Dr. Janez Povh, egyetemi docens, Ljubljana Egyetem (UL) Gépészmérnöki Kar (FME)
- Rigó (Takács) Petra Renáta, doktorandusz (2020. június 22-én summa cum laude minősítéssel megvédte a PhD disszertációját a BME-n)
- Dr. Janez Žerovnik, egyetemi tanár, UL FME

A kutatási tervben vázolt kutatás megvalósítása mellett az utánpótlás nevelés is kiemelt célja volt a pályázatnak. A BME DET OKCS fiatal kutatókat, Varga Anitát, Tollner Dávidot és Török Rolandot is bevontuk a kutatásokba. Jelenleg mindannyian PhD hallgatók. Anita várhatóan 2022-ben megvédi disszertációját, Dávid sikeresen nyert el egy KDP ösztöndíjat, míg Rolandot felvették a BCE-re doktorandusznak és 2020. szeptemberében elkezdte doktori tanulmányait. Az utánpótlás nevelés terén elért eredményeinkre büszkék vagyunk.

2. Kutatás eredményeinek az összefoglalása

A lineáris programozási (LP) és lineáris komplementaritási feladatoknak (LCP) számos gyakorlati alkalmazásai ismertek különböző területeken. Mérnöki, gazdasági, logisztikai feladatok sokasága fogalmazható meg LP vagy LCP-ként. Ilyen feladatok megoldására különböző típusú belsőpontos algoritmusokat vezettünk be és elemeztünk.

A belsőpontos algoritmusokat többféleképpen osztályozhatjuk. Lépéshossz alapján léteznek hosszúlépéses, illetve rövid lépéses módszerek. A rövid lépéses algoritmusok elméleti bonyolultsága jobb volt a hosszú lépésesekénél, viszont a hosszú lépéses algoritmusok a gyakorlatban hatékonyabbnak bizonyultak. Ai és Zhang (2005, SIAM J. Optim) egy olyan monoton lineáris komplementaritási feladatra vonatkozó módszert adtak meg, amely a centrális útnak egy széles környezetében hosszú lépéseket tesz meg, és az algoritmus bonyolultsága mégis megegyezik a legjobb rövid lépéses belsőpontos algoritmusokéval. Ezáltal eltörölték ezt a rést a gyakorlat és elmélet között.

A prediktor-korrektor belsőpontos algoritmusok szintén hatékonyaknak bizonyulnak. Ezek a módszerek egy adott iterációban egy prediktor és egy vagy több korrektor lépést tesznek meg. Darvay, Kheirfam, **Rigó** (2020, Opt. Letters) cikkükben egy hosszú lépéses belsőpontos algoritmust vezettek be, amely új keresési irányra épül, és igazolták, hogy a kapott lineáris optimalizálásra vonatkozó belsőpontos módszer bonyolultsága megegyezik a legjobb rövid lépéses módszerekével. Darvay, Szénási, **Rigó** (2020, AML) dolgozatukban egy rövid lépéses belsőpontos algoritmust elemeztek LP-re, amely a keresési irányok meghatározására a Darvay által bevezetett algebrai ekvivalens átalakítás technikáját (AET) használja egy új függvénnyel. Darvay, **Illés**, Kheirfam, **Rigó** (2020, CEJOR) cikkükben egy új prediktor-korrektor belsőpontos algoritmust fogalmaztak meg LP feladatok megoldására. Igazolták, hogy az algoritmus polinom időben határoz meg egy ϵ -optimális megoldást, és az algoritmus hatékonyságát numerikus eredményekkel támasztották alá.

E.-Nagy és **Varga** (2021, benyújtva a CEJOR-ba) LP feladatok esetén ötvözte Ai és Zhang, illetve Darvay ötleteit. Megfogalmaztak egy olyan Ai-Zhang típusú hosszú lépéses belsőpontos algoritmust, mely a centrális út egy, az eredeti egy kis módosításával kapott széles környezetében tesz lépéseket, és hasonlóan két részre bontott keresési iránnyal határozza meg az új iteráltat. A keresési irányokat meghatározó Newton rendszerrel pedig alkalmazták Darvay AET technikáját. Az így kapott algoritmus továbbra is rendelkezik a kiinduló eljárás elméleti komplexitásával. Ez az eredmény kiindulópontját adja egy jövőbeni általánosabb elemzésnek, melyben az AET transzformációt definiáló függvények egy egész családjának meghatározása a cél, melyek esetén a jelenleg ismert legjobb elméleti komplexitás megtartása lehetséges.

Az LCP-k az NP-teljes feladatosztályba tartoznak. Kojima és társzerzői (1991) megmutatták, hogy ha feltételezzük, hogy a feladat mátrixa, elégséges, akkor be lehet vezetni olyan belsőpontos algoritmusokat, amelyek polinom időben határoznak meg egy ϵ -optimális megoldást a feladat méretében és a mátrix speciális κ nemnegatív paraméterében. Darvay, **Illés**, **Povh**, **Rigó** (2020, SIOPT) dolgozatukban egy prediktor-korrektor belsőpontos algoritmust vezettek be elégséges LCP-k megoldására, amely egy új keresési irányra épül. Továbbá, megadtak egy általános keretrendszert, amivel prediktor-korrektor belsőpontos algoritmusok esetében megfogalmazható a skálázott prediktor és korrektor irányokat meghatározó lineáris egyenletrendszerek (Newton-rendszerek). Különböző tesztfeladatokon sikeresen tesztelték algoritmusuk számítógépes implementációját. Érdekes további eredmény, hogy a mátrixok kopozitivitását egy LCP megoldásán keresztül lehet tesztelni, azonban ezek az LCP-k nem elégséges LCP-k, így a kifejlesztett algoritmusok elméleti elemzése ezekre nem vonatkozik, mégis sikeresen lehetett numerikusan megoldani ezeket az LCP-eket is az új algoritmussal. A jelenség elméleti magyarázata további kutatást igényel.

Ha az LCP feladat mátrixa biszimmetrikus, azaz a négyzetes diagonális blokkok pozitív szemidefinit mátrixok, míg a nem diagonális blokkok ferdén szimmetrikus mátrixot határoznak meg, akkor beszélhetünk horizontális LCP-ről, vagy a $\kappa=0$ paraméterű, elégséges LCP-ről beszélünk. Csizmadia A. Csizmadia Zs., **Illés** (2018, CEJOR) cikkében a klasszikus, kvadratikus primál szimplex algoritmus végességét bizonyította be s-monoton ciklizálás ellenes szabály felhasználásával. A korábbi közismert végesség bizonyítása az algoritmusnak a perturbációs elven alapult, amelyet számítógépes implementációban nem lehet használni.

Darvay, **Illés**, **Rigó** (2021, EJOR) egy új prediktor-korrektor belsőpontos algoritmust vezettek be elégséges lineáris komplementaritási feladatokra. A keresési irányok meghatározására egy új típusú AET-t használtak. Összehasonlították a klasszikus és az új típusú algebrai ekvivalens módszert és meghatározták a két megközelítést leíró függvényegyenletet is. Továbbá, igazolták, hogy az algoritmus polinom időben határoz meg egy ϵ -optimális megoldást.

Illés, Rigó, Török (2021, benyújtva az EJOR-ba, bíráló alatt) egy új széles környezetben működő prediktor-korrektor belsőpontos algoritmust adtak meg elégséges lineáris komplementaritási feladatok megoldására. A cikkben az AET módszert felhasználva egy általánosított széles környezetet definiáltak, amelyek a speciálisan választott AET függvény (identitás) esetén megegyezik a korábbi ismert eredményekkel. A bevezetett belsőpontos algoritmus bonyolultságára vonatkozó elemzést is bemutatottak. Az ilyen széles környezetet használó algoritmusokra korábban senki se készített AET-n alapuló módszert, valószínűleg a bonyolult elemzés miatt. Továbbá, a numerikus eredményekben összehasonlították a bevezetett módszert más, széles környezetben működő belsőpontos algoritmussal és egy kis környezetes prediktor-korrektor módszerrel is.

Illés, Rigó, Török (2021, kézirat) bevezetett egy általános függvényosztályt, amelyet az algebrai ekvivalens átalakítás technikájában alkalmaznak keresési irányok meghatározására belsőpontos algoritmusok esetében. Egy elégséges lineáris komplementaritási feladatra vonatkozó algoritmust is bevezettek. Az új függvényosztályt összehasonlították más, létező osztályokkal és megmutatták, hogy a korábbi osztályok mindegyikével van metszete (identikus függvény), de egyikkel sem egyezik meg, mert kölcsönösen mutathatók olyan függvények, amelyek egyik osztályban benne vannak, míg a másik vizsgáltban meg nincsenek benne. Ez az első olyan a belsőpontos algoritmusok konstruálása és elemzése során használt függvényosztály, amelyik nem zárja ki elemei közül az olyan monoton növekvő függvényeket, amelyek az értelmezési tartományukban van inflexiós pontja. Az általános belsőpontos algoritmus elemzését is bemutatották. A cikket ebben az évben tervezik benyújtani publikálásra.

E.-Nagy és Varga (2021, kézirat) általánosította elégséges LCP feladatokra az LP-re adott Ai-Zhang-féle hosszúlépéses belsőpontos algoritmusukat egy Darvay-féle AET technikával ötvözve. Ennek az algoritmusnak is széleskörű numerikus tesztelését ismertették, melynek során érdekes további kutatási kérdéseket vetnek fel, amik megválaszolása az eljárás mélyebb megértéséhez, és ezáltal a paraméterek hatékonyabb hangolásához vezethet. A cikket ebben az évben tervezik benyújtani publikálásra.

E.-Nagy, Illés és Lovics (2019, CEJOR) cikkükben piaci egyensúlyi modelleknek és a geometriai programozásnak a kapcsolatát vizsgálták. Earling Andersen (2020, személyes közlés) szerint a tárgyalt optimalizálási modellek átírhatók szimmetrikus kúp optimalizálási feladattá és mint olyan polinomiális iteráció számban megoldható belsőpontos algoritmus segítségével.

E.-Nagy, Illés, Lovics és **Varga** (2021, kézirat) a Fisher-féle piaci egyensúlyi modelltől készülő összefoglaló cikkükben a modell tulajdonságainak és megoldhatóságának kérdései mellett, a Fisher-féle piaci egyensúlyi modellből készíthető LCP tesztfeladatok kérdését is érintik. Fontos megjegyezni, hogy az igazán érdekes probléma az Arrow-Debreu-féle piaci egyensúlyi modellből (1954), Leontieff-féle hasznossági függvényrel származtatott LCP mátrixa nem elégséges, így nagyon érdekes lenne ilyen tesztfeladatokat gyártani és megoldani a jövőben.

Elkészítettek egy elégséges lineáris komplementaritási feladatok (LCP) megoldására alkalmas szoftvert, amely C++ nyelven íródott. Fontos megjegyezni, hogy nem csupán egy elégséges LCP-k megoldására szolgáló algoritmust tekintettek, hanem több lényegesen eltérő tulajdonságú, különböző környezetben működő belsőpontos módszert is implementáltak, teszteltek és numerikus eredményeiket összehasonlították. Az implementált algoritmus változatok a primál-duál- illetve a prediktor-korrektor belsőpontos algoritmusok. A környezetek és az AET függvények variálásával nagyon sokféle változatot sikerült letesztelni. A szoftver elkészítése során számos numerikus kérdést kellett tisztázni, ezek között leggyakrabban numerikus lineáris algebrai kérdések voltak. Az elméletileg ekvivalens megoldási módszerei egy-egy rész kérdésnek nagyon is különböző viselkedést mutattak a gyakorlatban, megnehezítve egy stabilan működő szoftver kidolgozását. Az implementálás

meghatározó részét **Török Roland** végezte el, és az elméleti kérdésekről társszerzőivel konzultált, míg a numerikus, implementációs kérdések esetén leggyakrabban Darvay Zsolt tanácsát kérte ki.

Ai-Zhang típusú hosszú lépéses keretalgoritmus került implementálásra MATLAB-ban. Ennek segítségével az AET technikát definiáló különböző függvények tesztelése és gyakorlati összehasonlítása lehetséges mind LP, mind pedig (elégséges) LCP feladatok esetén. Lehetőség van az AET esetén alkalmazott függvény paraméterként való megválasztására, a lépéshossz megváltoztatására (használhatjuk az elméleti elemzésben szereplő lépéshosszt, vagy egy úgynevezett mohó változatot), és bizonyos, az algoritmusok jobb megértését elősegítő ábrák automatikus generálására. Az implementációt LP feladatok esetén NETLIB feladatokon tesztelték, míg LCP feladatok esetén a kutatócsoport által létrehozott tesztfeladatokat használták. A MATLAB implementáció legnagyobb részét **Varga Anita** dolgozta ki.

A belsőpontos algoritmusok általánosabb feladatok megoldására is alkalmazhatóak. A szimmetrikus optimalizálási feladatokat intenzíven tanulmányozták az utóbbi években. A szimmetrikus optimalizálás magába foglalja az LP-t, másodrendű kúpprogramozást és szemidefinit optimalizálást is sajátos esetként. Ezeknek a feladatoknak számos gyakorlati alkalmazásuk van.

Asadi, Mahdavi-Amiri, Darvay és **Rigó** (2020, CEJOR) cikkükben szimmetrikus kúpok Descartes szorzata feletti horizontális lineáris komplementaritási feladatra vonatkozó belsőpontos algoritmust dolgoztak ki, amely keresési iránya az AET-re épül. Az algoritmus elemzése során felhasználták a Jordan algebrák elméletét is.

Darvay, **Rigó** (2021, JOTA-ba benyújtva) egy új belsőpontos algoritmust vezetett be szimmetrikus kúpok Descartes-szorzata felett értelmezett horizontális lineáris komplementaritási feladatokra. A Darvay, **Illés**, **Povh**, **Rigó** (2020, SIOPT) eredményt terjesztették ki erre az általánosabb feladatosztályra. A centralitási és redukciós paraméterekre vonatkozóan megadtak egy olyan feltételt, ami biztosítja, hogy a bevezetett prediktor-korrektor módszer jól definiált.

A keverési feladat számos alkalmazással rendelkezik, amelyek közül a legismertebb az olajiparhoz kapcsolódik és a gáz, illetve az olajszármazékok előállításának a modellezésekor kerül elő, a termelés tervezési feladatok részfeladatoként. Matematikai szempontból, bilineáris feltételes lineáris célfüggvényes optimalizálási feladatok, amelyek a szép struktúrájuk ellenére NP-teljes optimalizálási problémák. **Illés** és **Tollner** a szakirodalomból ismert, a gyakorlatnak ellentmondó, a döntési változók nagyrésze nulla alsókorlátot előíró feladatok helyett, a valóságos helyzetet jobba leíró tesztfeladatokat készített és oldott meg a FICO Xpress Optimizer programmal. Közben az NP-teljes feladatok ekvivalens felírásának lehetőségét, illetve a fizibilitási részfeladat struktúráját vizsgálták meg. Mindkét kutatási részterületen érdekes eredményeket értek el, amelyek leírása és publikálása folyamatban van.

Az elégséges mátrixok eldöntési problémája NP-teljes döntési probléma. Az eldöntési feladat sokféleképpen megfogalmazható, többek között optimalizálási feladatként is. **E.-Nagy**, **Illés**, **Povh**, **Varga** és **Zernovnik** kéziratukban több formában, közöttük optimalizálási feladatként is megfogalmazták egy mátrix elégséges tulajdonságának a döntési problémáját. Több modellt, algoritmust és számítógépes implementációt teszteltek és tapasztalataik szerint, az általuk készített MATLAB kóddal személyi számítógépen 17 x 17-es mátrixokról dönthető el, hogy elégségesek vagy sem, kívárható számítási idő (60 perc) alatt. A Ljubljana-i Egyetem szuperszámítógépén, a mátrixok mérete 30 x 30-asra volt növelhető azonos számítás idő mellett. Az optimalizálási feladatok megoldása esetén még kisebb méretekben sikerült eldönteni, hogy egy mátrix elégséges-e. Természetesen ez komolyan nehezíti az elégséges mátrixok generálását. Dolgozatuk ezzel a kérdéssel is foglalkozik.

3. Tudományos közlemények jegyzéke

A pályázatot a szlovén féllel (Ljubljana Egyetem, Gépészmérnöki Kar) közösen valósítottuk meg. A pályázat munkatervében 5 feladatcsoport (F) közül az F2, F3 és F4 kapcsolódtak a tudományos kérdésekhez. Az F2 (lineáris komplementaritási feladatok és alkalmazásai) illetve F3 (bi- és multilineáris optimalizálási feladatok és alkalmazásai) kutatási feladatok esetén a budapesti kutató csoport tagjainak kutatása, míg az F4 (nemnegatív mátrix faktorizáció és alkalmazásai) a szlovén kollégák kutatásai voltak a meghatározók.

A tudományos közlemények jegyzékében csak azokat a dolgozatokat sorolom fel, amelyeket a budapesti kutatók közreműködésével készültek, minőségi folyóiratokban publikáltak (nemzetközi folyóiratok esetén Q1/Q2-es minősítésű) vagy oda szeretnénk benyújtani és már létezik a kézirat.

- A. Csizmadia, Zs. Csizmadia and T. Illés, Finiteness of the quadratic primal simplex method when s -monotone index selection rules are applied, *Central European Journal of Operations Research* 26: 535-550, 2018 (IF: 1.448, Q2) [202 letöltést és 4 hivatkozást jegyez a folyóirat honlapja, illetve elérhető a ResearchGate-n.]
- M. E.-Nagy, T. Illés and G. Lovics, Market exchange models and geometric programming. *Central European Journal of Operations Research* 27(2): 415-435, 2019 (IF: 2.000, Q2) [239 letöltést és 1 hivatkozást jegyez a folyóirat honlapja, illetve elérhető a ResearchGate-n.]
- Zs. Darvay, T. Illés, B. Kheirfam and P.R. Rigó, A corrector–predictor interior-point method with new search direction for linear optimization. *Central European Journal of Operations Research* 28: 1123–1140, 2020. (IF: 2.000, Q2) [Open access cikk, 1501 letöltést és 3 hivatkozást jegyez a folyóirat honlapja, illetve elérhető a ResearchGate-n.]
- Zs. Darvay, T. Illés, and Cs. Majoros, Interior-point algorithm for sufficient LCPs based on the technique of algebraically equivalent transformation. *Optimization Letters*, Published: 24 June 2020. (IF: 1.509, Q1) [Open access cikk, 656 letöltést és 2 hivatkozást jegyez a folyóirat honlapja, illetve elérhető a ResearchGate-n.]
- Zs. Darvay, T. Illés, J. Povh, and P. R. Rigó. Feasible Corrector-Predictor Interior-Point Algorithm for $P^*(\kappa)$ -Linear Complementarity Problems Based on a New Search Direction, *SIAM Journal on Optimization* 30(3):2628-2658, 2020. (IF: 3.330, Q1)
- S. Asadi, N. Mahdavi-Amiri, Zs. Darvay, P.R. Rigó. Full-Nestrov-Todd step feasible interior-point algorithm for symmetric cone horizontal linear complementarity problem based on a positive-asymptotic barrier function, *Optimization Methods and Software*, published online: 09 Mar 2020. (IF: 1.470, Q1) [59 letöltést jegyez a folyóirat honlapja, illetve elérhető a ResearchGate-n.]
- Zs. Darvay, B. Kheirfam, P.R. Rigó. A new wide neighborhood primal-dual second-order corrector algorithm for linear optimization, *Optimization Letters*, 14:1747-1763, 2020. (IF: 1.509, Q1) [215 letöltést és 1 hivatkozást jegyez a folyóirat honlapja, illetve elérhető a ResearchGate-n.]
- Darvay Zs., Szénási E., Rigó P.R., Új keresési irányra épülő belsőpontos algoritmus lineáris optimalizálásra, *Alkalmazott Matematikai Lapok*, 37(2):277-286, 2020.
- Zs. Darvay, T. Illés, P.R. Rigó. Predictor-corrector interior-point algorithm for $P^*(\kappa)$ -linear complementarity problems based on a new type of algebraic equivalent transformation technique. *European Journal of Operational Research*, Available online 2 September 2021, DOI: 10.1016/j.ejor.2021.08.039, [JCR IF 2020/2021: 5.334].
- Zs. Darvay, P.R. Rigó: New predictor-corrector interior-point algorithm for symmetric cone horizontal linear complementarity problems, *Corvinus Economics Working Papers, CEWP, 01/2021*. (Benyújtva a *Journal of Optimization Theory and Applications*-be.)

- T. Illés, P. R. Rigó, R. Török: Predictor-corrector interiorpoint algorithm based on a new search direction working in a wide neighbourhood of the central path, *Corvinus Economics Working Papers, CEWP, 02/2021*. (Benyújtva az *European Journal of Operational Research*-be.)
- M. E.-Nagy, A. Varga. A new long-step interior point algorithm for linear programming based on the algebraic equivalent transformation, *Corvinus Economics Working Papers, CEWP 06/2021*. (Benyújtva az *Central European Journal of Operations Research*-be.)
- T. Illés, P.R. Rigó, R. Török: Unified approach of primal-dual interior-point algorithms for a new class of AET functions, (kézirat) 2021.
- M. E.-Nagy, T. Illés, J. Povh, A. Varga and J. Zernovnik, Sufficient matrices: testing and generating, (kézirat) 2021.
- E.-Nagy M., Illés T., Lovics G., Varga A., A Fisher-féle cseregazdasági egyensúlyi feladat és megoldása belsőpontos algoritmusokkal, (kézirat) 2021.

4. Az eredmények összefoglalása

A budapesti kutatók a pályázatban javasolt kutatási területek mindegyikén új tudományos eredményeket értek el és eredményeik egy részét még általánosították is. A kutatási időszakban 8 Q1/Q2-es dolgozatot fogadtak el és jelent meg. További 3 dolgozatot hasonlóan minőségű folyóiratokba benyújtottak közlésre és még két dolgozat benyújtása várható színvonalas, nemzetközi folyóiratokba.

A tudós utánpótlás növelésében vállalt feladatot, a budapesti kutatók magas szinten teljesítették, hiszen Rigó (Takács) Petra Renáta 2020. június 22-én megvédte PhD dolgozatát, míg Varga Anita védésére 2022-ben kerül sor. A szenior kutatók, Tollner Dávidot és Török Rolandot elindították kutatási pályájukon és minden bizonnyal jó tanítványként, időben megszerzik a PhD fokozatukat.

A szlovén kollégákkal sikerült az együttműködést szorosabbá tenni, amelyeknek igazán kiváló eszköze volt a magyar-szlovén műhelykonferencia (workshop), amelyből a tervezett hat helyett ötre került sor. A hatodik megtartását a koronavírus járvány alakulása kétszer is megakadályozta. Ezeknek a műhelykonferenciáknak lett az eredménye a két közös publikáció és a mátrixok elégséges tulajdonságának tesztelésére szolgáló különböző számítógépes programok kifejlesztése és szuper számítógépen való megvalósítása is.