



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ

ΣΧΟΛΗ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΩΝ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ & ΦΥΣΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ
ΔΙΑΤΜΗΜΑΤΙΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΩΝ ΣΠΟΥΔΩΝ
ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΗ ΠΡΟΤΥΠΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΙΣ ΣΥΓΧΡΟΝΕΣ
ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΕΣ ΚΑΙ ΤΗΝ ΟΙΚΟΝΟΜΙΑ

Επαναληπτικός Τετραγωνικός Προγραμματισμός

ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

Ιωάννης Μ. Κατηνιώτης

Επιβλέπων : Χρυσοφάνης Κωνσταντίνος

Επίκουρος Καθηγητής Ε.Μ.Π.

Αθήνα, Οκτώβριος 2012

Στην οικογένειά μου.

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Ο στόχος της εργασίας αυτής είναι η μελέτη επίλυσης μη γραμμικών προβλημάτων βελτιστοποίησης με περιορισμούς με τη μέθοδο του επαναληπτικού τετραγωνικού προγραμματισμού (SQP) η οποία έχει αποδειχθεί ιδιαίτερα αποτελεσματική στην πράξη. Όπως με τις περισσότερες μεθόδους βελτιστοποίησης, η μέθοδος SQP δεν είναι ένας απλός αλγόριθμος αλλά μία θεμελιώδης μέθοδος από την οποία έχουν αναπτυχθεί πολυάριθμοι ειδικοί αλγόριθμοι.

Η βασική ιδέα της μεθόδου SQP είναι να μοντελοποιήσει το μη γραμμικό πρόβλημα βελτιστοποίησης σε μια δεδομένη προσεγγιστική λύση μέσω ενός υποπροβλήματος τετραγωνικού προγραμματισμού και εν' συνεχεία να χρησιμοποιήσει τη λύση αυτού του υποπροβλήματος για να κατασκευάσει μια καλύτερη προσέγγιση. Η διαδικασία αυτή επαναλαμβάνεται για τη δημιουργία μιας ακολουθίας προσεγγιστικών λύσεων που θα συγκλίνει σε μια λύση του μη γραμμικού προβλήματος. Το κλειδί για την κατανόηση της λειτουργίας και της θεωρίας της μεθόδου SQP είναι το γεγονός ότι με μια κατάλληλη επιλογή του τετραγωνικού υποπροβλήματος η μέθοδος μπορεί να θεωρηθεί ως επέκταση της μεθόδου Newton στις συνθήκες Karush-Kuhn-Tucker για το μη γραμμικό πρόβλημα με περιορισμούς.

Στο κεφάλαιο ένα μελετώνται δύο θεμελιώδεις στρατηγικές βελτιστοποίησης προβλημάτων χωρίς περιορισμούς για τη μετακίνηση από τη μια επανάληψη στην επόμενη, οι μέθοδοι αναζήτησης γραμμής και οι μέθοδοι περιοχής εμπιστοσύνης. Στη μέθοδο αναζήτησης γραμμής ο αλγόριθμος επιλέγει μια κατεύθυνση έρευνας σε κάθε επανάληψη και εν' συνεχεία αποφασίζει πόσο μακριά θα μετακινηθεί κατά μήκος αυτής της κατεύθυνσης από την τρέχουσα επανάληψη σε ένα νέο σημείο με χαμηλότερη τιμή της συνάρτησης. Παρουσιάζονται διάφορες συνθήκες τερματισμού για αυτές τις μεθόδους οι οποίες εξασφαλίζουν ότι ο αλγόριθμος σημειώνει ικανοποιητική πρόοδο και περιγράφεται ένας αλγόριθμος αναζήτησης γραμμής. Αποδεικνύεται ότι η γενική σύγκλιση αυτών των μεθόδων ικανοποιείται όταν τόσο το μήκος βήματος όσο και η κατεύθυνση έρευνας επιλεγθούν κατάλληλα. Οι μέθοδοι περιοχής εμπιστοσύνης απ' την άλλη μεριά χρησιμοποιούν ένα τετραγωνικό μοντέλο της συνάρτησης κόστους και ορίζουν μια περιοχή γύρω από τη τρέχουσα επανάληψη μέσα στην οποία η συμπεριφορά του μοντέλου είναι παρόμοια με αυτή της συνάρτησης κόστους. Δεδομένου ότι το μέγεθος της περιοχής εμπιστοσύνης είναι κρίσιμο για την αποτελεσματικότητα κάθε βήματος, δίνουμε έναν αλγόριθμο ο οποίος περιγράφει τη διαδικασία επιλογής της περιοχής αυτής. Στο υπόλοιπο μέρος αυτού του κεφαλαίου περιγράφουμε μεθόδους εύρεσης προσεγγιστικών λύσεων του τετραγωνικού μοντέλου οι οποίες δίνουν ικανοποιητική μείωση της συνάρτησης κόστους, καθώς επίσης και μια επαναληπτική στρατηγική για την εύρεση μιας καλύτερης προσέγγισης στη λύση του υποπροβλήματος περιοχής εμπιστοσύνης.

Στο κεφάλαιο δύο παρουσιάζουμε τις απαραίτητες θεωρητικές έννοιες αναφορικά με τις συνθήκες βελτίστου προκειμένου να πλήρως κατανοητή η μέθοδος SQP. Συγκεκριμένα εξηγείται ο τρόπος με τον

οποίο εισάγονται οι αποκαλούμενοι πολλαπλασιαστές Lagrange και παρουσιάζονται οι συνθήκες βελτίστου πρώτης και δεύτερης τάξης.

Στο κεφάλαιο τρία συζητάμε τις μεθόδους Quasi-Newton για προβλήματα βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς. Στις μεθόδους αυτές η μήτρα Hessian της συνάρτησης κόστους, η αποτίμηση της οποίας είναι δύσκολη σε πρακτικά προβλήματα, προσεγγίζεται με μια συμμετρικά και θετικά ορισμένη μήτρα. Εξετάζουμε τρεις τύπους ενημέρωσης, την ανανέωση BFGS, την SR1 και την DFP και περιγράφουμε τις θεωρητικές τους ιδιότητες και την πρακτική εφαρμογή τους.

Στο κεφάλαιο τέσσερα μελετάμε τη μέθοδο SQP για μη γραμμικά προβλήματα βελτιστοποίησης. Αρχικά παρουσιάζουμε τον αλγόριθμο SQP στην πιο απλή του μορφή και περιγράφουμε μεθοδολογίες υπολογισμού του βήματος για την περίπτωση προβλημάτων με ισωτικούς και προβλημάτων με ανισωτικούς περιορισμούς. Οι δυσκολίες που σχετίζονται με τη μήτρα Hessian της Λανγκρανζιανής συνάρτησης μπορούν να ξεπεραστούν με την εφαρμογή των τύπων ανανέωσης BFGS και SR1 στα προβλήματα βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς. Ακολουθεί μια συνοπτική επισκόπηση των συναρτήσεων αξίας (merit functions) που χρησιμοποιούνται στις μεθόδους SQP ως μια διαδικασία για να αποφασίσουμε εάν ένα δοκιμαστικό βήμα πρέπει να γίνει αποδεκτό. Συγκεκριμένα παρουσιάζονται η συνάρτηση ποινής I_1 και η συνάρτηση ποινής του Fletcher καθώς επίσης και διαφορετικοί κανόνες ανανέωσης της παραμέτρου ποινής ώστε τα υπολογισμένα βήματα να αποτελούν κατευθύνσεις καθόδου για τη συνάρτηση αξίας. Το κεφάλαιο συνεχίζει με την περιγραφή ενός αλγορίθμου SQP με αναζήτηση γραμμής και μιας στρατηγικής διαχείρισης ασύμβατων γραμμικοποιήσεων που οδηγούν σε μη επιλύσιμο υποπρόβλημα. Σύμφωνα με όλα τα ανωτέρω παρουσιάζουμε δύο πρακτικούς αλγορίθμους SQP, για την περίπτωση προσέγγισης της πλήρους μήτρας Hessian αλλά και την περίπτωση προσέγγισης της απλοποιημένης μήτρας Hessian. Περιγράφουμε επίσης τις συνθήκες που διασφαλίζουν τοπική και υπεργραμμική σύγκλιση των μεθόδων SQP οι οποίες χρησιμοποιούν την ακριβή μήτρα Hessian του προβλήματος αλλά και μια προσέγγιση Quasi-Newton αυτής. Η συζήτηση περιορίζεται σε ένα πρόβλημα ισωτικών περιορισμών αλλά τα αποτελέσματα που προκύπτουν μπορούν να εφαρμοστούν και σε αλγορίθμους προβλημάτων ανισωτικών περιορισμών. Απ' την άλλη μεριά στις μεθόδους SQP με τη μέθοδο της περιοχής εμπιστοσύνης, το τετραγωνικό υποπρόβλημα μπορεί να μην έχει πάντα λύση λόγω του επιπρόσθετου περιορισμού της περιοχής εμπιστοσύνης. Η ασυμβατότητα αυτή μεταξύ των περιορισμών επιλύεται στη περίπτωση ενός προβλήματος ισωτικών περιορισμών χρησιμοποιώντας μια διαδικασία επαναδιατύπωσης του υποπρόβληματος. Τέλος, περιγράφεται το ανεπιθύμητο φαινόμενο του να μην επιτρέπεται να ληφθούν πλήρη βήματα κοντά στη λύση, γνωστό ως το φαινόμενο του Μαράτου, καθώς επίσης και δύο στρατηγικές για να ξεπεραστούν οι δυσκολίες που συνδέονται με αυτό. Για κάθε μια από τις στρατηγικές αυτές δίνεται και ένα τοπικό αποτέλεσμα σύγκλισης.

ABSTRACT

The aim of this thesis is to study the solution of constrained nonlinear optimization problems using Sequential Quadratic Programming (SQP) method which has proved highly effective in practice. As with most optimization methods, SQP is not a single algorithm but rather a conceptual method from which numerous specific algorithms have evolved.

The basic idea of SQP method is to model the nonlinear optimization problem at a given approximate solution by a quadratic programming subproblem and then to use the solution of this subproblem to construct a better approximation. This process is repeated to create a sequence of approximate solutions that will converge to a solution of the nonlinear problem. The key to understanding the performance and theory of SQP method is the fact that with an appropriate choice of quadratic subproblem the method can be viewed as the extension of Newton method to the Karush-Kuhn-Tucker conditions for the nonlinear constrained problem.

In chapter one two fundamental strategies of unconstrained optimization for moving from the current iterate to a new iterate, the line search and the trust-region methods are studied. In the line search method the algorithm chooses a search direction at each iteration and then decides how far to move along that direction from the current iterate to a new point with a lower function value. Various termination conditions for these methods ensuring that the algorithm makes reasonable progress are presented and a line search algorithm is described. It is proved that global convergence of these methods is satisfied when both the step length and the search direction are chosen appropriately. Trust-region methods on the other hand use a quadratic model of the objective function and define a region around the current iterate within which the behavior of the model is similar to that of the objective function. Since the size of the trust region is critical to the effectiveness of each step, we give an algorithm describing the process of choosing this region. In the remaining part of this chapter we describe methods for finding approximate solutions of the quadratic model giving sufficient reduction of the objective function, as well as an iterative strategy for finding a better approximation to the solution of the trust region subproblem.

In chapter two we present the necessary theoretical concepts in regard to optimality conditions in order to fully understand the SQP method. In particular the way in which the so-called Lagrange multipliers are introduced is explained and the first and second order optimality conditions are presented.

In chapter three we discuss the Quasi-Newton methods for unconstrained optimization problems. In these methods the Hessian matrix of the objective function, the evaluation of which is difficult in practical problems, is approximated by a symmetric positive definite matrix. We investigate three types of updating formulae, the BFGS, the SR1 and the DFP update and describe its theoretical properties and practical implementation.

In chapter four we study the SQP method for nonlinear optimization. Initially we state the SQP algorithm in its simplest form and describe some step computation methods for both, equality and inequality constrained problems. The difficulties associated with the Hessian matrix of the Lagrangian function can be overcome by employing the BFGS and the SR1 update formulae for unconstrained optimization problems. Follows a brief overview of the merit functions used in SQP methods, as an approach to decide whether a trial step should be accepted. Specifically l_1 and Fletcher's penalty function are presented as well as different update rules for the penalty parameter so that the computed steps to be descent directions for the merit function. The chapter proceeds with the description of a Line Search SQP algorithm and a strategy for handling inconsistent linearization that gives rise to an infeasible subproblem. Following all the above we present two practical SQP algorithms for both, the case of full Hessian matrix approximation and the case of reduced Hessian matrix approximations. We also describe conditions that guarantee local and superlinear convergence of SQP methods that use both, the exact Hessian matrix of the problem and a Quasi-Newton variant of it. The discussion is limited to an equality constrained problem but the results presented can be applied to algorithms for inequality constrained problems. In trust-region SQP methods on the other hand, the quadratic subproblem may not always have a solution because of the additional trust-region constraint. This conflict between the constraints is resolved in case of an equality constrained problem using an approach that reformulates the subproblem. Finally, the undesirable phenomenon of not allowing full steps near the solution to be taken, known as the Maratos effect as well as two strategies to overcome the difficulties associated with it are described. For each of these strategies a local convergence result is given.

ΕΥΧΑΡΙΣΤΙΕΣ

Θα ήθελα να ευχαριστήσω θερμά τον επιβλέποντά μου Επίκουρο Καθηγητή της Σχολής Εφαρμοσμένων Μαθηματικών & Φυσικών Επιστημών του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου κ. Χρυσανφό Κωνσταντίνο, για τις υποδείξεις του και την καθοδήγηση που μου προσέφερε κατά τη διάρκεια εκπόνησης της εργασίας αυτής.

Περιεχόμενα.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1

1. Μέθοδοι αναζήτησης γραμμής και περιοχής εμπιστοσύνης.	1
1.1. Μέθοδοι αναζήτησης γραμμής.	1
1.1.1. Κατευθύνσεις έρευνας για τις μεθόδους αναζήτησης γραμμής.	2
1.1.2. Επιλογή του μήκους βήματος.	5
1.1.3. Σύγκλιση των μεθόδων αναζήτησης γραμμής.	10
1.1.4. Αλγόριθμος αναζήτησης γραμμής.	12
1.2. Μέθοδοι περιοχής εμπιστοσύνης.	16
1.2.1. Επιλογή της περιοχής εμπιστοσύνης.	18
1.2.2. Προσεγγιστικές λύσεις του υποπροβλήματος της περιοχής εμπιστοσύνης.	19
1.2.3. Σύγκλιση των μεθόδων περιοχής εμπιστοσύνης.	24
1.2.4. Σχεδόν ακριβείς λύσεις του υποπροβλήματος της περιοχής εμπιστοσύνης.	27

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2

2. Θεωρία βελτιστοποίησης προβλημάτων με περιορισμούς.	31
2.1. Εισαγωγή στους πολλαπλασιαστές Lagrange.	32
2.1.1. Πρόβλημα ισωτικών περιορισμών.	32
2.1.2. Πρόβλημα ανισωτικών περιορισμών.	34
2.2. Συνθήκες ελαχίστου 1 ^{ης} τάξης.	36
2.2.1. Αναγκαίες συνθήκες ελαχίστου 1 ^{ης} τάξης.	38
2.2.2. Ικανές συνθήκες ελαχίστου 1 ^{ης} τάξης.	42
2.3. Κυρτότητα.	42
2.3.1. Κυρτό πρόβλημα προγραμματισμού.	43
2.4. Συνθήκες ελαχίστου 2 ^{ης} τάξης.	45
2.4.1. Αναγκαίες συνθήκες ελαχίστου 2 ^{ης} τάξης.	45
2.4.2. Ικανές συνθήκες ελαχίστου 2 ^{ης} τάξης.	47
2.5. Απλοποιημένη μήτρα Hessian και ικανές συνθήκες ελαχίστου 2 ^{ης} τάξης.	48

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3

3. Μέθοδοι Quasi-Newton.	50
3.1. Η ανανέωση SR1.	51
3.2. Η ανανέωση DFP.	55
3.3. Η ανανέωση BFGS.	56
3.4. Σύγκλιση των μεθόδων Quasi-Newton.	57
3.4.1. Σύγκλιση της μεθόδου BFGS.	57
3.4.2. Σύγκλιση της μεθόδου SR1.	64

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4

4. Επαναληπτικός τετραγωνικός προγραμματισμός.	65
4.1. Εισαγωγή.	65
4.2. Εξάλειψη μεταβλητών σε μη γραμμικά προβλήματα βελτιστοποίησης με περιορισμούς.	69
4.3. Υπολογισμός της κατεύθυνσης έρευνας τετραγωνικών προβλημάτων.	73
4.3.1. Τετραγωνικό πρόβλημα με ισωτικούς περιορισμούς.	73
4.3.2. Τετραγωνικό πρόβλημα με ισωτικούς και ανισωτικούς περιορισμούς.	76
4.4. Η μήτρα Hessian του τετραγωνικού μοντέλου.	81
4.4.1. Quasi-Newton προσεγγίσεις της πλήρους μήτρας Hessian.	81
4.4.2. Quasi-Newton προσεγγίσεις της απλοποιημένης μήτρας Hessian.	83
4.5. Συναρτήσεις αξίας.	85

4.5.1. Εισαγωγή.	85
4.5.2. Ακριβείς μη διαφορίσιμες συναρτήσεις ποινής.	88
4.5.3. Ακριβείς διαφορίσιμες συναρτήσεις ποινής.	89
4.5.4. Συναρτήσεις αξίας και επαναληπτικός τετραγωνικός προγραμματισμός.	91
4.6. Επαναληπτικός τετραγωνικός προγραμματισμός με αναζήτηση γραμμής.	97
4.6.1. Αντιμετώπιση ασύμβατων περιορισμών - l_1 ελαστική διαδικασία.	98
4.6.2. Πρακτικός αλγόριθμος επαναληπτικού τετραγωνικού προγραμματισμού πλήρους Hessian με αναζήτηση γραμμής.	104
4.6.3. Πρακτικός αλγόριθμος επαναληπτικού τετραγωνικού προγραμματισμού απλοποιημένης μήτρας Hessian με αναζήτηση γραμμής.	105
4.7. Θεωρία Σύγκλισης.	106
4.7.1. Αλγόριθμος με ακριβείς δεύτερες παραγώγους.	106
4.7.2. Η εκδοχή Quasi-Newton του αλγόριθμου.	113
4.7.3. Γενική σύγκλιση.	114
4.7.4. Υπεργραμμική σύγκλιση.	117
4.8. Επαναληπτικός τετραγωνικός προγραμματισμός με τη μέθοδο περιοχής εμπιστοσύνης.	123
4.8.1. Τεχνική μετατόπισης των περιορισμών.	124
4.9. Το φαινόμενο του Μαράτου.	126
4.9.1. Βήμα αντιστάθμισης δεύτερης τάξης.	127
4.9.2. Μη-μονότονη στρατηγική Watchdog.	132
ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ	138
ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ	141

Κεφάλαιο 1

Μέθοδοι αναζήτησης γραμμής και περιοχής εμπιστοσύνης.

Όλοι οι αλγόριθμοι προβλημάτων ελαχιστοποίησης χωρίς περιορισμούς απαιτούν την εισαγωγή από τον χρήστη ενός αρχικού σημείου x_0 . Ο χρήστης απ' την μεριά του, με την γνώση της εφαρμογής και του συνόλου των δεδομένων, μπορεί να είναι σε θέση να επιλέξει το σημείο x_0 να είναι μία λογική εκτίμηση της λύσης ή σε διαφορετική περίπτωση το αρχικό σημείο επιλέγεται με τυχαίο τρόπο. Ξεκινώντας από το x_0 , οι αλγόριθμοι βελτιστοποίησης παράγουν μία ακολουθία επαναλήψεων $\{x_k\}$ η οποία τερματίζει είτε όταν δεν μπορεί να επιτευχθεί μεγαλύτερη πρόοδος, είτε όταν φαίνεται ότι μία λύση έχει προσεγγιστεί με μεγάλη ακρίβεια. Οι περισσότεροι αλγόριθμοι, προκειμένου να αποφανθούν πως να κινηθούν από την επανάληψη x_k στην επόμενη, χρησιμοποιούν όλη την διαθέσιμη πληροφορία σχετικά με την συνάρτηση f στην επανάληψη x_k , και πιθανών και από τις προηγούμενες επαναλήψεις $\{x_i\}_{i=0}^{k-1}$, υπολογίζοντας μία νέα επανάληψη x_{k+1} με μικρότερη τιμή της συνάρτησης στο σημείο αυτό από ότι στο x_k . Υπάρχουν και μη-μονότονοι αλγόριθμοι η οποίοι δεν επιμένουν στην μείωση της συνάρτησης f σε κάθε επανάληψη, αλλά ακόμη και αυτοί απαιτούν όσον αφορά την συνάρτηση f , να μειώνεται μετά από κάποιον καθορισμένο αριθμό επαναλήψεων.

Δύο βασικές στρατηγικές μετακίνησης από την τρέχουσα επανάληψη x_k , στην νέα επανάληψη x_{k+1} είναι οι μέθοδοι αναζήτησης γραμμής και οι μέθοδοι περιοχής εμπιστοσύνης οι οποίες εξετάζονται στη συνέχεια.

Στη συνέχεια, σε κάθε σημείο της εργασίας η νόρμα $\|\cdot\|$ θα συμβολίζει την διανυσματική νόρμα l_2 ή την αντίστοιχη παραγόμενη νόρμα πίνακα, με ∇f_k θα συμβολίζεται το διάνυσμα των κλίσεων της συνάρτησης f στο σημείο x_k δηλαδή $\nabla f_k = \nabla f(x_k)$ και με $\nabla^2 f_k$ θα συμβολίζεται η μήτρα δεύτερων παραγώγων ή μήτρα Hessian της συνάρτησης f στο σημείο x_k δηλαδή $\nabla^2 f_k = \nabla^2 f(x_k)$.

1.1 Μέθοδοι αναζήτησης γραμμής.

Στις μεθόδους αναζήτησης γραμμής (line search methods), ο αλγόριθμος επιλέγει μια κατεύθυνση έρευνας p_k και αναζητά κατά μήκος αυτής της κατεύθυνσης από την τρέχουσα επανάληψη x_k για μία νέα επανάληψη $x_{k+1} = x_k + a_k p_k$ με χαμηλότερη τιμή της συνάρτησης, όπου ο θετικός αριθμός a_k αποκαλείται μήκος βήματος. Στην νέα αυτή επανάληψη μια νέα κατεύθυνση έρευνας και ένα νέο μήκος βήματος υπολογίζονται και η διαδικασία επαναλαμβάνεται. Η επιτυχία

της μεθόδου εξαρτάται από τις αποτελεσματικές επιλογές της κατεύθυνσης έρευνας p_k και του μήκους βήματος a_k . Η κατεύθυνση έρευνας p_k συνήθως έχει τη μορφή $p_k = -B_k^{-1}\nabla f_k$ όπου B_k είναι ένας συμμετρικός και αντιστρέψιμος πίνακας.

- Στη μέθοδο της απότομης καθόδου, ο πίνακας B_k είναι απλά ο ταυτοτικός πίνακας I .
- Στη μέθοδο Newton, ο πίνακας B_k είναι ο πραγματικός πίνακας Hessian $\nabla^2 f(x_k)$.
- Στη μέθοδο Quasi-Newton, ο πίνακας B_k είναι μία προσέγγιση του πίνακα Hessian στο σημείο x_k η οποία ανανεώνεται σε κάθε επανάληψη μέσω ενός τύπου χαμηλού βαθμού.

Όταν το p_k ορίζεται από την σχέση $p_k = -B_k^{-1}\nabla f_k$ και ο πίνακας B_k είναι θετικά ορισμένος ισχύει ότι: $p_k^T \nabla f_k = -\nabla f_k^T B_k^{-1} \nabla f_k < 0$ και επομένως το p_k είναι μια κατεύθυνση καθόδου.

1.1.1 Κατευθύνσεις έρευνας για τις μεθόδους αναζήτησης γραμμής.

α). Η κατεύθυνση της πιο απότομης καθόδου.

Ένα μείζων θέμα συζήτησης στις μεθόδους αναζήτησης γραμμής, αποτελεί η επιλογή της κατεύθυνσης έρευνας p_k όπου η πιο προφανής επιλογή είναι η κατεύθυνση της πιο απότομης καθόδου $-\nabla f_k$. Η κατεύθυνση αυτή, είναι εκείνη κατά μήκος της οποίας η συνάρτηση f μειώνεται πιο γρήγορα. Η απαίτηση αυτή επιβεβαιώνεται από το θεώρημα Taylor (παράρτημα, εξίσωση Π.3) σύμφωνα με το οποίο, για κάθε κατεύθυνση έρευνας p και μήκος βήματος a ισχύει:

$$f(x_k + ap) = f(x_k) + ap^T \nabla f_k + \frac{1}{2} a^2 p^T \nabla^2 f(x_k + tp) p, \quad t \in (0, a) \quad (1.1)$$

Ο ρυθμός μεταβολής της f κατά μήκος της κατεύθυνσης p στο x_k είναι απλώς ο συντελεστή του a , δηλαδή $p^T \nabla f_k$. Γι' αυτό το λόγο, η μοναδιαία κατεύθυνση p της πιο ραγδαίας μείωσης, είναι η λύση του προβλήματος:

$$\min_p p^T \nabla f_k, \quad \|p\|=1 \quad (1.2)$$

Αφού $p^T \nabla f_k = \|p\| \|\nabla f_k\| \cos \theta$ όπου θ είναι η γωνία μεταξύ των p και ∇f_k , από την σχέση $\|p\|=1$ προκύπτει ότι $p^T \nabla f_k = \|\nabla f_k\| \cos \theta$ και η αντικειμενική συνάρτηση του προβλήματος (1.2) ελαχιστοποιείται όταν το $\cos \theta$ λαμβάνει την μικρότερη τιμή του -1 για $\theta = \pi$ ακτίνια. Άρα η λύση του προβλήματος (1.2) είναι η κατεύθυνση $p = -\nabla f_k / \|\nabla f_k\|$, κάθετη στις ισοϋψείς γραμμές της συνάρτησης. Η μέθοδος της πιο απότομης καθόδου δρα κατά μήκος της κατεύθυνσης $p_k = -\nabla f_k$ σε κάθε βήμα και έχει το πλεονέκτημα ότι απαιτεί μόνο τον υπολογισμό της κλίσης ∇f_k και όχι των 2^ον παραγώγων της f . Ωστόσο, λόγω του ότι μπορεί να είναι υπερβολικά βραδύα σε δύσκολα

προβλήματα, οι μέθοδοι αναζήτησης γραμμής ενδέχεται να χρησιμοποιούν κατευθύνσεις διαφορετικές από αυτή της πιο απότομης καθόδου. Γενικά, οποιαδήποτε κατεύθυνση καθόδου (που σχηματίζει μια γωνία μικρότερη από $\pi/2$ ακτίνια με το $-\nabla f_k$) εγγυάται την μείωση της f για αρκετά μικρό μήκος βήματος.

β). Η κατεύθυνση Newton.

Η κατεύθυνση Newton προκύπτει από την ελαχιστοποίηση της σειράς Taylor δεύτερης τάξης με την οποία προσεγγίζεται η συνάρτηση $f(x_k + p)$ και η οποία δίνεται από την σχέση:

$$m_k(p) = f_k + p^T \nabla f_k + \frac{1}{2} p^T \nabla^2 f_k p \approx f(x_k + p) \quad (1.3)$$

Απαιτώντας η μήτρα $\nabla^2 f_k$ να είναι θετικά ορισμένη η κατεύθυνση Newton είναι η εξής:

$$p_k^N = -\nabla^2 f_k^{-1} \nabla f_k \quad (1.4)$$

και είναι αξιόπιστη όταν η διαφορά μεταξύ της πραγματικής συνάρτησης $f(x_k + p)$ και του τετραγωνικού μοντέλου $m_k(p)$ αυτής δεν είναι πολύ μεγάλη. Από το θεώρημα Taylor έχουμε:

$$f(x_k + p) = f_k + \nabla f_k^T p + \frac{1}{2} p^T \nabla^2 f(x_k + tp) p, \quad t \in (0,1) \quad (1.5)$$

και άρα η μόνη διαφορά μεταξύ αυτών των συναρτήσεων είναι τό ότι η μήτρα $\nabla^2 f(x_k + tp)$ έχει αντικατασταθεί από την μήτρα $\nabla^2 f_k$. Για αρκετά λεία $\nabla^2 f(\cdot)$ η παραπάνω διαφορά, παράγει μια διαταραχή τάξης μεγέθους $O(\|p\|^3)$ στο ανάπτυγμα Taylor, έτσι που για μικρό $\|p\|$ η διαταραχή είναι μικρή και η προσέγγιση $f(x_k + p) \approx m_k(p)$ είναι αρκετά ακριβής.

Η κατεύθυνση Newton μπορεί να χρησιμοποιηθεί σε μία μεθοδο αναζήτησης γραμμής όταν η μήτρα $\nabla^2 f_k$ είναι θετικά ορισμένη, περίπτωση κατά την οποία χρησιμοποιώντας την (1.4):

$$\nabla f_k^T p_k^N = -\nabla f_k^T \nabla^2 f_k^{-1} \nabla f_k = -p_k^{N^T} \nabla^2 f_k p_k^N \quad (1.6)$$

και έτσι, εκτός εάν η κλίση ∇f_k είναι μηδενική, συνεπάγεται ότι $\nabla f_k^T p_k^N < 0$ δηλαδή η κατεύθυνση p_k είναι μια κατεύθυνση καθόδου.

Οι περισσότερες υλοποιήσεις της μεθόδου Newton με αναζήτηση γραμμής χρησιμοποιούν το μοναδιαίο βήμα ($a=1$) όπου είναι εφικτό, το οποίο προσαρμόζεται κατάλληλα μόνο όταν δεν προκαλεί ικανοποιητική μείωση της τιμής της συνάρτησης f . Όταν η μήτρα $\nabla^2 f_k$ δεν είναι θετικά ορισμένη η κατεύθυνση Newton ενδέχεται να μην ορίζεται καν αφού η μήτρα $\nabla^2 f_k^{-1}$ ίσως να μην υπάρχει, αλλά ακόμη και αν ορίζεται μπορεί να μην ικανοποιεί την ιδιότητα καθόδου και επομένως αποτελεί μια ακατάλληλη κατεύθυνση έρευνας.

Οι μέθοδοι οι οποίες χρησιμοποιούν την κατεύθυνση Newton p_k^N εμφανίζουν τετραγωνική

τοπική σύγκλιση (βλέπε παράρτημα). Όταν η τρέχουσα επανάληψη φτάσει σε μια γειτονιά της λύσης συνήθως επέρχεται σύγκλιση υψηλής ακρίβειας σε μόλις μερικές επαναλήψεις. Μια ουσιώδης αδυναμία της κατεύθυνσης Newton είναι η ανάγκη γνώσης της μήτρας Hessian $\nabla^2 f(x)$ ο σαφής υπολογισμός της οποίας είναι συνήθως, ωστόσο όχι πάντα, μια φορτική και δαπανηρή διαδικασία.

γ). Η κατεύθυνση έρευνας Quasi – Newton.

Οι κατευθύνσεις έρευνας Quasi-Newton αποτελούν μια ελυστική εναλλακτική, μιας και δεν απαιτούν τον υπολογισμό της μήτρας Hessian και επίσης επιτυγχάνουν υπεργραμμική σύγκλιση. Οι μέθοδοι αυτές χρησιμοποιούν στη θέση της πραγματικής μήτρας Hessian $\nabla^2 f_k$ μία προσέγγιση αυτής B_k , η οποία ανανεώνεται σε κάθε βήμα ώστε να λάβει υπόψη την πληροφορία που αποκτήθηκε κατά την διάρκεια του βήματος. Τυπικά, επιβάλλονται επιπρόσθετες απαιτήσεις στον πίνακα B_{k+1} όπως η συμμετρία αλλά και ο περιορισμός η διαφορά μεταξύ διαδοχικών προσεγγίσεων από τον πίνακα B_k στον B_{k+1} να είναι χαμηλού βαθμού.

Δύο δημοφιλείς τύποι ανανέωσης της προσέγγισης B_k της μήτρας Hessian είναι ο τύπος SR1 (*symmetric-rank-one*), και ο τύπος BFGS φερώνυμος των εφευρετών του, Broyden, Fletcher, Goldfarb, και Shanno. Η διαφορά μεταξύ των πινάκων B_k και B_{k+1} είναι ένας πίνακας βαθμού 1 στην περίπτωση του τύπου SR1 και ένας πίνακας βαθμού 2 στην περίπτωση του τύπου BFGS. Η κατεύθυνση έρευνας Quasi-Newton δίνεται από την σχέση (1.4) χρησιμοποιώντας τη μήτρα B_k στην θέση της πραγματικής μήτρας Hessian, δηλαδή:

$$p_k = -B_k^{-1} \nabla f_k \quad (1.7)$$

Κάποιες πρακτικές υλοποιήσεις των μεθόδων Quasi-Newton ανανεώνουν τον αντίστροφο πίνακα H_k του B_k αντί για τον ίδιο τον πίνακα B_k . Ο υπόλογισμός της κατεύθυνσης έρευνας p_k σε αυτή την περίπτωση διεκπεραιώνεται μέσω του τύπου:

$$p_k = -H_k \nabla f_k \quad (1.8)$$

και υλοποιείται μέσω του πολλαπλασιασμού πίνακα-διανύσματος, ο οποίος είναι απλούστερος από τη διαδικασία της παραγοντοποίησης/πίσω-αντικατάστασης που χρειάζεται για την υλοποίηση του τύπου (1.7).

δ). Η κατεύθυνση των συζυγών κλίσεων.

Οι κατευθύνσεις αυτές έχουν την μορφή:

$$p_k = -\nabla f_k + \beta_k p_{k-1} \quad (1.9)$$

όπου β_k είναι ένας αριθμός ο οποίος εξασφαλίζει ότι οι κατευθύνσεις p_k και p_{k-1} είναι συζυγείς.

Γενικά, οι κατευθύνσεις των συζυγών κλίσεων είναι αρκετά πιο ουσιαστικές από ότι η κατεύθυνση

της πιο απότομης καθόδου και περίπου το ίδιο απλές στον υπολογισμό τους. Οι μέθοδοι αυτές δεν επιτυγχάνουν τους γρήγορους ρυθμούς σύγκλισης των μεθόδων Newton ή Quasi-Newton, αλλά έχουν το πλεονέκτημα να μην απαιτείται αποθήκευση πινάκων στην μνήμη.

1.1.2 Επιλογή του μήκους βήματος.

Το ιδανικότερο μήκος βήματος a_k θα ήταν η λύση του ακόλουθου προβλήματος ελαχιστοποίησης

$$\min_{a>0} \varphi(a) \quad (1.10)$$

$$\text{όπου, } \varphi(a) = f(x_k + a_k p_k), \quad a_k > 0 \quad (1.11)$$

ωστόσο μια ακριβής ελαχιστοποίηση είναι χρονοβόρα και περιττή. Πιο πρακτικές στρατηγικές εκτελούν μια μη ακριβή αναζήτηση γραμμής για τον προσδιορισμό του μήκους βήματος που επιτυγχάνει επαρκή μείωση της συνάρτησης f με ελάχιστο κόστος.

Τα τελευταία χρόνια και παρακινούμενοι από την θεωρία σύμφωνα με την οποία η μέθοδος της πιο απότομης καθόδου μέσω μιας διαδικασίας ακριβούς αναζήτησης γραμμής συγκλίνει γενικά σε ένα στάσιμο σημείο της συνάρτησης, δηλαδή σε ένα σημείο όπου η κλίση της συνάρτησης είναι μηδέν, μια κοινή στρατηγική ήταν να επιλεγεί το a_k κοντά στην τιμή η οποία επιτυγχάνεται μέσω μιας ακριβούς αναζήτησης γραμμής. Ωστόσο, ο προσδιορισμός ακόμη και ενός τοπικού ελαχίστου της συνάρτησης φ ακόμη και με μέτρια ακρίβεια, απαιτεί γενικά σωρεία αποτιμήσεων της αντικειμενικής συνάρτησης f και πιθανών της κλίσης ∇f με μεγάλο υπολογιστικό κόστος.

Άλλοι ερευνητές εξασθένησαν την ανοχή της αναζήτησης γραμμής σημαντικά και χρησιμοποίησαν την ιδιότητα της καθόδου για να επιβάλουν τη μείωση της συνάρτησης κόστους σε κάθε επανάληψη. Μία απλή συνθήκη η οποία επιβάλλεται στο μήκος βήματος a_k , είναι να απαιτεί τη μείωση της τιμής της συνάρτησης f δηλαδή να ισχύει $f(x_k + a_k p_k) < f(x_k)$. Ωστόσο, η απαίτηση αυτή δεν επαρκεί για να επιφέρει σύγκλιση στη λύση x^* . Για παράδειγμα, αν η ελάχιστη τιμή της συνάρτησης είναι $f(x^*) = -1$, μια ακολουθία επαναλήψεων $\{x_k\}$ για τις οποίες $f(x_k) = 5/k$, $k = 0, 1, \dots$ αποφέρει μείωση σε κάθε επανάληψη αλλά η οριακή τιμή της συνάρτησης είναι μηδέν. Η πενιχρή μείωση της f σε κάθε βήμα γίνεται αιτία για την αποτυχία σύγκλισης στο σημείο ελαχίστου.

Το γεγονός αυτό οδήγησε στην ανάπτυξη ενός γενικά αποδεκτού συνόλου συνθηκών για τον τερματισμό της αναζήτησης γραμμής το οποίο διασφαλίζει επαρκή μείωση της f με ελάχιστο κόστος ενώ παράλληλα εγγυάται την γενική σύγκλιση.

Προς αποφυγήν αυτής της συμπεριφοράς, επιβάλλεται μια συνθήκη επαρκούς μειώσεως (*sufficient decrease condition*). Αν το \bar{a}_k δηλώνει την μικρότερη δυνατή θετική τιμή του a_k για την οποία $f(x_k + a_k p_k) = f(x_k)$ τότε επέρχεται μια αμελητέα μείωση της f αν $a_k \rightarrow \bar{a}_k$. Ο σκοπός της αναζήτησης γραμμής είναι η εύρεση ενός βήματος a_k το οποίο δεν πλησιάζει την τιμή \bar{a}_k . Μία δημοφιλής συνθήκη μη ακριβούς αναζήτησης γραμμής συνομολογεί ότι το a_k θα πρέπει πρωτίστως να οδηγεί σε επαρκή μείωση της αντικειμενικής συνάρτησης f , η οποία μετριέται από την ακόλουθη ανισότητα:

$$\varphi(a) = f(x_k + a_k p_k) \leq f(x_k) + c_1 a_k \nabla f_k^T p_k \quad (1.12)$$

για κάποια σταθερά $c_1 \in (0, 1)$. Με άλλα λόγια, η μείωση της f θα πρέπει να είναι ανάλογη τόσο με το μήκος βήματος a_k όσο και με την κατά κατεύθυνση παράγωγο $\nabla f_k^T p_k$ (βλέπε παράρτημα Π.7). Η ανισότητα (1.12) συχνά καλείται ως συνθήκη *Armijo*.

Το δεξί μέλος της (1.12) το οποίο είναι μια γραμμική συνάρτηση του a συμβολίζεται με $l(a)$. Η συνάρτηση $l(\cdot)$ έχει αρνητική κλίση $c_1 \nabla f_k^T p_k$ δεδομένου όμως ότι $c_1 \in (0, 1)$ εκτείνεται πάνω από το γράφημα της φ για μικρές θετικές τιμές του a . Η συνθήκη επαρκούς μειώσεως υποδηλώνει ότι το a γίνεται αποδεκτό μόνο εάν $\varphi(a) \leq l(a)$. Στην πράξη, η σταθερά c_1 επιλέγεται να είναι αρκετά μικρή, π.χ. $c_1 = 10^{-4}$.

Η συνθήκη επαρκούς μειώσεως δεν είναι αρκετή από μόνη της για να διασφαλίσει ότι ο αλγόριθμος κάνει μια εύλογη πρόοδο εξαιτίας του ότι ικανοποιείται για αρκετά μικρές τιμές του a και άρα είναι πολύ πιθανών να προκύψει πάλι αμελητέα μείωση της συνάρτησης αν $a_k \rightarrow 0$.

A. Οι Συνθήκες Goldstein.

Από όλα τα παραπάνω, ο σκοπός της αναζήτησης γραμμής είναι η εύρεση ενός μήκους βήματος a_k το οποίο δεν βρίσκεται κοντά στα ακραία σημεία του διαστήματος $[0, \bar{a}_k]$ επιφέροντας κατά αυτόν τον τρόπο σημαντική μείωση της συνάρτησης f σε κάθε επανάληψη. Απ' την άλλη μεριά και δεδομένου ότι η μήτρα Hessian αποτελεί την γενίκευση στον \mathbb{R}^n της έννοιας της καμπυλότητας μιας συνάρτησης (δηλαδή η θετική καμπυλότητα μιας συνάρτησης γενικεύεται στον \mathbb{R}^n ως θετικά ορισμένη μήτρα Hessian) είναι εξίσου σημαντικό όσον αφορά την απόδειξη της υπεργραμμικής σύγκλισης κάποιων μεθόδων, οι επιβαλλόμενες συνθήκες να μην αποκλείουν την τιμή ελαχιστοποίησης του a όταν η συνάρτηση $f(x_k + a_k p_k)$ είναι τετραγωνική με θετική καμπυλότητα, δηλαδή με θετικά ορισμένη μήτρα δευτέρων παραγώγων (f αυστηρά κυρτή).

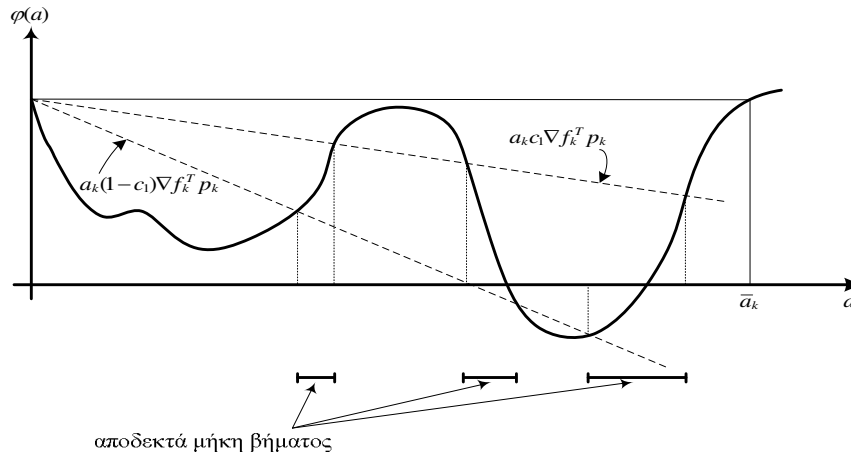
Οι συνθήκες οι οποίες συναντούν αμφότερες τις απαιτήσεις αυτές δίνονται από τον Goldstein και είναι:

$$f(x_k + a_k p_k) \leq f(x_k) + c_1 a_k \nabla f_k^T p_k \quad (1.13\alpha)$$

$$f(x_k + a_k p_k) \geq f(x_k) + (1 - c_1) a_k \nabla f_k^T p_k \quad (1.13\beta)$$

όπου $0 < c_1 < 1/2$ και το οποίο αποκλείει τα σημεία εκείνα κοντά στο δεξί και αριστερό άκρο του διαστήματος $[0, \bar{a}_k]$.

Όλα τα a τα οποία ικανοποιούν τις συνθήκες Goldstein απαρτίζουν τα διαστήματα των αποδεκτών μηκών βήματος όπως φαίνεται στο σχήμα.1.1 για μια μη τετραγωνική συνάρτηση.



Σχήμα.1.1 Οι συνθήκες Goldstein.

Γράφοντας την $f(x_k + a_k p_k)$ σαν $\varphi(a)$, οι (1.13α) και (1.13β) γράφονται αντίστοιχα ως εξής:

$$\varphi(a_k) \leq \varphi(0) + c_1 a_k \varphi'(0) \quad (1.14\alpha)$$

$$\varphi(a_k) \geq \varphi(0) + (1 - c_1) a_k \varphi'(0) \quad (1.14\beta)$$

και η συνθήκη καθόδου $p_k^T \nabla f_k < 0$ γίνεται $\varphi'(0) < 0$.

Αν η $f(x)$ είναι κυρτή τετραγωνική συνάρτηση της μορφής $f(x) = \frac{1}{2} x^T Q x - b^T x$ και άρα:

$$\varphi(a_k) = f(x_k + a_k p_k) = \frac{1}{2} (x_k + a_k p_k)^T Q (x_k + a_k p_k) - b^T (x_k + a_k p_k)$$

που ικανοποιεί τις ανοσότητες $\varphi'(0) < 0$ και $\varphi''(0) > 0$, τότε το γενικό ελάχιστο a^* της φ υπολογίζεται αναλυτικά - παραγωγίζοντας τη συνάρτηση $\varphi(a_k)$ ως προς a_k και θέτοντας τη παράγωγο ίση με

μηδέν - και δίνεται από τη σχέση $a_k^* = -\frac{\nabla f_k^T p_k}{p_k^T Q p_k}$. Επιπλέον η $\varphi(a_k)$ μπορεί να γραφτεί ως:

$$\varphi(a_k) = \frac{1}{2} x_k^T Q x_k - b^T x_k + a_k \left(\frac{1}{2} a_k p_k^T Q p_k - b^T p_k \right)$$

και το a_k^* ικανοποιεί την σχέση $\varphi(a_k^*) = \varphi(0) + \frac{1}{2} a_k^* \varphi'(0)$. Συνεπώς, η απαίτηση ότι $c_1 < 1/2$ επιτρέπει την ιδιότητα ότι η τιμή ελαχιστοποίησης μιας τετραγωνικής συνάρτησης είναι αποδεκτή δεδομένου ότι στην περίπτωση αυτή το a_k^* ικανοποιεί την σχέση (1.14α).

B. Οι συνθήκες Wolfe.

Όταν η $\varphi(a)$ δεν είναι τετραγωνική, η δεύτερη συνθήκη (1.14β) μπορεί να αποκλίσει το σημείο ελαχιστοποίησης της $\varphi(a)$ όπως φαίνεται στο σχήμα 1.1. Για τον λόγο αυτό, η συνθήκη αυτή μπορεί να αντικατασταθεί από ένα διαφορετικό έλεγχο των κλίσεων ο οποίος είναι ο εξής:

$$\varphi'(a_k) = \nabla f(x_k + a_k p_k)^T p_k \geq c_2 \nabla f_k^T p_k \quad (1.15)$$

για κάποια σταθερά $c_2 \in (c_1, 1)$.

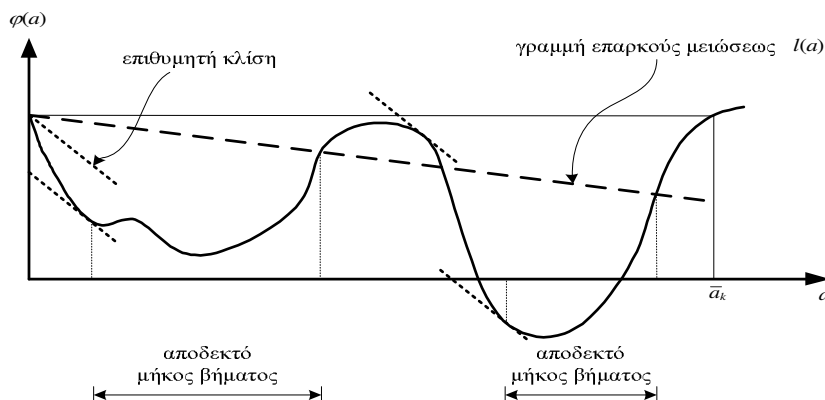
Η συνθήκη (1.15) καλείται συνθήκη καμπυλότητας και διασφαλίζει ότι η κλίση της φ στο a_k είναι μεγαλύτερη από c_2 φορές την αρχική κλίση $\varphi'(0)$. Αν η κλίση $\varphi'(a_k)$ είναι αυστηρά αρνητική, αυτό αποτελεί μια ένδειξη ότι η f μπορεί να μειωθεί σημαντικά προχωρώντας περαιτέρω κατά μήκος της επιλεγμένης κατεύθυνσης. Απ' την άλλη μεριά, αν η $\varphi'(a_k)$ είναι ελαφρώς αρνητική ή ακόμη και θετική, τότε έχει νόημα να τερματίσει η αναζήτηση γραμμής μιας και δεν αναμένεται πολύ μεγαλύτερη μείωση στην f σε αυτή την κατεύθυνση. Η συνθήκη επαρκούς μείωσης (1.12) και η συνθήκη καμπυλότητας (1.15) είναι γνωστές ως συνθήκες Wolfe και φαίνονται στο σχήμα 1.2.

Ένα μήκος βήματος όπως φαίνεται στο σχήμα 1.2, μπορεί να ικανοποιεί τις συνθήκες Wolfe χωρίς να βρίσκεται ιδιαίτερα κοντά σε ένα σημείο ελαχίστου της φ . Στην περίπτωση αυτή, η συνθήκη καμπυλότητας μπορεί να τροποποιηθεί να επιβάλει στο a_k να βρίσκεται σε μια τουλάχιστον ευρεία γειτονιά ενός τοπικού ελαχίστου ή ενός στάσιμου σημείου της φ . Οι αποκαλούμενες ισχυρές συνθήκες Wolfe είναι οι εξής:

$$f(x_k + a_k p_k) \leq f(x_k) + c_1 a_k \nabla f_k^T p_k \quad (1.16a)$$

$$|\nabla f(x_k + a_k p_k)^T p_k| \leq -c_2 \nabla f_k^T p_k \quad (1.16β)$$

Η μόνη διαφορά με τις συνθήκες Wolfe είναι το ότι η παράγωγος $\varphi'(a_k)$ δεν επιτρέπεται πλέον να είναι αρκετά θετική και γι' αυτό τα σημεία μακριά από τα στάσιμα σημεία της φ εξαιρούνται.



Σχήμα.1.2 Οι συνθήκες Wolfe.

Σύμφωνα με το ακόλουθο λήμμα για κάθε συνάρτηση f συνεχώς διαφορίσιμη και κάτω φραγμένη, υπάρχουν μήκη βήματος που ικανοποιούν τις συνθήκες Wolfe.

Λήμμα 1.1 ([2], Λήμμα 3.1, σελ. 35).

Έστω $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ συνεχώς διαφορίσιμη και κάτω φραγμένη κατά μήκος της ημιευθείας $\{x_k + a_k p_k \mid a > 0\}$. Έστω επίσης p_k μια κατεύθυνση καθόδου στο x_k . Τότε αν $0 < c_1 < c_2 < 1$, υπάρχουν διαστήματα από μήκη βήματος που ικανοποιούν τις συνθήκες Wolfe (1.12) και (1.15) και τις ισχυρές συνθήκες Wolfe (1.16α) και (1.16β).

□

A. Επαρκής μείωση και αντιστροφή θέσης (Backtracking).

Αν ο αλγόριθμος αναζήτησης γραμμής επιλέγει το υποψήφιο μήκος βήματος χρησιμοποιώντας την τεχνική αποκαλούμενη Αντιστροφής Θέσης (back-tracking approach), η συνθήκη επαρκούς μείωσης (1.12) είναι αρκετή από μόνη της ώστε να διασφαλίσει ότι ο αλγόριθμος κάνει εύλογη πρόοδο κατά μήκος της δοσμένης κατεύθυνσης έρευνας και επομένως η συνθήκη (1.15) δεν χρειάζεται.

Στην πιο βασική της μορφή, η διαδικασία αυτή προχωρεί σύμφωνα με τον αλγόριθμο 1.1 που ακολουθεί ([2], αλγόριθμος 3.1, σελ. 37):

Αλγόριθμος 1.1 (Αλγόριθμος Αντιστροφής Θέσης)

Choose $\tilde{a} > 0$, $\rho \in (0,1)$, $c_1 \in (0,1)$

Set $a = \tilde{a}$

Repeat until $f(x_k + a p_k) \leq f(x_k) + c_1 a \nabla f_k^T p_k$
 $a = \rho a$

End (repeat)

Terminate with $a_k = a$

Στις μεθόδους Newton και Quasi-Newton το αρχικό βήμα \tilde{a} επιλέγεται να είναι μονάδα και σε άλλους αλγόριθμους μπορεί να έχει διαφορετικές τιμές.

Η Αντιστροφής Θέσης, εξασφαλίζει είτε ότι το επιλεγμένο μήκος βήματος a_k είναι κάποια σταθερή τιμή (η αρχική επιλογή \tilde{a}), ή διαφορετικά ότι είναι αρκετά μικρό ώστε να ικανοποιεί την συνθήκη επαρκούς μείωσης (1.12) αλλά όχι πολύ μικρό, δεδομένου ότι είναι ανάλογο με ένα παράγοντα ρ του προηγούμενου δοκιμαστικού βήματος το οποίο είχε απορρηφθεί λόγω παραβίασης της συνθήκης (1.12).

1.1.3 Σύγκλιση των μεθόδων αναζήτησης γραμμής.

Γενική σύγκλιση επιτυγχάνεται, όχι μόνο μέσω καλά επιλεγμένων μηκών βήματος αλλά και μέσω καλά επιλεγμένων κατευθύνσεων, δεδομένου ότι οι μειώσεις στην f είναι πιθανόν να είναι αμελητέες αν οι κατευθύνσεις p_k επιλεγθούν έτσι που να πλησιάζουν να είναι ορθογώνιες στο διάνυσμα κατεύθυνσης της πιο απότομης καθόδου. Δεδομένου ότι η γωνία θ_k μεταξύ του p_k και της κατεύθυνσης της πιο απότομης καθόδου $-\nabla f_k$ ορίζεται με τη σχέση:

$$\cos \theta_k = \frac{-\nabla f_k^T p_k}{\|\nabla f_k\| \|p_k\|} \quad (1.17)$$

η πιθανότητα αυτή μπορεί να αποκλιστεί, αν το p_k ικανοποιεί το κριτήριο ότι η γωνία θ_k είναι ομοιόμορφα φραγμένη μακριά από τις 90° , δηλαδή $\theta_k \leq \frac{\pi}{2} - \mu \quad \forall k, \mu > 0$. Με τον περιορισμό αυτόν, η γενική σύγκλιση μιας μεθόδου με μη ακριβή αναζήτηση γραμμής βασιζόμενη στις συνθήκες Wolfe, τέτοια ώστε ένα κριτήριο τερματισμού ($\|\nabla f_k\| \leq \varepsilon$) ικανοποιείται πάντα για k αρκετά μεγάλο, αποδεικνύεται με την βοήθεια του ακόλουθου θεωρήματος του Zoutendijk.

Θεώρημα 1.2 ([2], Θεώρημα 3.2, σελ. 38).

Έστω οποιαδήποτε επανάληψη της μορφής $x_{k+1} = x_k + a_k p_k$ όπου το p_k είναι μια κατεύθυνση καθόδου και το a_k ικανοποιεί τις συνθήκες Wolfe (1.12) και (1.15). Έστω επίσης η f είναι κάτω φραγμένη στον \mathbb{R}^n και συνεχώς διαφορίσιμη σε ένα ανοιχτό σύνολο N που περιλαμβάνει το σύνολο στάθμης $L \stackrel{def}{=} \{x : f(x) \leq f(x_o)\}$, όπου το x_o είναι το αρχικό σημείο της επανάληψης. Έστω, τέλος ότι η ∇f είναι Lipschitz συνεχής στο N δηλαδή:

$$\exists L > 0 : \|\nabla f(x) - \nabla f(\tilde{x})\| \leq L \|x - \tilde{x}\|, \quad \forall x, \tilde{x} \in N \quad (1.18)$$

$$\text{Τότε } \sum_{k \geq 0} \cos^2 \theta_k \|\nabla f_k\|^2 < \infty \quad (1.19)$$

Απόδειξη

Από την (1.15) και την επανάληψη $x_{k+1} = x_k + a_k p_k$ προκύπτει ότι: $(\nabla f_{k+1} - \nabla f_k)^T p_k \geq (c_2 - 1) \nabla f_k^T p_k$. Επίσης η (1.18) υποδηλώνει ότι $(\nabla f_{k+1} - \nabla f_k)^T p_k \leq \|(\nabla f_{k+1} - \nabla f_k)^T p_k\| \leq L \|x_{k+1} - x_k\| \leq a_k L \|p_k\|^2$.

Συνδυάζοντας αυτές τις δύο σχέσεις έπεται ότι $a_k \geq \frac{c_2 - 1}{L} \frac{\nabla f_k^T p_k}{\|p_k\|^2}$ και αντικαθιστώντας την ανισότητα αυτή στην πρώτη συνθήκη Wolfe (1.12) προκύπτει:

$$f_{k+1} \leq f_k - c_1 \frac{1 - c_2}{L} \frac{(\nabla f_k^T p_k)^2}{\|p_k\|^2} \stackrel{(1.17)}{\Rightarrow} f_{k+1} \leq f_k - c \cos^2 \theta_k \|\nabla f_k\|^2, \quad c = \frac{c_1(1 - c_2)}{L}$$

Αθροίζοντας για όλους τους δείκτες $\leq k$ παίρνουμε: $f_{k+1} \leq f_o - c \sum_{j=0}^k \cos^2 \theta_j \|\nabla f_j\|^2$

Παίρνοντας το όριο στην πιο πάνω έκφραση και λαμβάνοντας υπόψη ότι η f είναι κάτω φραγμένη και η διαφορά $f_o - f_{k+1}$ είναι μικρότερη από κάποια θετική σταθερά, προκύπτει η (1.19).

□

Οι υποθέσεις του θεωρήματος 1.2 δεν είναι πολύ απαγορευτικές. Αν η συνάρτηση f δεν ήταν κάτω φραγμένη το πρόβλημα βελτιστοποίησης δεν θα ήταν καλώς ορισμένο. Απ' την άλλη μεριά, η Lipschitz συνέχεια της ∇f_k (υπόθεση λειότητας) ικανοποιείται συχνά στην πράξη.

Η συνθήκη Zoutendijk (1.19) υποδηλώνει ότι $\cos^2 \theta_k \|\nabla f_k\|^2 \rightarrow 0$ και αν η μέθοδος επιλογής της κατεύθυνσης έρευνας p_k διασφαλίζει ότι η γωνία θ_k είναι φραγμένη μακριά από τις 90° , υπάρχει θετική σταθερά δ τέτοια ώστε $\cos \theta_k \geq \delta > 0 \quad \forall k$ και άρα προκύπτει άμεσα ότι $\lim_{k \rightarrow \infty} \|\nabla f_k\| = 0$ και επομένως ικανοποιείται η αναγκαία συνθήκη ελαχίστου πρώτης τάξης προβλημάτων χωρίς περιορισμούς.

Ειδικότερα, αυτό το κριτήριο αναφορικά με την γωνία ικανοποιείται από την μέθοδο της πιο απότομης καθόδου με $\theta_k = 0$.

Απ' την άλλη μεριά, στις μεθόδους Newton και Quasi-Newton στις οποίες το p_k ορίζεται μέσω της σχέσης $p_k = -B_k \nabla f_k$, μία ικανή συνθήκη αναφορικά με το κριτήριο της γωνίας είναι ο δείκτης κατάστασης (ο λόγος $\frac{\lambda_i}{\lambda_n}$ της μεγαλύτερης προς τη μικρότερη ιδιοτιμή του B_k) να είναι άνω φραγμένος δηλαδή να υπάρχει μια σταθερά M τέτοια ώστε:

$$\|B_k\| \|B_k^{-1}\| \leq M, \quad \forall k \quad (1.20)$$

προκύπτει από τον ορισμό (1.17) ότι: $\cos \theta_k \geq \frac{1}{M}$ και άρα $\lim_{k \rightarrow \infty} \|\nabla f_k\| = 0$.

Ωστόσο, για τους περισσότερους απ' τους καλούς στην πράξη αλγόριθμους, όπως ο αλγόριθμος συζυγών κλίσεων, δεν έχει καταστεί δυνατόν να αποδειχθεί ότι το κριτήριο όσον αφορά τη γωνία ικανοποιείται. Στην περίπτωση αυτή αντί της συνθήκης γενικής σύγκλισης $\nabla f_k \rightarrow 0$ αποδεικνύεται η ασθενέστερη συνθήκη $\liminf_{k \rightarrow \infty} \|\nabla f_k\| = 0$, ότι δηλαδή απλώς μία υπακολουθία των νορμών $\|\nabla f_{k_j}\|$ συγκλίνει στο μηδέν αντί για ολόκληρη την ακολουθία.

Το αποτέλεσμα αυτό αποδεικνύεται με εις άτοπο απαγωγή ως ακολούθως: Έστω ότι $\liminf_{k \rightarrow \infty} \|\nabla f_k\| \neq 0$ δηλαδή $\exists \gamma > 0$ τέτοιο ώστε $\|\nabla f_k\| \geq \gamma \quad \forall k$. Προκύπτει από $\cos^2 \theta_k \|\nabla f_k\|^2 \rightarrow 0$, ότι $\cos \theta_k \rightarrow 0$ και άρα ολόκληρη η ακολουθία $\{\cos \theta_k\}$ συγκλίνει στο μηδέν.

1.1.4 Αλγόριθμος αναζήτησης γραμμής.

Στις τεχνικές εύρεσης του σημείου ελαχίστου της συνάρτησης $\varphi(a) = f(x_k + a_k p_k)$ ή απλώς της εύρεσης ενός μήκους βήματος a_k που να κανοποιεί μια από τις συνθήκες τερματισμού όπως αυτές περιγράφηκαν στο εδάφιο 1.1.2, θεωρείται ότι το p_k είναι μια κατεύθυνση καθόδου δηλαδή, $\varphi'(0) < 0$. Αν η f είναι τετραγωνική κυρτή συνάρτηση, το σημείο ελαχίστου αυτής κατά μήκος της ημιευθείας $x_k + a_k p_k$ δίνεται αναλυτικά από την σχέση $a_k = -\frac{\nabla f_k^T p_k}{p_k^T Q p_k}$. Ωστόσο, για γενικές μη-γραμμικές συναρτήσεις είναι αναγκαίο να γίνει χρήση μιας επαναληπτικής διαδικασίας.

Όλες οι διαδικασίες αναζήτησης γραμμής απαιτούν μια αρχική εκτίμηση a_0 και παράγουν μία ακολουθία $\{a_i\}$ η οποία είτε τερματίζει με την εύρεση ενός μήκους βήματος το οποίο ικανοποιεί τις καθορισμένες από τον χρήστη συνθήκες (για παράδειγμα τις συνθήκες Wolfe) είτε αποφασίζουν ότι ένα τέτοιο μήκος βήματος δεν υπάρχει. Υπάρχουν δύο ξεχωριστά τμήματα σε κάθε αλγόριθμο αναζήτησης γραμμής:

1. η φάση ταξινόμησης (*bracketing phase*) η οποία προσδιορίζει ένα διάστημα $[\bar{a}, \bar{b}]$ το οποίο συμπεριλαμβάνει αποδεκτά μήκη βήματος και
2. η φάση επιλογής (*selection phase*) η οποία εστιάζει στο να εντοπίσει το τελικό μήκος βήματος. Η φάση επιλογής συνήθως μειώνει το διάστημα ταξινόμησης κατά την διαδικασία εντόπισμού του επιθυμητού μήκους βήματος.

Επιπρόσθετα, δεδομένου ότι είναι προτιμότερη η εύρεση ενός αποδεκτού σημείου το οποίο να είναι κοντά σε ένα τοπικό ελάχιστο της συνάρτησης $\varphi(a)$, είναι καλό να γίνει κάποιο είδος παρεμβολής με την προσαρμογή ενός τετραγωνικού ή κυβικού πολυωνύμου του a σε γνωστές συναρτήσεις και στις παραγώγους τους και εν' συνεχεία η επιλογή της νέας επανάληψης να γίνει έτσι ώστε να ελαχιστοποιείται το πολυώνυμο αυτό.

Η διαδικασία αναζήτησης γραμμής που βασίζεται στην παρεμβολή των τιμών της συνάρτησης φ και των παραγώγων αυτής μπορεί να θεωρηθεί σαν επαύξηση του αλγόριθμου Αντιστροφής Θέσης (Backtracking Algorithm). Ο στόχος είναι η εύρεση μιας τιμής του μήκους βήματος a , που να ικανοποιεί την συνθήκη επαρκούς μείωσης (1.12) χωρίς να είναι "πολύ μικρή". Ανάλογα, οι εδώ διαδικασίες παράγουν μια φθίνουσα ακολουθία τιμών a_i τέτοια ώστε κάθε a_i δεν είναι πολύ μικρότερο από το προηγούμεν a_{i-1} .

➤ Αλγόριθμος αναζήτησης γραμμής για τις συνθήκες Wolfe.

Έστω p μια κατεύθυνση καθόδου και η f είναι κάτω φραγμένη κατά μήκος της κατεύθυνσης

p προς αποφυγή της πιθανότητας το γράφημα της $\varphi(a)$ να μην τέμνει ποτέ τη γραμμή $l(a)$. Δεδομένου ενός διαστήματος $[a_{i-1}, a_i]$, μια διαδικασία έρευνας η οποία εγγυάται την εύρεση ενός μήκους βήματος που να ικανοποιεί τις αυστηρές συνθήκες Wolfe για κάθε c_1, c_2 με $0 < c_1 < c_2 < 1$, χρησιμοποιεί την γνώση ότι το διάστημα αυτό συμπεριλαμβάνει μήκη βήματος που ικανοποιούν τις συνθήκες Wolfe, εάν ικανοποιείται μια από τις επόμενες τρεις συνθήκες.

- i. Το a_i παραβιάζει την συνθήκη επαρκούς μειώσεως
- ii. $\varphi(a_i) \geq \varphi(a_{i-1})$
- iii. $\varphi'(a_i) \geq 0$

Το πρώτο στάδιο του αλγόριθμου δηλαδή η φάση ταξινόμησης (Bracketing phase) ξεκινάει με μία δοκιμαστική εκτίμηση a_i την οποία και συνεχώς αυξάνει έως ότου βρεθεί είτε ένα αποδεκτό μήκος βήματος είτε ένα διάστημα ταξινόμησης των επιθυμητών βημάτων. Στην δεύτερη περίπτωση, ακολουθεί η φάση επιλογής (selection phase), καλώντας μία συνάρτηση η οποία αποκαλείται συνάρτηση εστίασης (zoom function) και η οποία μειώνει διαδοχικά το μέγεθος του διαστήματος έως ότου αναγνωριστεί ένα αποδεκτό μήκος βήματος.

Αρχικά δίνεται το διάστημα $[a_0, a_{\max}]$ όπου το a_0 τίθεται ίσο με το μηδέν και το a_{\max} αποτελεί ένα φράγμα του μέγιστου επιτρεπτού μήκους βήματος οριζόμενο από τον χρήστη. Αν ο χρήστης είναι σε θέση να παράσχει ένα κάτω $\bar{\varphi}$ φράγμα της $\varphi(a)$ τότε ως a_{\max} λαμβάνεται το σημείο τομής της γραμμής $l(a)$ με $\bar{\varphi}$ την: $a_{\max} = \frac{\bar{\varphi} - \varphi(0)}{c_1 \varphi'(0)}$.

Ο αλγόριθμος αναζήτησης γραμμής τερματίζει με ένα μήκος βήματος a^* που ικανοποιεί τις αυστηρές συνθήκες Wolfe, παράγοντας μια μονότονα φθίνουσα ακολουθία δοκιμαστικών μηκών βήματος $\{a_i\}$ και περιγράφεται ως ακολούθως ([2], Αλγόριθμος 3.5, σελ. 60).

Το τελευταίο βήμα του αλγόριθμου εκτελεί μια πολυωνυμική παρεμβολή για την εύρεση της επόμενης δοκιμαστικής τιμής a_{i+1} ή απλώς καθιστά το a_{i+1} να είναι ένα σταθερό πολλαπλάσιο του a_i . Αν λάβει χώρα τερματισμός της φάσης ταξινόμησης τότε είναι πλέον γνωστό ένα διάστημα ταξινόμησης (a_{lo}, a_{hi}) και στην περίπτωση αυτή μπαίνει σε λειτουργία η φάση επιλογής καλώντας την συνάρτηση εστίασης (zoom function) με ορίσματα εισόδου τα a_{lo} και a_{hi} . Η διάταξη των ορισμάτων εισόδου με τα οποία τροφοδοτείται η συνάρτηση εστίασης μπορεί να διαφέρει, έτσι που το διάστημα ταξινόμησης (a_{lo}, a_{hi}) να ικανοποιεί τις ακόλουθες ιδιότητες:

- i. Το a_{lo} είναι μεταξύ όλων των μηκών βήματος παραγόμενα μέχρι στιγμής και τα οποία ικανοποιούν την συνθήκη επαρκούς μειώσεως, αυτό που δίνει την μικρότερη τιμή της συνάρτησης.

- ii. Το a_{hi} επιλέγεται έτσι που να ισχύει $\varphi'(a_{lo})(a_{hi}-a_{lo}) < 0$ και το $\varphi'(a_{lo})$ να μην ικανοποιεί την ανισότητα $|\varphi'(a_{lo})| \leq -c_2 \varphi'(0)$
- iii. Το a_{hi} ικανοποιεί είτε $\varphi(a_{hi}) > \varphi(0) + a_{hi} c_1 \varphi'(0)$ είτε $\varphi(a_{hi}) \geq \varphi(a_{lo})$

Αλγόριθμος 1.2 (Αλγόριθμος Αναζήτησης Γραμμής)

Set $a_0=0$, choose $a_{\max} > 0$ and $a_1 \in (0, a_{\max})$

For $i=1, \dots$ repeat

Evaluate $\varphi(a_i)$

if $\varphi(a_i) > \varphi(0) + c_1 a_i \varphi'(0)$ or $[\varphi(a_i) \geq \varphi(a_{i-1})$ and $i > 1]$

$a_{lo_i} = a_{i-1}$ $a_{hi_i} = a_i$, terminate bracket phase

$a^* = \text{zoom}(a_{i-1}, a_i)$ and stop

Evaluate $\varphi'(a_i)$

if $|\varphi'(a_i)| \leq -c_2 \varphi'(0)$

$a^* = a_i$ and stop

if $\varphi'(a_i) \geq 0$

$a_{lo_i} = a_i$, $a_{hi_i} = a_{i-1}$, terminate bracket phase

$a^* = \text{zoom}(a_i, a_{i-1})$ and stop

Choose $a_{i+1} \in (a_i, a_{\max})$

$i=i+1$

end (repeat)

Για ένα τέτοιο διάστημα ταξινόμησης το οποίο ικανοποιεί τις ιδιότητες (i), (ii) και (iii) αποδεικνύεται ([1], Λήμμα 2.6.1, σελ. 35) ότι περιλαμβάνει ένα διάστημα αποδεκτών μηκών βήματος που ικανοποιούν τις αυστηρές συνθήκες Wolfe και επομένως η φάση ταξινόμησης έχει πετύχει τον σκοπό της, την εύρεση δηλαδή ενός διαστήματος αποδεκτών μηκών βήματος.

Απ' την άλλη μεριά, η φάση επιλογής παράγει μια ακολουθία διαστημάτων $[a_{lo_j}, a_{hi_j}]$, $j=i+1, \dots$ το μήκος των οποίων τείνει στο μηδέν. Κάθε επανάληψη επιλέγει ένα νέο δοκιμαστικό σημείο a_j στο $[a_{lo_j}, a_{hi_j}]$ και το επόμενο διάστημα είναι είτε $[a_{lo_j}, a_j]$ ή $[a_j, a_{lo_j}]$ ή $[a_j, a_{hi_j}]$ η επιλογή του οποίου γίνεται, έτσι ώστε να ικανοποιούνται οι ιδιότητες (i), (ii) και (iii). Η φάση επιλογής τερματίζει με $a^* = a$ όταν το τρέχων δοκιμαστικό σημείο a_j βρίσκεται ότι ικανοποιεί τις αυστηρές συνθήκες Wolfe. Ο αλγόριθμος που εκτελείται κατά τη φάση επιλογής μέσω της συνάρτησης εστίασης περιγράφεται ως ακολούθως ([2], Αλγόριθμος 3.6, σελ. 61).

Εάν η νέα εκτίμηση a_j ικανοποιεί τις αυστηρές συνθήκες Wolfe τερματίζει με $a^* = a_j$. Διαφορετικά αν το a_j ικανοποιεί τη συνθήκη επαρκούς μείωσης και έχει μικρότερη τιμή της συνάρτησης απ' ότι το a_{lo_j} θέτουμε $a_{lo_{j+1}} = a_j$ έτσι ώστε να διατηρηθεί η συνθήκη (i). Αν αυτή η ενέργεια έχει σαν αποτέλεσμα την παραβίαση της συνθήκης (ii) η κατάσταση διορθώνεται θέτοντας στο $a_{hi_{j+1}}$ την προηγούμενη τιμή a_{lo} δηλαδή $a_{hi_{j+1}} = a_{lo_j}$.

Αλγόριθμος 1.3 (Συνάρτηση Εστίασης)for $j=i, i+1, \dots$ repeatInterpolate to find a trial step length $a_j \in (a_{loj}, a_{hi_j})$ Evaluate $\varphi(a_j)$ If $\varphi(a_j) > \varphi(0) + c_1 a_j \varphi'(0)$ or $\varphi(a_j) \geq \varphi(a_{o_j})$ $a_{lo_{j+1}} = a_{lo_j}, a_{hi_{j+1}} = a_j$ else evaluate $\varphi'(a_j)$ if $|\varphi'(a_j)| \leq -c_2 \varphi'(0)$ $a^* = a_j$ and stop $a_{lo_{j+1}} = a_j$ else if $\varphi'(a_j)(a_{hi_j} - a_{lo_j}) \geq 0$ $a_{hi_{j+1}} = a_{lo_j}$ else $a_{hi_{j+1}} = a_{hi_j}$

end (repeat)

Η επιλογή του $a_{i+1} \in (a_i, a_{\max})$ στην φάση ταξινόμησης ή η επιλογή του $a_j \in (a_{lo_j}, a_{hi_j})$ στην φάση επιλογής, μπορεί να πραγματοποιηθεί με οποιοδήποτε τρόπο. Μια λογική επιλογή θα ήταν η ελαχιστοποίηση στο δεδομένο διάστημα ενός τετραγωνικού ή κυβικού πολυωνύμου του a , το οποίο παρεμβάλλει γνωστά δεδομένα αναφορικά με την συνάρτηση και τις παραγώγους αυτής. Αυτό επιτυγχάνεται χρησιμοποιώντας την ακόλουθη αποτελεσματική διαδικασία, αποτελεσματική υπό την έννοια ότι υπολογίζει την παράγωγο $\nabla f(x)$ όσο το δυνατόν λιγότερες φορές.

Δοσμένου ενός διαστήματος $[0, a_o]$ και των τιμών $\varphi(0), \varphi'(0), \varphi(a_o)$ και αν $\varphi(a_o) \geq \varphi(0) + c_1 a_o \varphi'(0)$, δηλαδή είναι γνωστό ότι το διάστημα $(0, a_o)$ περιέχει αποδεκτά μήκη βήματος, σχηματίζεται μια τετραγωνική προσέγγιση $\varphi_q(a)$ της φ παρεμβάλλοντας την διαθέσιμη πληροφορία $\varphi(0), \varphi'(0), \varphi(a_o)$ ως εξής:

$$\varphi_q(a) = \left[\frac{\varphi(a_o) - \varphi(0) - a_o \varphi'(0)}{a_o^2} \right] a^2 + \varphi'(0)a + \varphi(0) \quad (1.21)$$

έτσι που να ικανοποιεί τις συνθήκες παρεμβολής: $\varphi_q(0) = \varphi(0)$, $\varphi'_q(0) = \varphi'(0)$ και $\varphi_q(a_o) = \varphi(a_o)$. Η νέα δοκιμαστική τιμή a_1 ορίζεται ως το σημείο ελαχίστου της (1.21) το οποίο είναι:

$$a_1 = \frac{\varphi'(0)a_o^2}{2[\varphi(a_o) - \varphi(0) - \varphi'(0)a_o]} \quad (1.22)$$

Αν ικανοποιούνται οι αυστηρές συνθήκες Wolfe στο a_1 η έρευνα τερματίζεται, διαφορετικά κατασκευάζεται μια κυβική συνάρτηση που παρεμβάλλει τα $\varphi(0), \varphi'(0), \varphi(a_o)$ και $\varphi(a_1)$ ως εξής:

$$\varphi_c(a) = k_1 a^3 + k_2 a^2 + a \varphi'(0) + \varphi(0)$$

$$\text{όπου } \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \frac{1}{a_o^2 a_1^2 (a_1 - a_o)} \cdot \begin{bmatrix} a_o^2 & -a_1^2 \\ -a_o^3 & a_1^3 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \varphi(a_1) - \varphi(0) - \varphi'(0)a_1 \\ \varphi(a_o) - \varphi(0) - \varphi'(0)a_o \end{bmatrix} \quad (1.23)$$

Το σημείο ελαχίστου a_2 της $\varphi_c(a)$ βρίσκεται στο διάστημα $[0, a_1]$ και δίνεται από:

$$a_2 = \frac{-b + \sqrt{b^2 - 3a\phi(0)}}{3a}$$

Εάν είναι αναγκαίο, η διαδικασία αυτή επαναλαμβάνεται χρησιμοποιώντας μια κυβική παρεμβολή των $\phi(0)$, $\phi'(0)$ και των δύο πιο πρόσφατων τιμών της ϕ έως ότου εντοπιστεί ένα μήκος βήματος a που να ικανοποιεί την σχέση $\phi(a) \leq \phi(0) + c_1 a \phi'(0)$.

Αν κάποιο a_i είναι είτε πολύ κοντά στο προηγούμενο αυτού a_{i-1} είτε αρκετά μικρότερο από το a_{i-1} τότε τίθεται $a_i = a_{i-1}/2$ έτσι που διασφαλίζεται λογική πρόοδος σε κάθε επανάληψη καθώς επίσης και το ότι η τελική τιμή του a δεν είναι πολύ μικρή. Μια άλλη πρακτική διαδικασία η οποία περιορίζει το a_j από το να είναι αυθαιρέτως κοντά στα ακραία σημεία του δοσμένου διαστήματος $[a, b]$, είναι να επιλεγεί το a_j έτσι ώστε $a_j \in [a + \tau_2(b-a), b - \tau_3(b-a)]$ με τυπικές τιμές $\tau_2 = 1/10$ και $\tau_3 = 1/2$.

1.2 Μέθοδοι περιοχής εμπιστοσύνης.

Οι μέθοδοι της περιοχής εμπιστοσύνης (trust region methods) χρησιμοποιούν επίσης ένα τετραγωνικό μοντέλο m_k της συνάρτησης κόστους – βασισμένο στο ανάπτυγμα σε σειρά Taylor της f γύρω από το τρέχον σημείο x_k - όπως και οι μέθοδοι αναζήτησης γραμμής - ωστόσο χρησιμοποιούν το μοντέλο αυτό με διαφορετικό τρόπο. Το κίνητρο των μεθόδων αυτών είναι να παρακαμφθούν οι δυσκολίες που προκαλούνται από τις μη θετικά ορισμένες μήτρες Hessian στην μέθοδο Newton όπου το m_k δεν έχει ένα μοναδικό σημείο ελαχίστου και η μέθοδος δεν ορίζεται. Λόγω του ότι το μοντέλο m_k ίσως να μην είναι μια καλή προσέγγιση της f οι μέθοδοι αυτές ορίζουν μια περιοχή γύρω από την τρέχουσα επανάληψη μέσα στην οποία εμπιστεύονται το μοντέλο να αποτελεί μια καλή απεικόνιση της αντικειμενικής συνάρτησης και επιλέγουν το βήμα έτσι ώστε να είναι το προσεγγιστικό σημείο ελαχίστου του μοντέλου αυτού μέσα σε αυτήν την περιοχή. Κατ' ουσίαν, η επιλογή της κατεύθυνσης και του μήκους του βήματος γίνεται ταυτόχρονα. Αν ένα βήμα δεν γίνεται αποδεκτό οι μέθοδοι αυτές μειώνουν το μέγεθος της περιοχής και υπολογίζουν ένα νέο σημείο ελαχίστου.

Το ανάπτυγμα σε σειρά Taylor της f γύρω από το x_k δίνεται από την (1.7) και είναι:

$$f(x_k + p) = f_k + \nabla f_k^T p + \frac{1}{2} p^T \nabla^2 f(x_k + tp) p, \quad t \in (0,1) \quad (1.24)$$

Το μοντέλο m_k ορίζεται συνήθως να είναι μια τετραγωνική συνάρτηση της μορφής:

$$m_k(p) = f_k + \nabla f_k^T p + \frac{1}{2} p^T B_k p \quad (1.25)$$

όπου ο πίνακας B_k είναι είτε η πραγματική μήτρα Hessian $\nabla^2 f_k$ ή μία προσέγγιση αυτής. Η διαφορά μεταξύ του μοντέλου $m_k(p)$ και της συνάρτησης $f(x_k + p)$ είναι της τάξης του $O(\|p\|^2)$

και αν $B_k = \nabla^2 f_k$ το σφάλμα της προσέγγισης στο μοντέλο $m_k(p)$ είναι $O(\|p\|^3)$ και άρα η προσέγγιση $m_k(p)$ είναι ιδιαίτερα ακριβής όταν το $\|p\|$ είναι μικρό.

Ορισμός 1.1

Ορίζουμε με Δ_k την ακτίνα της σφαίρας γύρω από την τρέχουσα επανάληψη x_k στην οποία το τετραγωνικό μοντέλο (1.25) αναπαριστά με ακρίβεια την πραγματική συνάρτηση f . Η ακτίνα Δ_k καλείται ακτίνα της περιοχής εμπιστοσύνης και η σφαίρα:

$$\mathcal{T}(\Delta_k) = \{x_{k+1} : \|x_{k+1} - x_k\| \leq \Delta_k\}$$

ονομάζεται περιοχή εμπιστοσύνης.

Κάθε υποψήφιο βήμα υπολογίζεται λύνοντας προσεγγιστικά το ακόλουθο υποπρόβλημα:

$$\min_{p \in \mathbb{R}^n} m_k(p) = f_k + \nabla f_k^T p + \frac{1}{2} p^T B_k p, \quad \|p\| \leq \Delta_k \quad (1.26)$$

όπου το $\Delta_k > 0$ δηλώνει την ακτίνα της περιοχής εμπιστοσύνης. Τις περισσότερες φορές η νόρμα $\|\cdot\|$ είναι η ευκλείδεια νόρμα και άρα η λύση p_k^* του προβλήματος (1.26) είναι το σημείο ελαχιστοποίησης του m_k στη σφαίρα ακτίνας Δ_k . Αν και η ευκλείδεια νόρμα χρησιμοποιείται συχνά σε προβλήματα βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς, μπορεί να χρησιμοποιηθεί οποιαδήποτε νόρμα για τον χαρακτηρισμό της περιοχής εμπιστοσύνης.

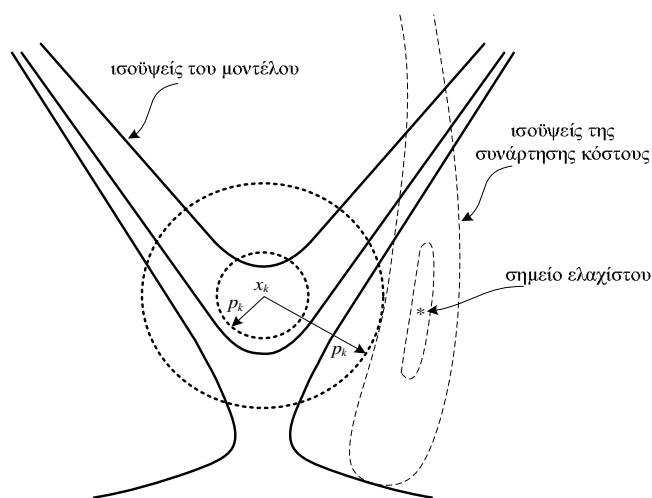
Όταν οι δεύτερες παράγωγοι είναι διαθέσιμες το πρόβλημα είναι ακριβές με ακρίβεια δεύτερης τάξης όμως μπορεί να χρειαστεί κάποιος να διαχειριστεί περιπτώσεις αόριστων μητρών Hessian και μη κυρτά προσεγγιστικά μοντέλα του προβλήματος. Απ' την άλλη μεριά, αν οι δεύτερες παράγωγοι δεν λαμβάνονται υπόψη, χρησιμοποιείται μία προσέγγιση για τον πίνακα B_k και επομένως το προσεγγιστικό μοντέλο του προβλήματος είναι κυρτό αλλά χωρίς την πληροφορία των δεύτερων παραγώγων είναι λιγότερο ακριβές.

Όταν ο πίνακας B_k είναι θετικά ορισμένος η λύση του προβλήματος (1.26) είναι απλά το σημείο ελαχίστου χωρίς περιορισμούς $p_k^B = -B_k^{-1} \nabla f_k$ του $m_k(p)$ εφόσον $\|B_k^{-1} \nabla f_k\| \leq \Delta_k$ και αποκαλείται πλήρες βήμα. Σε άλλες περιπτώσεις για την διασφάλιση της σύγκλισης και της καλής απόδοσης στην πράξη με μικρό υπολογιστικό κόστος, απαιτείται μόνο μια προσεγγιστική λύση.

Οι ισοϋψείς γραμμές του τετραγωνικού μοντέλου (1.25) με $B_k = \nabla^2 f_k$ φαίνονται στο σχήμα 1.3, στο οποίο απεικονίζονται επίσης οι ισοϋψείς γραμμές της αντικειμενικής συνάρτησης f και η περιοχή εμπιστοσύνης. Κάθε φορά όπου το μέγεθος της περιοχής εμπιστοσύνης διαφοροποιείται, για παράδειγμα κάθε φορά που μειώνεται μετά από μια αποτυχία ενός υποψήφιου βήματος, το βήμα από το x_k στο νέο υποψήφιο σημείο θα είναι πιο σύντομο, και συνήθως προσανατολίζεται σε διαφορετική κατεύθυνση από το προηγούμενο υποψήφιο βήμα. Η τεχνική της περιοχής εμπιστοσύνης διαφέρει υπό αυτήν την έννοια από τις μεθόδους αναζήτησης γραμμής, οι οποίες παράγουν βήματα η

κατεύθυνση των οποίων είναι αμετάβλητη ανεξάρτητα από το μήκος βήματος. Η προστιθέμενη αυτή ευελιξία οδηγεί σε μεθόδους οι οποίες έχουν ιδιότητες σύγκλισης ανώτερες αυτών των μεθόδων αναζήτησης γραμμής αλλά με μεγαλύτερο υπολογιστικό κόστος.

Κατ' ουσίαν, οι μεθοδολογίες αναζήτησης γραμμής και περιοχής εμπιστοσύνης διαφέρουν στην διαδοχή κατά την οποία επιλέγουν την κατεύθυνση έρευνας και την απόσταση μετακίνησης στην επόμενη επανάληψη. Η αναζήτηση γραμμής ξεκινά με τον καθορισμό της κατεύθυνσης p_k και κατόπιν με τον προσδιορισμό ενός κατάλληλου μήκους βήματος a_k . Αντιθέτως, στη μεθοδο της περιοχής εμπιστοσύνης επιλέγεται πρώτα μια μέγιστη απόσταση-δηλαδή η ακτίνα Δ_k της περιοχής εμπιστοσύνης – και κατόπιν αναζητείται μια κατεύθυνση έρευνας και ένα βήμα το οποίο πετυχαίνει την καλύτερη δυνατή βελτίωση υπό τον περιορισμό της περιοχής εμπιστοσύνης. Αν το βήμα αυτό αποδειχθεί ότι είναι μη ικανοποιητικό, η απόσταση Δ_k μειώνεται και επιλύεται πάλι το πρόβλημα.



Σχήμα. 1.3 Περιοχές εμπιστοσύνης και κατευθύνσεις έρευνας.

Το μέγεθος της περιοχής εμπιστοσύνης είναι κρίσιμο για την αποτελεσματικότητα κάθε βήματος. Αν η περιοχή είναι πολύ μικρή ο αλγόριθμος χάνει την ευκαιρία να κάνει ένα ουσιαστικό βήμα που θα τον φέρει πολύ πιο κοντά στο σημείο ελαχίστου. Αν η περιοχή είναι πολύ μεγάλη το σημείο ελαχιστοποίησης του μοντέλου μπορεί να είναι μακριά από το σημείο ελαχιστοποίησης της συνάρτησης κόστους στη περιοχή και επομένως θα πρέπει να μειωθεί το μέγεθός της και να επιλυθεί ξανά ο αλγόριθμος.

Στην πράξη, το μέγεθος της περιοχής εμπιστοσύνης επιλέγεται σύμφωνα με την απόδοση του αλγόριθμου κατά την διάρκεια προηγούμενων επαναλήψεων. Αν το μοντέλο είναι αξιόπιστο παράγοντας καλά βήματα και προβλέποντας επακριβώς την συμπεριφορά της συνάρτησης κόστους κατά μήκος αυτών των βημάτων, το μέγεθος της περιοχής εμπιστοσύνης μπορεί να αυξηθεί έτσι ώστε να επιτρέπει να αναλαμβάνονται πιο μεγαλεπήβολα βήματα. Ένα αποτυχημένο βήμα αποτελεί

ένδειξη ότι το προσεγγιστικό μοντέλο είναι μια ανεπαρκής αναπαράσταση της συνάρτησης κόστους στην τρέχουσα περιοχή εμπιστοσύνης. Μετά από ένα τέτοιο βήμα το μέγεθος της περιοχής μειώνεται και η απόπειρα επίλυσης επαναλαμβάνεται.

1.2.1 Επιλογή της περιοχής εμπιστοσύνης.

Η στρατηγική για την επιλογή της ακτίνας της περιοχής εμπιστοσύνης Δ_k σε κάθε επανάληψη βασίζεται στη συμφωνία μεταξύ της συνάρτησης του μοντέλου m_k και της συνάρτησης κόστους f στην προηγούμενη επανάληψη. Για ένα δεδομένο βήμα p_k ορίζεται μια "A posteriori" εκτίμηση ως:

$$\rho_k = \frac{f(x_k) - f(x_k + p_k)}{m_k(0) - m_k(p_k)} \quad (1.27)$$

όπου ο αριθμητής αποκαλείται η πραγματική μείωση και ο παρανομαστής η προβλεπόμενη μείωση και είναι πάντα μη αρνητικός μιας και το βήμα p_k λαμβάνεται από την ελαχιστοποίηση της συνάρτησης του μοντέλου m_k σε μια περιοχή η οποία περιλαμβάνει την τιμή $p=0$. Για τον λόγο αυτό αν $\rho_k < 0$, $f(x_k + p_k) > f(x_k)$ και επομένως το βήμα απορρίπτεται. Αν $\rho_k \approx 1$ δηλαδή υπάρχει καλή συμφωνία μεταξύ του μοντέλου m_k και της f , η περιοχή εμπιστοσύνης για την επόμενη επανάληψη μπορεί να επεκταθεί. Αν $\rho_k > 0$ αλλά σημαντικά μικρότερο της μονάδας η περιοχή εμπιστοσύνης μένει αμετάβλητη και τέλος, αν $\rho_k \approx 0$ ή $\rho_k < 0$ η περιοχή εμπιστοσύνης μπορεί να συρρικνωθεί στην επόμενη επανάληψη. Η διαδικασία αυτή περιγράφεται από τον αλγόριθμο 1.4. ([2], Αλγόριθμος 4.1, σελ. 69).

Αλγόριθμος 1.4 (Αλγόριθμος Περιοχή Εμπιστοσύνης -Trust Region Algorithm)

```

Given an overall bound  $\hat{\Delta}$  on all  $\Delta_k$ ,  $\Delta_0 \in (0, \hat{\Delta})$ ,  $\varepsilon \geq 0$ ,  $\eta \in [0, 1/4]$ 
for  $k=0, 1, 2, \dots$ 
  if  $\|\nabla f_k\| \leq \varepsilon$  stop
  else obtain  $p_k$  by solving (1.26) and evaluate  $\rho_k$  from (1.27)
  if  $\rho_k < 1/4$  :  $x_{k+1} = x_k$  and  $\Delta_{k+1} = \frac{1}{4} \Delta_k$ 
  else ( $\rho_k > 1/4$ )
    if  $\rho_k > 3/4$  (that is  $\rho_k \approx 1$ ) and  $\|p_k\| = \Delta_k$  :  $x_{k+1} = x_k + p_k$  and  $\Delta_{k+1} = \min(2\Delta_k, \hat{\Delta})$ 
    else  $1/4 < \rho_k < 3/4$  :  $x_{k+1} = x_k + p_k$  and  $\Delta_{k+1} = \Delta_k$ 
end (for)

```

Γίνεται αντιληπτό, ότι η ακτίνα της περιοχής αυξάνεται μόνο αν το $\|p_k\|$ στην πραγματικότητα φτάνει το σύνορο της περιοχής εμπιστοσύνης ενώ απ' την άλλη μεριά, αν το βήμα παραμένει αυστηρά μέσα στην περιοχή η τρέχουσα τιμή του Δ_k παραμένει αμετάβλητη για την επόμενη επανάληψη. Οι επαναλήψεις για τις οποίες, $\rho_k > 3/4$ και έτσι $\Delta_{k+1} \geq \Delta_k$ καλούνται πολυ επιτυχημένες, εκείνες για τις

οποίες $\rho_k > 1/4$ έτσι που $\Delta_{k+1} = \Delta_k$ καλούνται επιτυχημένες και τέλος εκείνες για τις οποίες $\rho_k < 1/4$ και $x_{k+1} = x_k$ καλούνται μη επιτυχημένες.

1.2.2 Προσεγγιστικές λύσεις του υποπροβλήματος της περιοχής εμπιστοσύνης.

Για τους σκοπούς της γενικής σύγκλισης, αντί για την εξεύρεση της βέλτιστης λύσης της (1.26) είναι αρκετή η εύρεση μιας προσεγγιστικής λύσης p_k η οποία βρίσκεται μέσα στη περιοχή εμπιστοσύνης και οδηγεί σε επαρκή μείωση της τιμής του μοντέλου. Η επαρκής μείωση ποσοτικοποιείται αναφορικά με το σημείο Cauchy το οποίο συμβολίζεται με p_k^c και δίνεται με τον ακόλουθο ορισμό:

Ορισμός 1.2

Αν το p_k^s επιλύει τη γραμμική εκδοχή του προβλήματος (1.26) :

$$\min_{p \in \mathbb{R}^n} f_k + \nabla f_k^T p, \quad \|p\| \leq \Delta_k \quad (1.28)$$

δεδομένων των τρέχουσων τιμών $x_k, f_k, \nabla f_k, \Delta_k$, το σημείο Cauchy p_k^c είναι το σημείο ελαχίστου της συνάρτησης του μοντέλου $m_k(p) = f_k + \nabla f_k^T p + \frac{1}{2} p^T B_k p$ κατά μήκος της κατεύθυνσης p_k^s .

- **Υπολογισμός του σημείου Cauchy.**

Το σημείο Cauchy υπολογίζεται σύμφωνα με την ακόλουθη απλή διαδικασία. Η κλίση του γραμμικού μοντέλου είναι απλά ∇f_k και η λύση του προβλήματος (1.28) προκύπτει ότι είναι η κατεύθυνση της πιο απότομης καθόδου:

$$p_k^s = -\Delta_k \frac{\nabla f_k}{\|\nabla f_k\|} \quad (1.29)$$

και άρα το σημείο Cauchy είναι απλά το σημείο ελαχίστου της συνάρτησης του μοντέλου m_k κατά μήκος της κατεύθυνσης της πιο απότομης καθόδου $-\nabla f_k$ υπό τον περιορισμό της περιοχής εμπιστοσύνης και δίνεται από τη σχέση $p_k^c = \tau_k p_k^s$. Το $\tau_k > 0$ είναι ο αριθμός που ελαχιστοποιεί την συνάρτηση $m_k(\tau p_k^s) = f_k + \tau \nabla f_k^T p_k^s + \frac{1}{2} \tau^2 p_k^{sT} B_k p_k^s$ υπό τον περιορισμό της ικανοποίησης του ορίου της περιοχής εμπιστοσύνης $\|\tau p_k^s\| \leq \Delta_k$.

Σχετικά με το τ_k , αν $\nabla f_k^T B_k \nabla f_k \leq 0$ τότε η συνάρτηση $m_k(\tau p_k^s)$ μειώνεται μονότονα με το τ οποτεδήποτε $\nabla f_k \neq 0$ και έτσι $\tau_k = 1$, δηλαδή το τ_k είναι η μεγαλύτερη τιμή που ικανοποιεί το όριο της περιοχής εμπιστοσύνης. Αν $\nabla f_k^T B_k \nabla f_k > 0$ τότε η συνάρτηση $m_k(\tau p_k^s)$ είναι μια κυρτή

τετραγωνική συνάρτηση του τ και επομένως το τ_k είναι είτε το σημείο ελαχιστοποίησης αυτής χωρίς τον περιορισμό της περιοχής εμπιστοσύνης ή η οριακή τιμή 1, οποιαδήποτε έρχεται πρώτη.

Το σημείο ελαχιστοποίησης της συνάρτησης $m_k(\tau p_k^s)$ είναι:

$$m_k'(\tau p_k^s) = 0 = \nabla f_k^T p_k^s + \tau (p_k^s)^T B_k p_k^s \Rightarrow \tau = -\frac{\nabla f_k^T p_k^s}{(p_k^s)^T B_k p_k^s} = \frac{1}{\Delta_k} \frac{\|\nabla f_k\|}{\frac{1}{\|\nabla f_k\|^2} \nabla f_k^T B_k \nabla f_k} = \frac{\|\nabla f_k\|^3}{\Delta_k (\nabla f_k^T B_k \nabla f_k)}$$

και συνοψίζοντας:

$$p_k^c = -\tau_k \frac{\Delta_k}{\|\nabla f_k\|} \nabla f_k, \text{ where } \tau_k = \begin{cases} 1 & , \nabla f_k^T B_k \nabla f_k \leq 0 \\ \min\left(\frac{\|\nabla f_k\|^3}{(\Delta_k \nabla f_k^T B_k \nabla f_k)}, 1\right) & , \nabla f_k^T B_k \nabla f_k > 0 \end{cases} \quad (1.30)$$

Το σημείο Cauchy p_k^c έχει μικρό υπολογιστικό κόστος – δεν απαιτούνται παραγοντοποιήσεις πινάκων – και είναι κρίσιμης σημασίας. Ειδικότερα μία μέθοδος περιοχής εμπιστοσύνης θα παρουσιάζει γενική σύγκλιση αν τα βήματά της p_k οδηγούν σε μείωση της συνάρτησης m_k η οποία είναι τουλάχιστον κάποιο θετικό πολλαπλάσιο της μείωσης που επιτυγχάνεται με το βήμα Cauchy.

Αν και το σημείο Cauchy p_k^c διασφαλίζει επαρκή μείωση της συνάρτησης m_k ώστε να αποφέρει γενική σύγκλιση, παρ' όλα αυτά αναζητείται μια καλύτερη προσεγγιστική λύση του προβλήματος (1.26) αφού λαμβάνοντας συνέχεια σαν βήμα το p_k^c απλά εκτελείται η μέθοδος της πιο απότομης καθόδου με ένα συγκεκριμένο μήκος βήματος η οποία έχει φτωχή απόδοση (αργή σύγκλιση) ακόμη και αν σε κάθε επανάληψη χρησιμοποιείται ένα βέλτιστο μήκος βήματος. Ένα ευρύ φάσμα αλγόριθμων περιοχής εμπιστοσύνης υπολογίζουν το p_k^c και εν συνεχεία προσπαθούν να βελτιωθούν πάνω σε αυτό, έτσι που επιλέγεται το πλήρες βήμα $p_k^B = -B_k^{-1} \nabla f_k$ οποτεδήποτε ο πίνακας B_k είναι θετικά ορισμένος και $\|p_k^B\| \leq \Delta_k$.

A. Η μέθοδος Dogleg.

Το πρόβλημα (1.26) επαναδιατυπώνεται ως ακολούθως:

$$\min_{p \in \mathbb{R}^n} m_k(p) = f_k + \nabla f_k^T p + \frac{1}{2} p^T B_k p, \quad \|p\| \leq \Delta_k \quad (1.31)$$

Η μέθοδος dogleg χρησιμοποιείται όταν ο πίνακας B_k είναι θετικά ορισμένος όπου το σημείο ελαχιστοποίησης της συνάρτησης m χωρίς περιορισμούς είναι $p_k^B = -B_k^{-1} \nabla f_k$ και αν είναι επιτρεπτό σημείο είναι προφανώς μια λύση, επομένως

$$p^*(\Delta_k) = p_k^B \text{ όταν } \Delta_k \geq \|p_k^B\| \quad (1.32)$$

όπου το $p^*(\Delta_k)$ δίνει έμφαση στην εξάρτηση από το Δ_k . Για μικρό Δ_k ο περιορισμός $\|p_k\| \leq \Delta_k$ ($p_k^T p_k \leq \Delta_k^2$) εξασφαλίζει ότι ο τετραγωνικός όρος στη συνάρτηση m έχει μικρή

επίδραση στην λύση του προβλήματος (1.31) και μια προσέγγιση του $p(\Delta_k)$ λαμβάνεται παραλείποντας απλά τον τετραγωνικό όρο:

$$p^*(\Delta_k) \approx -\Delta_k \frac{\nabla f_k}{\|\nabla f_k\|}, \quad \Delta_k < \varepsilon \quad \text{για κάποιο } \varepsilon > 0 \quad (1.32)$$

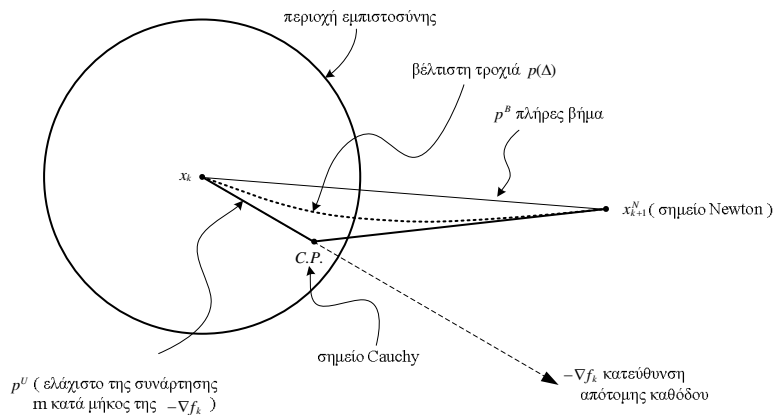
Για ενδιάμεσες τιμές του Δ_k η λύση $p^*(\Delta_k)$ ακολουθεί τυπικά μια καμπυλοειδή τροχιά σαν και αυτή στο σχήμα 4.

Η μέθοδος dogleg αντικαθιστά την καμπυλοειδή τροχιά του $p^*(\Delta_k)$ με μια διαδρομή η οποία αποτελείται από δύο ευθύγραμμα τμήματα, το πρώτο από τα οποία εκτείνεται από την αρχή μέχρι το σημείο Cauchy (το σημείο ελαχιστοποίησης της συνάρτησης m κατά μήκος της κατεύθυνσης της πιο απότομης καθόδου) και δίνεται απο την σχέση:

$$p_k^u = -\frac{\nabla f_k^T \nabla f_k}{\nabla f_k^T B \nabla f_k} \nabla f_k \quad (1.33)$$

και το δεύτερο εκτείνεται από το p_k^u στο p_k^B δηλαδή μέχρι το σημείο Newton $x_{k+1}^N = x^k + p_k^B = x^k - B_k^{-1} \nabla f_k$. Η διαδρομή συμβολίζεται με $\tilde{p}(\tau)$ για $\tau \in [0, 2]$ και δίνεται ως εξής:

$$\tilde{p}(\tau) = \begin{cases} \tau p^u & , 0 \leq \tau \leq 1 \\ p^u + (\tau - 1)(p^B - p^u) & , 1 \leq \tau \leq 2 \end{cases} \quad (1.34)$$



Σχήμα. 4. Ακριβής τροχιά και προσέγγιση dogleg.

Η μέθοδος dogleg επιλέγει την κατεύθυνση έρευνας p να ελαχιστοποιεί το μοντέλο m κατά μήκος αυτής της διαδρομής υπό τον περιορισμό της περιοχής εμπιστοσύνης. Αποδεικνύεται ([2], Λήμμα 4.2, σελ.75) ότι η διαδρομή $\tilde{p}(\tau)$ τέμνει το σύνορο της περιοχής εμπιστοσύνης $\|p_k\| = \Delta_k$ ακριβώς σε ένα σημείο αν $\|p_k^B\| \geq \Delta_k$ και πουθενά αλλού σε διαφορετική περίπτωση.

Μιας και η συνάρτηση m μειώνεται κατά μήκος της διαδρομής, η επιλεγμένη τιμή του p θα είναι στο p_k^B αν $\|p_k^B\| \leq \Delta_k$ διαφορετικά στο σημείο τομής με το σύνορο της περιοχής

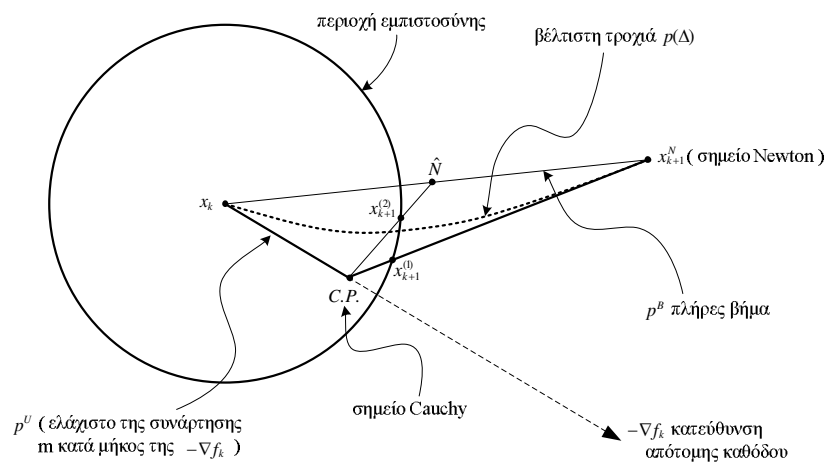
εμπιστοσύνης. Στη τελευταία περίπτωση η κατάλληλη τιμή του τ υπολογίζεται από τη λύση της αντίστοιχης τετραγωνικής εξίσωσης $\|p_k^u + (\tau-1)(p_k^B - p_k^u)\|^2 = \Delta_k^2$, η οποία λαμβάνεται με τη μέθοδο Newton. Συνοψίζοντας το σημείο στη νέα επανάληψη x_{k+1} με τη μέθοδο dogleg δίνεται από:

$$x_{k+1} = \begin{cases} x_k - \frac{\Delta}{\|\nabla f_k\|} \nabla f_k & \alpha \nu \ \|p_k^u\| \geq \Delta_k \\ x_k + p_k^u + (\tau-1)(p_k^B - p_k^u) & \alpha \nu \ \|p_k^u\| < \Delta_k \ \kappa \alpha \iota \ \|p_k^B\| > \Delta_k \\ x^k - B_k^{-1} \nabla f_k & \alpha \nu \ \|p_k^u\| < \Delta_k \ \kappa \alpha \iota \ \|p_k^B\| \leq \Delta_k \end{cases} \quad (1.35)$$

Αν το x_{k+1} ικανοποιεί την απαίτηση καθόδου θα γίνει αποδεκτό σαν η νέα επανάληψη και η περιοχή εμπιστοσύνης θα ανανεωθεί από τον αλγόριθμο, διαφορετικά καθίσταται $x_{k+1} = x_k$.

B. Η διπλή μέθοδος Dogleg.

Οι Dennis και Mei [16] ανακάλυψαν ότι αν το σημείο που παράγεται από την επανάληψη της περιοχής εμπιστοσύνης είναι διαγώνιο προς την κατεύθυνση Newton, η συμπεριφορά του αλγόριθμου βελτιώνεται ακόμα περισσότερο. Στη περίπτωση αυτή επιλέγεται ένα σημείο \hat{N} πάνω στη κατεύθυνση Newton και συνδέεται με το σημείο Cauchy p^u . Η τομή της γραμμής σύνδεσης και του συνόρου της περιοχής εμπιστοσύνης λαμβάνεται ως η νέα επανάληψη x_{k+1} (σημείο $x_{k+1}^{(2)}$, σχήμα 5).



Σχήμα. 5 Η διπλή μέθοδος dogleg.

Συγκριτικά το $x_{k+1}^{(2)}$ είναι πιο διαγώνιο στη κατεύθυνση Newton από ότι το $x_{k+1}^{(1)}$ και αποτελεί τη νέα επανάληψη η οποία λαμβάνεται με τη διπλή μέθοδο Dogleg. Όπως και στη μέθοδο dogleg αποδεικνύεται ([3], Θεώρημα 6.1.11, σελ.318) ότι η διαδρομή από

το x_k στο σημείο Cauchy στο \hat{N} και τελικά στο $x_{k+1}^{(N)}$ τέμνει το σύνορο της περιοχής εμπιστοσύνης $\|p_k\| = \Delta_k$ σε ένα ακριβώς σημείο αν $\|p_k^B\| \geq \Delta_k$ και πουθενά αλλού σε διαφορετική περίπτωση. Συνοψίζοντας, η διπλή μέθοδος dogleg επιλέγει το σημείο \hat{N} το οποίο ορίζεται ως εξής:

$$x_{k+1} = x^k + \eta p_k^B, \quad \eta \in [0, 1] \quad (1.36)$$

Όταν $\eta=1$ το σημείο \hat{N} είναι απλά το σημείο Newton $x_{k+1}^{(N)}$ όπως και στη μέθοδο dogleg. Μετά την παραγωγή των σημείων C.P. και \hat{N} , το x_{k+1} υπολογίζεται από την σχέση:

$$x_{k+1} = x^k + p_k^u + (\tau-1)(\eta p_k^B - p_k^u), \quad 1 \leq \tau \leq 2 \quad (1.37)$$

όπου η κατάλληλη τιμή του τ προκύπτει από την επίλυση της εξίσωσης:

$$\|p_k^u + (\tau-1)(\eta p_k^B - p_k^u)\|^2 = \Delta_k^2 \quad (1.38)$$

1.2.3 Σύγκλιση των μεθόδων περιοχής εμπιστοσύνης.

Μια μέθοδος περιοχής εμπιστοσύνης θα παρουσιάζει γενική σύγκλιση αν οι προσεγγιστικές της λύσεις αποδίδουν τουλάχιστον τέτοια μείωση στη συνάρτηση του μοντέλου m_k όσο και το σημείο Cauchy. Η ανάλυση της γενικής σύγκλισης λαμβάνει χώρα παίρνοντας μια εκτίμηση της μείωσης της συνάρτησης m η οποία επιτυγχάνεται από το σημείο Cauchy, σύμφωνα με το ακόλουθο λήμμα.

Λήμμα 1.3 ([2], Λήμμα 4.3, σελ.78).

Το σημείο Cauchy p_k^c ικανοποιεί την ανισότητα:

$$m_k(0) - m_k(p_k^c) \geq \frac{1}{2} \|\nabla f_k\| \min\left(\Delta_k, \frac{\|\nabla f_k\|}{\|B_k\|}\right) \quad (1.39)$$

□

Αν η προσεγγιστική λύση του προβλήματος p_k επιτυγχάνει μείωση η οποία είναι τουλάχιστον ένα σταθερό κλάσμα c_2 αυτής που επιτυγχάνεται με το σημείο Cauchy, εξασφαλίζονται ακλόνητα θεωρητικά αποτελέσματα. Η προσεγγιστική λύση p_k ικανοποιεί:

$$m_k(0) - m_k(p_k) \geq c_2 (m_k(0) - m_k(p_k^c)) \quad (1.40)$$

όπου p_k^c είναι μια ακριβής λύση του υποπροβλήματος με $c_2 \in (0, 1]$. Άμεσα προκύπτει το ακόλουθο θεώρημα.

Θεώρημα 1.4 ([2], Θεώρημα 4.4, σελ.79).

Έστω p_k ένα οποιοδήποτε διάνυσμα τέτοιο ώστε $\|p_k\| \leq \Delta_k$ και που ικανοποιεί την (1.40). Τότε ικανοποιεί επίσης τη σχέση:

$$m_k(0) - m_k(p_k) \geq c_1 \|\nabla f_k\| \min\left(\Delta_k, \frac{\|\nabla f_k\|}{\|B_k\|}\right), \quad c_1 = \frac{c_2}{2} \quad (1.41)$$

Απόδειξη.

Αφού $m_k(p_k^e) \leq m_k(p_k^c)$ έπεται άμεσα ότι: $m_k(0) - m_k(p_k) \geq c_2 (m_k(0) - m_k(p_k^c))$.

Αφού $\|p_k\| \leq \Delta_k$ συνεπάγεται από το λήμμα 1.3 ότι:

$$m_k(0) - m_k(p_k) \geq c_2 (m_k(0) - m_k(p_k^c)) \geq \frac{1}{2} c_2 \|\Delta f_k\| \min\left(\Delta_k, \frac{\|\Delta f_k\|}{\|B_k\|}\right)$$

□

Για τα αποτελέσματα της σύγκλισης γίνονται οι ακόλουθες υποθέσεις (A_0).

Υποθέσεις (A_0):

Οι προσεγγιστικές μήτρες Hessians B_k είναι ομοιόμορφα φραγμένες δηλαδή υπάρχει θετική σταθερά M τέτοια ώστε $\|B_k\| \leq M, \forall k$ και η f είναι κάτω φραγμένη στο σύνολο στάθμης: $S \stackrel{def}{=} \{x \mid f(x) \leq f(x_0)\}$. $S(R_0) \stackrel{def}{=} \{x \mid \|x - y\| < R_0\}$ για κάποιο $y \in S$, είναι μια ανοικτή γειτονιά του συνόλου S . Για λόγους γενίκευσης, επιτρέπεται το μήκος βήματος της κατεύθυνσης p_k να υπερβαίνει το όριο της περιοχής εμπιστοσύνης υπό την προϋπόθεση ότι παραμένει μέσα σε ένα πολλαπλάσιο του ορίου δηλαδή: $\|p_k\| \leq \gamma \Delta_k, \gamma \geq 1$.

Για την περίπτωση κατά την οποία $\eta=0$ και άρα το βήμα στον αλγόριθμο της περιοχής εμπιστοσύνης λαμβάνεται οποτεδήποτε παράγει μια μικρότερη τιμή της συνάρτησης δηλαδή $f(x_k + p_k) < f(x_k)$ (το βήμα λαμβάνεται αν $\rho_k = \frac{f(x_k) - f(x_k + p_k)}{m_k(0) - m_k(p_k)} > \eta=0$), αποδεικνύεται ότι η ακολουθία των κλίσεων $\{\nabla f_k\}$ έχει ένα οριακό σημείο στο μηδέν σύμφωνα με το ακόλουθο θεώρημα.

Θεώρημα 1.5 ([2], Θεώρημα 4.5, σελ.80).

Έστω $\eta=0$ στον αλγόριθμο της περιοχής εμπιστοσύνης και έστω ικανοποιούνται οι υποθέσεις (A_0) με $\|B_k\| \leq \beta$ για κάποια σταθερά β . Έστω επίσης η f είναι Lipchitz συνεχώς διαφορίσιμη στη γειτονιά $S(R_0)$ για κάποιο R_0 και όλες οι προσεγγιστικές λύσεις του προβλήματος (1.26) ικανοποιούν την ανισότητα (1.41) για μια θετική σταθερά c_1 . Τότε, $\liminf_{k \rightarrow \infty} \|\nabla f_k\| = 0$.

□

Για τη περίπτωση κατά την οποία $\eta > 0$ δηλαδή κατά την οποία απαιτείται η πραγματική μείωση της f να είναι τουλάχιστον κάποιο μικρό κλάσμα της προβλεπόμενης μείωσης, ισχύει το ισχυρότερο συμπέρασμα ότι $\nabla f_k \rightarrow 0$ σύμφωνα με το ακόλουθο θεώρημα.

Θεώρημα 1.6 ([2], Θεώρημα 4.6, σελ.82).

Έστω $\eta \in (0, 1/4)$ και έστω ισχύουν οι υποθέσεις (A_0) με $\|B_k\| \leq \beta$ για κάποια σταθερά β . Έστω επίσης η f είναι Lipchitz συνεχώς διαφορίσιμη στη γειτονιά $S(R_0)$ για κάποιο R_0 και όλες οι προσεγγιστικές λύσεις p_k του προβλήματος (1.26) ικανοποιούν την ανισότητα (1.41) για μια θετική σταθερά c_1 . Τότε, $\lim_{k \rightarrow \infty} \nabla f_k = 0$.

Απόδειξη.

Έστω m ένας συγκεκριμένος δείκτης με $\nabla f_m \neq 0$, και β_1 συμβολίζει τη σταθερά Lipchitz της ∇f στο $S(R_0)$ έτσι που:

$$\|\nabla f(x) - \nabla f_m\| \leq \beta_1 \|x - x_m\| \quad \forall x \in S(R_0).$$

Έστω ορίζονται οι αριθμοί $\varepsilon = \frac{1}{2} \|\Delta f_m\|$, $R = \min(\frac{\varepsilon}{\beta_1}, R_0)$ και η σφαίρα $B(x_m, R) = \{x : \|x - x_m\| \leq R\}$

μέσα στην οποία η Lipchitz συνέχεια της ∇f διατηρείται μιας και $B(x_m, R) \subseteq S(R_0)$. Προκύπτει ότι:

$$x \in B(x_m, R) \Rightarrow \|\nabla f(x)\| \geq \|\nabla f_m\| - \|\nabla f(x) - \nabla f_m\| \geq \varepsilon > 0 \quad (1.42)$$

και άρα αν η ακολουθία $\{x_k\}_{k \geq m}$ μένει μέσα στη σφαίρα $B(x_m, R)$ τότε $\|\nabla f_k\| \geq \varepsilon > 0 \quad \forall k \geq m$.

Ωστόσο, σύμφωνα με το θεώρημα 1.5 αυτή η εκδοχή δεν λαμβάνει χώρα και συνεπώς η ακολουθία $\{x_k\}_{k \geq m}$ αφήνει τελικά την περιοχή $B(x_m, R)$.

Έστω $l > m$ τέτοιο ώστε το x_{l+1} είναι η πρώτη επανάληψη αφού το x_m βγει εκτός της $B(x_m, R)$.

Αφού $\|\nabla f_k\| \geq \varepsilon$ για $k = m, m+1, \dots, l$ έπεται ότι: $f(x_m) - f(x_{l+1}) = \sum_{k=m}^l f(x_k) - f(x_{k+1})$. Περιορίζοντας το άθροισμα σε εκείνες τις επαναλήψεις για τις οποίες λαμβάνεται τελικά το βήμα, δηλαδή αυτές για τις οποίες $(x_{k+1}) \neq (x_k)$ προκύπτει ότι:

$$f(x_m) - f(x_{l+1}) \geq \sum_{\substack{k=m \\ x_k \neq x_{k+1}}}^l \eta [m_k(0) - m_k(p_k)] \stackrel{(1.41)}{\geq} \sum_{\substack{k=m \\ x_k \neq x_{k+1}}}^l \eta c_1 \varepsilon \min\left(\Delta_k, \frac{\varepsilon}{\beta}\right)$$

Αν $\Delta_k \leq \frac{\varepsilon}{\beta}$ για κάθε $k = m, \dots, l$:

$$f(x_m) - f(x_{l+1}) \geq \eta c_1 \varepsilon \sum_{\substack{k=m \\ x_k \neq x_{k+1}}}^l \Delta_k \geq \eta c_1 \varepsilon R = \eta c_1 \varepsilon \min\left(\frac{\varepsilon}{\beta_1}, R_0\right) \quad (1.43)$$

Αν $\Delta_k > \frac{\varepsilon}{\beta}$ για κάποιο $k = m, \dots, l$:

$$f(x_m) - f(x_{l+1}) \geq \eta c_1 \varepsilon \frac{\varepsilon}{\beta} \quad (1.44)$$

Όμως η ακολουθία $\{f(x_k)\}_{k=0}^{\infty}$ είναι φθίνουσα και κάτω φραγμένη δηλαδή $f(x_k) \searrow f^*$ με $f^* > -\infty$. Επομένως έχουμε ότι:

- αν ισχύει $\Delta_k \leq \frac{\varepsilon}{\beta}$ τότε: $f(x_m) - f^* \geq f(x_m) - f(x_{l+1}) \stackrel{(1.43)}{\geq} \eta c_1 \varepsilon \min\left(\frac{\varepsilon}{\beta_1}, R_o\right)$

$$= \frac{1}{2} \eta c_1 \|\nabla f_m\| \min\left(\frac{\|\nabla f_m\|}{2\beta_1}, R_o\right)$$

$$> 0$$
- αν ισχύει $\Delta_k > \frac{\varepsilon}{\beta}$ τότε: $f(x_m) - f^* \geq f(x_m) - f(x_{l+1}) \stackrel{(1.44)}{\geq} \eta c_1 \varepsilon \frac{\varepsilon}{\beta}$

$$= \frac{1}{2} \eta c_1 \|\nabla f_m\| \frac{\|\nabla f_m\|}{2\beta}$$

$$> 0$$

και αφού $f(x_m) - f^* \downarrow 0$ συνεπάγεται ότι $\|\nabla f_m\| \rightarrow 0$ και στις δύο περιπτώσεις.

□

1.2.4 Σχεδόν ακριβείς λύσεις του υποπροβλήματος της περιοχής εμπιστοσύνης.

Μια πρώτη προσπάθεια για τον χαρακτηρισμό της ακριβούς λύσης του προβλήματος (1.31) δίνεται από το ακόλουθο θεώρημα των More & Sorensen και του πορίσματος που ακολουθεί το θεώρημα.

Θεώρημα 1.7 ([1], Θεώρημα 5.2.1, σελ.101).

Το διάνυσμα p^* είναι γενική λύση του υποπροβλήματος της περιοχής εμπιστοσύνης (1.31) αν και μόνο είναι επιτρεπτό διάνυσμα και υπάρχει $\lambda \geq 0$ τέτοιο ώστε να ισχύουν οι ακόλουθες συνθήκες:

$$(B + \lambda I) p^* = -\nabla f \quad (1.45)$$

$$\lambda (\Delta - \|p^*\|) = 0 \quad (1.46)$$

$$\text{η μήτρα } (B + \lambda I) \text{ είναι θετικά ημιορισμένη} \quad (1.47)$$

και αν επιπλέον η μήτρα $(B + \lambda I)$ είναι θετικά ορισμένη τότε το p^* είναι η μοναδική λύση του (1.31).

□

Πόρισμα ([1], Πόρισμα σελ.102).

Τα ίδια αποτελέσματα ισχύουν για το πρόβλημα ισωτικών περιορισμών:

$$\min_{p \in \mathbb{R}^p} m(p) = f + \nabla f^T p + \frac{1}{2} p^T B p, \quad \|p\| = \Delta$$

αν οι συνθήκες $\lambda \geq 0$ και $\lambda (\Delta - \|p^*\|) = 0$ δεν απαιτείται να ισχύουν.

□

Αν η λύση p^* ανήκει αυστηρά μέσα στη περιοχή εμπιστοσύνης η συνθήκη συμπληρωματικότητας (1.46) υποδηλώνει ότι το λ πρέπει να είναι μηδέν και γι'αυτό $Bp^* = -\nabla f$ με

B θετικά ημισορισμένο από την (1.45) και (1.47) αντίστοιχα. Στις άλλες περιπτώσεις $\|p^*\|=\Delta$ και γι' αυτό το λ επιτρέπεται να λαμβάνει θετική τιμή.

Με την τεχνική αυτή, χρησιμοποιείται μια επαναληπτική διαδικασία για να αναγνωρίσει τη τιμή του λ για την οποία η (1.45) ικανοποιείται από τη λύση του υποπροβλήματος (1.31). Οι προηγούμενες μέθοδοι δεν επιδικνύουν κάποια σοβαρή προσπάθεια στην εξεύρεση της ακριβούς λύσης του υποπροβλήματος (1.31). Όταν το πρόβλημα είναι σχετικά μικρό (δηλαδή το n δεν είναι πολύ μεγάλο) αξίζει τον κόπο να βρεθεί μία καλύτερη προσέγγιση της λύσης του υποπροβλήματος.

Η προσέγγιση αυτή βασίζεται στον χαρακτηρισμό της ακριβούς λύσης του θεωρήματος 1.7 μαζί με μια εφαρμογή της μεθόδου Newton μιας μεταβλητής. Στην ουσία, ο αλγόριθμος προσπαθεί να βρει την τιμή του λ για την οποία η σχέση $(B+\lambda I)p^*=-\nabla f$ ικανοποιείται από τη λύση του υποπροβλήματος (1.31).

Ο χαρακτηρισμός του θεωρήματος 1.7, προτείνει έναν αλγόριθμο εξεύρεσης της λύσης p του (1.31). Είτε το $\lambda=0$ με $\|p\|\leq\Delta$ ικανοποιεί τις (1.45) και (1.47) ή διαφορετικά ορίζεται:

$$p(\lambda)=-\frac{1}{\lambda}(B+\lambda I)^{-1}\nabla f \quad (1.48)$$

για λ αρκετά μεγάλο έτσι που ο πίνακας $(B+\lambda I)$ είναι θετικά ορισμένος και αναζητείται μια τιμή του λ επιλύοντας το παραπάνω πρόβλημα εύρεσης ριζών, έτσι που σύμφωνα με την (1.46) ισχύει: $\|p(\lambda)\|=\Delta$. Μία τιμή του λ με τις επιθυμητές ιδιότητες βρίσκεται ότι υπάρχει, αναλύοντας την διαδρομή $p(\lambda)$ ως ακολούθως:

Αφού ο πίνακας B είναι συμμετρικός μπορεί να γραφτεί ως $B=Q\Lambda Q^T$ όπου Q είναι ένας ορθογώνιος πίνακας και $\Lambda=diag(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)$ όπου $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$ οι ιδιοτιμές του πίνακα B .

Από την (1.48) προκύπτει ότι $p(\lambda)=-Q(\Lambda+\lambda I)^{-1}Q^T\nabla f=-\sum_{j=1}^n \frac{q_j^T \nabla f}{\lambda_j+\lambda} q_j$ με $\lambda \neq \lambda_j$ όπου το q_j συμβολίζει την j -στη στήλη του πίνακα Q . Απ' την ορθοκανονικότητα των q_1, \dots, q_n έπεται ότι:

$$\|p(\lambda)\|^2 = \sum_{j=1}^n \frac{(q_j^T \nabla f)^2}{(\lambda_j + \lambda)^2}$$

Από την παραπάνω έκφραση συνεπάγεται ότι αν $\lambda > -\lambda_n$ τότε $\lambda_j + \lambda > 0, \forall j=1, 2, \dots, n$ και γι' αυτό το $\|p(\lambda)\|$ είναι μια συνεχής μη αύξουσα συνάρτηση του λ στο $(-\lambda_n, \infty)$. Πράγματι:

$$\lim_{\lambda \rightarrow \infty} \|p(\lambda)\| = 0 \quad (1.49)$$

Επιπλέον ακόμη και όταν η πιο αρνητική ιδιοτιμή είναι πολλαπλή ιδιοτιμή υπό την προϋπόθεση ότι $q_j^T \nabla f \neq 0 \quad \forall j \in J = \{j: \lambda_j = \lambda_n\}$ προκύπτει:

$$\lim_{\lambda \rightarrow -\lambda_j} \|p(\lambda)\| = \infty \quad (1.50)$$

άρα δύνανται να εξευρεθεί μία μοναδική τιμή του λ στο διάστημα αυτό για το οποίο $\|p(\lambda)\| = \Delta$. Άρα το $p(\lambda)$ ικανοποιεί τη σχέση $\lambda(\Delta - \|p^*\|) = 0$ και επίσης $(B + \lambda I)p^* = -\nabla f$. Επίσης η ανισότητα $\lambda \geq -\lambda_n$ δείχνει ότι ο πίνακας $B + \lambda I$ είναι θετικά ημιορισμένος και άρα το $p(\lambda)$ ικανοποιεί τις συνθήκες του θεωρήματος 1.7 και γι'αυτό αποτελεί λύση του γενικού προβλήματος αν $\lambda \geq 0$. Ωστόσο, αν $\lambda < 0$ ή $q_j^T \nabla f = 0 \quad \forall j \in J$ τότε λαμβάνουν χώρα άλλα εξέχοντα θέματα. Γενικά υπάρχουν τρεις περιπτώσεις:

i) $\lambda_n > 0$. Οι τιμές του $p(\lambda)$ για $\lambda \in [-\lambda_n, \infty)$ αντιστοιχούν στις λύσεις του προβλήματος ισωτικών περιορισμών και για $\lambda \geq 0$ υπάρχουν επίσης λύσεις του προβλήματος ανισωτικών περιορισμών. Το $p(0)$ τώρα, είναι απλά το βήμα της μεθόδου Newton $-B_k^{-1} \nabla f_k$ το οποίο υπάρχει λόγω του ότι το γεγονός ότι $\lambda_n > 0$ διασφαλίζει ότι ο πίνακας B_k είναι θετικά ορισμένος. Συνεπώς, για $\lambda < 0$, $\|p(\lambda)\| \geq \|p(0)\|$ όπου το $p(\lambda)$ επιλύει το πρόβλημα ισωτικών περιορισμών. Όμως, μιας και το βήμα της μεθόδου Newton $p(0)$ είναι το σημείο ελαχιστοποίησης χωρίς περιορισμούς της συνάρτησης $m(p)$ το $p(0)$ επιλύει το πρόβλημα ανισωτικών περιορισμών και $p(0) \leq \Delta$.

ii) $\lambda_n \leq 0$ και $q_j^T \nabla f \neq 0$ για $j \in J$. Για να είναι ο πίνακας $B + \lambda I$ θετικά ημιορισμένος απαιτείται να ισχύει $\lambda \geq -\lambda_n \geq 0$ το οποίο εξασφαλίζει ότι $\|p(\lambda)\| = \Delta$ άρα το $p(\lambda)$ επιλύει και το πρόβλημα ισωτικών και το πρόβλημα ανισωτικών περιορισμών.

iii) $\lambda_n \leq 0$ και $q_j^T \nabla f \neq 0 \quad \forall j \in J$. Καθώς το λ μειώνεται από το ∞ στο $-\lambda_n$ τότε το $\|p(\lambda)\|$ αυξάνεται από το 0 σε κάποια τιμή $\bar{\Delta}$ με $\bar{\Delta} = \|\bar{p}(\lambda)\|$ και $p(\lambda) = -\sum_{j \in m} \frac{q_j^T \nabla f}{\lambda_j + \lambda} \cdot q_j$ όπου $m \notin J$ είναι ο μεγαλύτερος δείκτης για τον οποίο $q_j^T \nabla f \neq 0$. Επομένως για $\lambda \in (-\lambda_n, \infty)$ το $p(\lambda)$ επιλύει και το πρόβλημα ισωτικών και το πρόβλημα ανισωτικών περιορισμών και $\Delta < \bar{\Delta}$. Για $\Delta > \bar{\Delta}$ η λύση και των δύο προβλημάτων πρέπει να έχει $\lambda = -\lambda_n$ έτσι ώστε ο πίνακας $B + \lambda I$ να είναι θετικά ημιορισμένος. Στη περίπτωση αυτή μία βέλτιστη λύση είναι:

$$p^* = \bar{p} + \sum_{j \in J} \mu_j q_j \quad (1.51)$$

όπου μ_j είναι οποιοδήποτε πραγματικοί αριθμοί τέτοιοι ώστε: $\sum_{j \in J} \mu_j = \Delta^2 - \|\bar{p}(\lambda)\|^2$.

Πράγματι, επαληθεύεται εύκολα ότι $\|p^*\|^2 = \Delta^2$ και:

$$Bp^* + \nabla f = \sum_{j \in J} \mu_j Bq_j + B\bar{p} + \nabla f$$

Αφού ο πίνακας $B - \lambda_n I$ είναι ιδιάζων, υπάρχει ένα διάνυσμα z με $\|z\| = 1$ και $(B - \lambda_n I)z = 0$.

Όντως, το z είναι ένα ιδιοδιάνυσμα του πίνακα B που αντιστοιχεί στην ιδιοτιμή λ_n . Συνεπώς:

$$Bp^* + \nabla f = \sum_{j \in J} \mu_j \lambda_n q_j + B\bar{p} + \nabla f \left\{ \Rightarrow Bp^* + \nabla f = \sum_{j \in J} \mu_j \lambda_n q_j + \lambda_n \bar{p} \Rightarrow Bp^* + \nabla f = \lambda_n \sum_{j \in J} \mu_j q_j + \bar{p} = \lambda_n p^* \right.$$

$$(B + \lambda_n I) \bar{p} = -\nabla f$$

και μιας και υπάρχουν πολλές διαφορετικές επιλογές για τα μ_j που ικανοποιούν την απαιτούμενη συνθήκη, η βέλτιστη λύση στη περίπτωση αυτή δεν είναι μοναδική.

Απορρίπτοντας τη περίπτωση (i), όταν $\lambda=0$ ή τη περίπτωση (iii) όταν $\Delta \geq \bar{\Delta}$, για τον υπολογισμό της γενικής λύσης του προβλήματος είναι αναγκαίο να βρεθεί η τιμή του λ για την οποία ο πίνακας $B + \lambda I$ είναι θετικά ορισμένος και η οποία επιλύει τη μη γραμμική εξίσωση $\|p(\lambda)\| = \Delta$. Στις περιπτώσεις αυτές εφαρμόζεται η μέθοδος Newton για την εύρεση της τιμής $\lambda > -\lambda_n$ η οποία επιλύει την εξίσωση $\Phi_1(\lambda) = \|p(\lambda)\| - \Delta = 0 \rightarrow \|(B + \lambda I)^{-1} p\| - \Delta = 0$. Καλύτερα αποτελέσματα λαμβάνονται με την επαναδιατύπωση του παραπάνω προβλήματος έτσι που να είναι σχεδόν γραμμικό κοντά στο βέλτιστο λ επιλύοντας το πρόβλημα:

$$\Phi_2(\lambda) = \frac{1}{\Delta} - \frac{1}{\|p(\lambda)\|} = 0 \quad (1.52)$$

Η μέθοδος Newton εφαρμοστέα στη συνάρτηση $\Phi_2(\lambda)$ παράγει μία ακολουθία επαναλήψεων:

$$\lambda_{j+1} = \lambda_j - \frac{\Phi_2(\lambda_j)}{\Phi_2'(\lambda_j)} \quad (1.53)$$

σύμφωνα με τον ακόλουθο αλγόριθμο 1.5 ([2], Αλγόριθμος 4.3, σελ. 87), η κυριότερη δυσκολία του οποίου είναι η παραγοντοποίηση cholesky του πίνακα $B + \lambda_j I$.

Αλγόριθμος 1.5

Given $\lambda_0, \Delta > 0$

For $j=0, 1, \dots$

$B + \lambda_j I = R^T R$ using cholesky factorization.

Solve: $R^T R p_j = -\nabla f$

$R^T q_j = p_j$

Set $\lambda_{j+1} = \lambda_j \left(\frac{\|p_j\|}{\|q_j\|} \right)^2 \left(\frac{\|p_j\| - \Delta}{\Delta} \right)$

end (for).

Κεφάλαιο 2

Θεωρία βελτιστοποίησης προβλημάτων με περιορισμούς.

Μια γενική διατύπωση ενός προβλήματος μη γραμμικής βελτιστοποίησης με περιορισμούς είναι:

$$\min_{x \in R^n} f(x) \quad , \quad \begin{cases} c_i(x)=0, & i \in \mathcal{E} = \{1, \dots, m_e\} \\ c_i(x) \geq 0, & i \in \mathcal{I} = \{m_e+1, \dots, m\} \end{cases} \quad (2.1)$$

όπου η f και c_i είναι συνεχείς συναρτήσεις, διαφορίσιμες τουλάχιστον μία φορά σε ένα υποσύνολο του R^n εκ' των οποίων η μία τουλάχιστον είναι μη γραμμική και \mathcal{E} , \mathcal{I} είναι δύο πεπερασμένα σύνολα δεικτών με \mathcal{E} το σύνολο δεικτών των ισωτικών περιορισμών και \mathcal{I} των ανισωτικών.

Ορισμός 2.1

Το σημείο $x \in R^n$ ονομάζεται επιτρεπτό αν και μόνο αν ικανοποιεί όλους τους περιορισμούς. Το σύνολο όλων των επιτρεπτών σημείων Ω καλείται επιτρεπτό σύνολο και γράφεται ως ακολούθως:

$$\Omega = \{x : c_i(x)=0, i \in \mathcal{E}; c_i(x) \geq 0, i \in \mathcal{I}\} \quad (2.2)$$

Το αρχικό πρόβλημα (2.1) μπορεί να γραφτεί πιο συμπηκνωμένα ως εξής :

$$\min_{x \in \Omega} f(x) \quad (2.3)$$

Ορισμός 2.2

Αν $x^* \in \Omega$ και αν $f(x) \geq f(x^*)$, $\forall x \in \Omega$ το σημείο x^* καλείται γενικό ελάχιστο του προβλήματος (2.3).

Αν $x^* \in \Omega$ και αν $f(x) > f(x^*)$, $\forall x \in \Omega$, $x \neq x^*$ τότε το σημείο x^* καλείται αυστηρό γενικό ελάχιστο του προβλήματος (2.3).

Οι ορισμοί των διαφορετικών ειδών των τοπικών λύσεων, αποτελούν απλά επεκτάσεις των αντίστοιχων ορισμών που συναντώνται στη περίπτωση προβλημάτων χωρίς περιορισμούς, μόνο που τώρα η θεώρησή τους περιορίζεται στα επιτρεπτά σημεία μιας γειτονιάς του x^* .

Ορισμός 2.3

Ένα σημείο x^* είναι τοπική λύση του προβλήματος (2.3) αν $x^* \in \Omega$ και υπάρχει γειτονιά N του x^* τέτοια ώστε $f(x) \geq f(x^*)$, $\forall x \in N \cap \Omega$. Το σημείο x^* είναι αυστηρή τοπική λύση του προβλήματος (2.3) αν $x^* \in \Omega$ και υπάρχει γειτονιά N του x^* τέτοια ώστε $f(x) > f(x^*)$, $\forall x \in N \cap \Omega$ με $x \neq x^*$.

Ορισμός 2.4

Ένα σημείο x^* είναι μια μεμονωμένη τοπική λύση του προβλήματος (2.3) αν $x^* \in \Omega$ και υπάρχει

μια γειτονιά N του x^* τέτοια ώστε το x^* είναι η μόνη τοπική λύση στο σύνολο $N \cap \Omega$.

Έστω το x^* είναι τοπικό ελάχιστο του προβλήματος (2.3). Αν υπάρχει ένας δείκτης $i_0 \in \mathcal{I}$ τέτοιος ώστε $c_{i_0}(x^*) > 0$ τότε αν αυτός ο περιορισμός διαγραφεί, το σημείο x^* παραμένει τοπικό ελάχιστο του νέου προβλήματος. Στη περίπτωση αυτή λέγεται ότι ο i_0 -στος περιορισμός είναι μη-ενεργός στο x^* και δίνεται ο ακόλουθος ορισμός.

Ορισμός 2.5

Το σύνολο $\mathcal{A}(x) = \mathcal{E} \cup \{i \in \mathcal{I} : c_i(x) = 0\}$ σε ένα οποιοδήποτε επιτρεπτό σημείο x ονομάζεται ενεργό σύνολο στο σημείο x . Στο επιτρεπτό σημείο x , ο ανισωτικός περιορισμός $i \in \mathcal{I}$ καλείται ενεργός αν $c_i(x) = 0$ και μη-ενεργός αν $c_i(x) > 0$.

Για να γίνει ξεκάθαρη η περιγραφή των αναγκαίων συνθηκών μιας τοπικής λύσης ορίζεται το αποκαλούμενο σύνολο κατευθύνσεων καθόδου στο x ως εξής:

$$D(x) = D = \{p : p^T \nabla f(x) < 0\} \quad (2.4)$$

2.1 Εισαγωγή στους πολλαπλασιαστές Lagrange.

Για προβλήματα βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς, οι αναγκαίες συνθήκες μιας τοπικής λύσης διευκρινίζουν την απαίτηση για μηδενική κλίση και μη-αρνητική καμπυλότητα, δηλαδή θετικά ημιορισμένη μήτρα δεύτερων παραγώγων, ως προς κάθε κατεύθυνση στο σημείο x^* , με άλλα λόγια δεν υπάρχει καμία κατεύθυνση καθόδου στο x^* . Στη περίπτωση τώρα προβλημάτων βελτιστοποίησης με περιορισμούς υπάρχει η επιπρόσθετη εμπλοκή της επιτρεπτής περιοχής Ω .

2.1.1. Πρόβλημα ισωτικών περιορισμών.

Για την απλούστερη περίπτωση, δηλαδή για ένα πρόβλημα βελτιστοποίησης με ισωτικούς περιορισμούς της μορφής:

$$\min f(x), \quad c_i(x) = 0 \quad \text{για } i \in \mathcal{E} = \{1, \dots, m_{\mathcal{E}}\}$$

όπου η $f(x) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, $c_i : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ είναι συνεχείς συναρτήσεις, διαφορίσιμες τουλάχιστον μια φορά και \mathcal{E} είναι το σύνολο δεικτών των περιορισμών του προβλήματος, ισχύουν τα ακόλουθα αποτελέσματα.

Έστω ότι παίρνεται ένα μικρό βήμα s από το σημείο ελαχίστου x^* . Το βήμα αυτό διατηρεί την

επιτευξιμότητά του, δηλαδή την ιδιότητα να ικανοποιεί τον περιορισμό $c_i(x^*)=0$ αν ισχύει $c_i(x^* + s) \approx c_i(x^*) + \nabla c_i(x^*)^T s = 0, \forall i \in \mathcal{E}$.

Επομένως:

$$\nabla c_i(x^*)^T s = 0, \forall i \in \mathcal{E} \quad (2.5)$$

Παράλληλα, ένα βήμα βελτιστοποίησης πρέπει να προκαλεί μείωση στη συνάρτηση κόστους f :

$$0 > f(x^* + s) - f(x^*) \approx \nabla f(x^*)^T s \quad (2.6)$$

Η ύπαρξη ενός μικρού βήματος s που ικανοποιεί τις (2.5) και (2.6) υποδηλώνει σθεναρά την ύπαρξη μιας κατεύθυνσης p το μέγεθος της οποίας δεν είναι μικρό με τις ίδιες ιδιότητες:

$$\nabla c_i(x^*)^T p = 0, \forall i \in \mathcal{E} \quad (2.7)$$

$$\nabla f(x^*)^T p < 0 \quad (2.8)$$

Ωστόσο, το x^* είναι τοπικό ελάχιστο και επομένως δεν μπορεί να υπάρξει κατεύθυνση p η οποία ικανοποιεί και τη σχέση (2.7) και τη (2.8). Προκύπτει επομένως ότι μια αναγκαία συνθήκη βελτίστου για το πρόβλημα ισοτικών περιορισμών είναι το ότι δεν υπάρχει κατεύθυνση p που να ικανοποιεί αμφότερες τις σχέσεις (2.7) και (2.8). Ο ισχυρισμός αυτός είναι αληθής αν το διάνυσμα $\nabla f(x^*)$ είναι ένας γραμμικός συνδιασμός των διανυσμάτων $\nabla c_i(x^*)$, $i \in \mathcal{E}$, δηλαδή αν ισχύει:

$$\nabla f(x^*) = \sum_{i \in \mathcal{E}} \nabla c_i(x^*) \lambda_i^* = A^* \cdot \lambda^* \quad (2.9)$$

όπου οι πολλαπλασιαστές λ_i^* αναφέρονται ως πολλαπλασιαστές Lagrange και ο $n \times m_{\mathcal{E}}$ πίνακας A^* δηλώνει τον πίνακα με στήλες τα $\nabla c_i(x^*)$, $i \in \mathcal{E}$.

Αν ο πίνακας A^* είναι πλήρους βαθμού, δηλαδή οι στήλες του είναι γραμμικά ανεξάρτητες, τότε το διάνυσμα λ^* ορίζεται μοναδικά ως $\lambda^* = A^{*+} \nabla f(x^*)$, όπου $A^{*+} = (A^{*T} A^*)^{-1} A^{*T}$ είναι ο γενικευμένος αντίστροφος του πίνακα A^* και απ'την άλλη μεριά, όταν δεν υπάρχουν περιορισμοί τότε η (2.9) απλοποιείται στη συνήθη συνθήκη για τα στάσιμα σημεία $\nabla f(x^*) = 0$. Η απόδειξη ότι η συνθήκη (2.9) είναι αναγκαία γίνεται με απαγωγή σε άτοπο ως ακολούθως:

Αν η (2.9) δεν ισχύει τότε το $\nabla f(x^*)$ μπορεί να εκφραστεί ως:

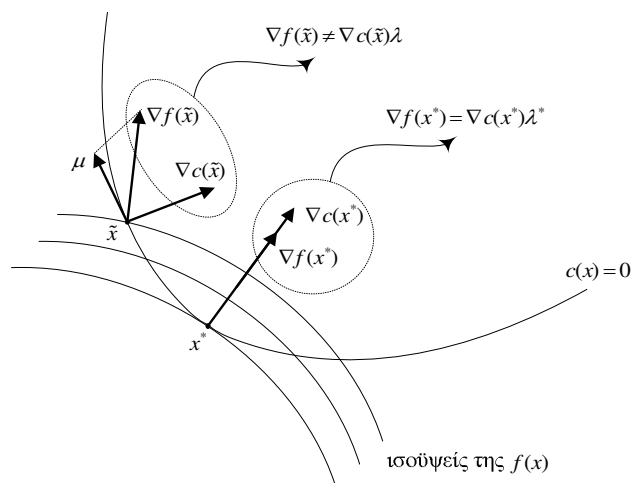
$$\nabla f(x^*) = A^* \lambda^* + \mu$$

όπου $\mu \neq 0$ είναι μια συνιστώσα του $\nabla f(x^*)$ ορθογώνια στα διανύσματα $\nabla c_i(x^*)$ έτσι που $A^* \mu = 0$. Τότε το $p = -\mu$ ικανοποιεί και τη (2.7) και τη (2.8) το οποίο ωστόσο αντικρούει το γεγονός ότι το x^* είναι τοπικό ελάχιστο. Οι συνθήκες απεικονίζονται στο σχήμα 2.1 για ένα πρόβλημα με έναν ισοτικό περιορισμό, όπου στο σημείο \tilde{x} που δεν είναι τοπικό ελάχιστο του προβλήματος κάθε επιτρεπτό αυξητικό βήμα δ κατά μήκος της κατεύθυνσης $-\mu$ μειώνει τη τιμή της συνάρτησης $f(x)$.

Ορίζοντας τη Λαγκρανζιανή συνάρτηση $\mathcal{L}(x^*, \lambda^*) = f(x^*) - \sum_{i \in \mathcal{E}} \lambda_i^* c_i(x^*)$ η συνθήκη (2.9) γίνεται:

$$\nabla_x \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) = 0$$

και οι λύσεις του προβλήματος ισωτικών περιορισμών είναι τα στάσιμα σημεία της Λαγκρανζιανής.



Σχήμα. 2.1 Ύπαρξη πολλαπλασιαστών Lagrange ενός προβλήματος ισωτικών περιορισμών.

Απ'όλα τα παραπάνω έπεται ότι αναγκαία συνθήκη ελαχίστου ενός επιτρεπτού σημείου x του προβλήματος ισωτικών περιορισμών είναι ότι δεν υπάρχει κατεύθυνση έρευνας p που να ικανοποιεί αμφότερες τις σχέσεις (2.7) και (2.8) και η μόνη περίπτωση όπου μια τέτοια κατεύθυνση δεν μπορεί να υπάρξει είναι αν τα $\nabla f(x)$ και $\nabla c(x)$ είναι παράλληλα διανύσματα. Αν η εν λόγω συνθήκη δεν ικανοποιείται η κατεύθυνση $p = \tilde{p} / \|\tilde{p}\|$ όπου $\tilde{p} = -\left(I - \frac{\nabla c(x)\nabla c(x)^T}{\|\nabla c(x)\|^2}\right)\nabla f(x)$, ικανοποιεί αμφότερες τις σχέσεις (2.7) και (2.8).

2.1.2. Πρόβλημα ανισωτικών περιορισμών.

Στη περίπτωση προβλημάτων με ανισωτικούς περιορισμούς της μορφής:

$$\min f(x) , \quad c_i(x) \geq 0 \quad \text{για } i \in \mathcal{I} = \{1, \dots, m_{\mathcal{I}}\}$$

όπου \mathcal{I} είναι το σύνολο των ανισωτικών περιορισμών του προβλήματος, εικάζεται ότι ένα επιτρεπτό σημείο x δεν είναι ελάχιστο αν μπορεί να βρεθεί μια κατεύθυνση έρευνας p που να διατηρεί την επιτευξιμότητά της και να μειώνει τη τιμή της συνάρτησης κόστους f .

Όπως και στο πρόβλημα ισωτικών περιορισμών η κατεύθυνση p μειώνει τη τιμή της συνάρτησης κόστους αν:

$$\nabla f(x^*)^T p < 0 \tag{2.10}$$

Ομοίως, η κατεύθυνση p διατηρεί την επιτευξιμότητά της αν:

$$0 \leq c_i(x^* + p) \approx c_i(x^*) + \nabla c_i^T(x^*)p \Rightarrow c_i(x^*) + \nabla c_i(x^*)^T p \geq 0 \quad (2.11)$$

Για τον προσδιορισμό του κατά πόσον υπάρχει μια κατεύθυνση p που να ικανοποιεί αμφότερες τις (2.10) και (2.11) μελετώνται οι εξής δύο περιπτώσεις.

Περίπτωση I: $c_i(x^*) > 0$

Στη περίπτωση αυτή κάθε διάνυσμα p ικανοποιεί τη συνθήκη (2.11) υπό την προϋπόθεση ότι το μήκος της είναι αρκετά μικρό. Ιδιαίτερα, οποτεδήποτε $\nabla f(x^*) \neq 0$ μια κατεύθυνση p που ικανοποιεί αμφότερες τις (2.10) και (2.11) δίνεται από τη σχέση:

$$p = -c_i(x^*) \frac{\nabla f(x^*)}{\|\nabla f(x^*)\|}$$

Η μόνη περίπτωση κατά την οποία μια τέτοια κατεύθυνση δεν υπάρχει είναι όταν $\nabla f(x^*) = 0$.

Περίπτωση II: $c_i(x^*) = 0$

Στη περίπτωση αυτή οι συνθήκες (2.10) και (2.11) γίνονται αντίστοιχα:

$$\nabla f(x^*)^T p < 0 \quad (2.12)$$

$$\nabla c_i(x^*)^T p \geq 0 \quad \forall i \in \mathcal{A}(x^*) \cap \mathcal{I} \quad (2.13)$$

όπου το σύνολο $\mathcal{A}(x^*) \cap \mathcal{I}$ δηλώνει το σύνολο των ενεργών ανισωτικών περιορισμών στο σημείο x^* . Στη περίπτωση αυτή δεν υπάρχει κατεύθυνση p που να ικανοποιεί αμφότερες τις (2.12) και (2.13) αν ισχύουν οι σχέσεις:

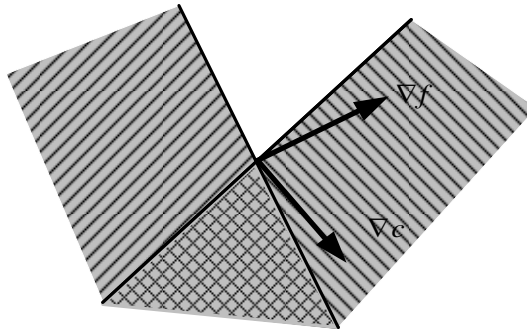
$$\nabla f(x^*) = \sum_{i \in \mathcal{A}(x^*) \cap \mathcal{I}} \nabla c_i(x^*) \lambda_i^* \quad (2.14)$$

$$\text{και} \quad \lambda_i^* \geq 0, \quad i \in \mathcal{A}(x^*) \cap \mathcal{I} \quad (2.15)$$

Οι συνθήκες αυτές επαληθεύονται με εις άτοπον απαγωγή θεωρώντας ότι το σύνολο των διανυσμάτων $\nabla c_i(x^*)$ είναι γραμμικώς ανεξάρτητο. Η εξίσωση (2.14) ισχύει όπως και στη περίπτωση του προβλήματος ισωτικών περιορισμών. Υποθέτοντας ότι η (2.15) δεν ισχύει, τότε υπάρχει κάποιος πολλαπλασιαστής $\lambda_\rho^* < 0$ και παίρνοντας $p = (A^*)^{+T} e_\rho$, όπου $A^+ = (A^T A)^{-1} A^T$ συμβολίζει τον γενικευμένο αντίστροφο του πίνακα A , η εν' λόγω κατεύθυνση p ικανοποιεί τις σχέσεις $p^T \nabla c_i(x^*) = 0$, $i \in \mathcal{A}(x^*) \cap \mathcal{I}$, $i \neq \rho$ και $p^T \nabla c_\rho(x^*) = 1$ και επομένως αποτελεί ένα επιτρεπτό βήμα σε σχέση με την (2.13). Προκύπτει ότι $p^T \nabla f(x^*) = p^T \nabla c_\rho(x^*) \lambda_\rho^* = \lambda_\rho^* < 0$ και το p μειώνει τη συνάρτηση $f(x)$ το οποίο όμως δρα αντίθετα στο γεγονός ότι το x^* είναι τοπικό ελάχιστο.

Οι συνθήκες αυτές απεικονίζονται στο σχήμα (2.2) όπου φαίνεται ξεκάθαρα ότι ο ανοικτός ημι-χώρος που ορίζεται από τη σχέση $\nabla f(x^*)^T p < 0$ και ο κλειστός ημι-χώρος που ορίζεται από τη σχέση

$\nabla c(x^*)^T p \geq 0$ δεν τέμνονται μόνο όταν τα $\nabla f(x)$ και $\nabla c(x)$ δείχνουν στην ίδια κατεύθυνση δηλαδή όταν $\nabla f(x) = \lambda \nabla c(x)$, $\lambda \geq 0$.



Σχήμα. 2.2 Ύπαρξη πολλαπλασιαστών Lagrange ενός προβλήματος ανισωτικών περιορισμών.

Οι συνθήκες βελτίστου για αμφότερες τις περιπτώσεις I και II εκφραζόμενες σε σχέση με τη Λαγκρανζιανή συνάρτηση δίνονται ως ακολούθως:

Όταν σε κάποιο σημείο x^* δεν υπάρχει κάποια επιτρεπτή κατεύθυνση καθόδου έχουμε ότι:

$$\nabla_x \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) = 0, \lambda_i^* \geq 0 \quad (2.16)$$

όπου απαιτείται επίσης να ισχύει:

$$\lambda_i^* c_i(x^*) = 0 \quad (2.17)$$

Η συνθήκη αυτή είναι γνωστή ως συνθήκη συμπληρωματικότητας και διασφαλίζει ότι οι πολλαπλασιαστές Lagrange λ_i μπορούν να είναι αυστηρά θετικοί, μόνο όταν ο αντίστοιχος περιορισμός $c_i(x)$ είναι ενεργός. Στη περίπτωση I λόγω της (2.17) ισχύει $\lambda_i^* = 0$, γι' αυτό η (2.16) απλοποιείται στην εξίσωση $\nabla f(x^*) = 0$ όπως απαιτείται ενώ στην περίπτωση II η (2.17) επιτρέπει τα λ_i^* να παίρνουν θετικές τιμές έτσι που η (2.16) καθίσταται ισοδύναμη με τη (2.14).

2.2 Συνθήκες ελαχίστου 1^{ης} τάξης.

Αφού οι επιτρεπτές κατευθύνσεις παίζουν ένα πολύ σημαντικό ρόλο στη παραγωγή των συνθηκών ελαχίστου δίνονται οι ακόλουθοι ορισμοί.

Ορισμός 2.6

Έστω $x^* \in \Omega$, $0 \neq p \in \mathbb{R}^n$, όπου Ω το επιτρεπτό σύνολο. Αν υπάρχει $\delta > 0$ τέτοιο ώστε $x^* + tp \in \Omega$, $\forall t \in [0, \delta]$ τότε το p καλείται επιτρεπτή κατεύθυνση του συνόλου Ω στο σημείο x^* .

Το σύνολο όλων των επιτρεπτών κατευθύνσεων του συνόλου Ω στο x^* συμβολίζεται ως:

$$FD(x^*, \Omega) = \{p: x^* + tp \in \Omega, \forall t \in [0, \delta]\}$$

Ορισμός 2.7

Έστω $x^* \in \Omega$, η ακολουθία $\{z_k\}$ ονομάζεται επιτρεπτή ακολουθία που προσεγγίζει το x^* αν $z_k \in \Omega$ για κάθε k αρκετά μεγάλο και $z_k \rightarrow x^*$.

Ορισμός 2.8

Ένα διάνυσμα p ονομάζεται οριακή κατεύθυνση μιας επιτρεπτής ακολουθίας $\{z_k\}$ η οποία προσεγγίζει το σημείο x^* , αν υπάρχει ακολουθία θετικών αριθμών $\{\delta_k\}$ με $\delta_k \rightarrow 0$ τέτοια ώστε:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{z_k - x^*}{\delta_k} = p \quad (2.18)$$

Το διάνυσμα p ονομάζεται εφαπτόμενο διάνυσμα του συνόλου Ω στο x^* .

Ορισμός 2.9

Έστω $x^* \in \Omega$ και $p \in \mathbb{R}^n$. Αν υπάρχουν ακολουθίες $\{p_k\}_{k=0}^{\infty}$ και $\{\delta_k\}_{k=0}^{\infty}$ με $\delta_k > 0$ τέτοιες ώστε $x^* + \delta_k p_k \in \Omega \quad \forall k$ και $p_k \rightarrow p, \delta_k \rightarrow 0$, τότε το σύνολο όλων των οριακών κατευθύνσεων p του Ω στο x^* συμβολίζεται ως:

$$LD(x^*, \Omega) = \left\{ p \left| \begin{array}{l} x^* + \delta_k p_k \in \Omega, \forall k \\ p_k \rightarrow p, \delta_k \rightarrow 0 \end{array} \right. \right\}$$

Στο ορισμό 2.9 αν τεθεί $z_k = x^* + \delta_k p_k$ τότε η ακολουθία $\{z_k\}_{k=0}^{\infty}$ είναι μια επιτρεπτή ακολουθία που ικανοποιεί τις ιδιότητες:

1. $z_k \neq x^*, \forall k$
2. $\lim_{k \rightarrow \infty} z_k = x^*$
3. $z_k \in \Omega, \forall k$ αρκετά μεγάλο

Αν $\delta_k = \|z_k - x^*\|$ τότε $p_k = \frac{z_k - x^*}{\|z_k - x^*\|} \rightarrow p$ και άρα το $z_k = x^* + \delta_k p_k$ είναι μια επιτρεπτή ακολουθία με οριακή κατεύθυνση p .

Ορισμός 2.10

Ένας κώνος T είναι ένα σύνολο με την ιδιότητα: $\forall x \in T \Rightarrow \alpha x \in T, \forall \alpha > 0$.

Αν το σύνολο $LD(x^*, \Omega)$ συμπεριλαμβάνει το μηδενικό διάνυσμα συμβολίζεται με $T_{\Omega}(x^*)$ και ονομάζεται εφαπτόμενος κώνος στο $x^* \in \Omega$. Ένας εφαπτόμενος κώνος είναι πράγματι κώνος αφού αν η κατεύθυνση έρευνας p είναι μια οριακή κατεύθυνση με αντίστοιχες ακολουθίες $\{z_k\}$ και $\{\delta_k\}$ τότε αντικαθιστώντας κάθε δ_k με $\delta_k / \alpha, \forall \alpha > 0$ προκύπτει ότι $\alpha p \in T_{\Omega}(x^*)$. Επιπλέον θέτοντας

$z_k = x^*$ στον ορισμό της επιτρεπτής ακολουθίας ισχύει ότι $0 \in T_\Omega(x^*)$.

Αποδεικνύεται στο ([3], Λήμμα 8.2.4, σελ.389) ότι εάν όλες οι συναρτήσεις των περιορισμών είναι διαφορίσιμες στο x^* τότε $FD(x^*, \Omega) \subseteq LD(x^*, \Omega)$.

2.2.1 Αναγκαίες συνθήκες ελαχίστου 1^{ης} τάξης.

Μια τοπική λύση του προβλήματος (2.1) χαρακτηρίζεται ως ένα σημείο x^* στο οποίο όλες οι επιτρεπτές ακολουθίες έχουν την ιδιότητα $f(z_k) \geq f(x^*)$, $\forall k$ αρκετά μεγάλο. Η συνθήκη αυτή αποτελεί τη πιο θεμελιώδη αναγκαία συνθήκη πρώτης τάξης και δίνεται με το θεώρημα που ακολουθεί.

Θεώρημα 2.1 ([3] Θεώρημα 8.2.5, σελ.390).

Έστω $x^* \in \Omega$ τοπικό ελάχιστο του προβλήματος (2.1). Αν οι $f(x)$ και $c_i(x)$, $i=1, \dots, m$ είναι διαφορίσιμες στο x^* τότε, όλες οι επιτρεπτές ακολουθίες $\{z_k\} \in T_\Omega(x^*)$ πρέπει να ικανοποιούν τη σχέση:

$$p^T \nabla f(x^*) \geq 0, \forall p \in LD(x^*, \Omega) \quad (2.19)$$

όπου p είναι οποιαδήποτε οριακή κατεύθυνση της επιτρεπτής ακολουθίας. Αυτό σημαίνει ότι:

$$LD(x^*, \Omega) \cap D(x^*) = \emptyset \quad (2.20)$$

Απόδειξη

Για κάθε $p \in LD(x^*, \Omega)$ υπάρχουν $\delta_k > 0$ και p_k , $k=1, 2, \dots$ τέτοια ώστε $x^* + \delta_k p_k \in \Omega$ με $\delta_k \rightarrow 0$ και $p_k \rightarrow p$. Αφού $x^* + \delta_k p_k \rightarrow x^*$ και x^* είναι τοπικό ελάχιστο, τότε για k αρκετά μεγάλο συνεπάγεται από το θεώρημα Taylor ότι:

$$f(x^*) \leq f(x^* + \delta_k p_k) = f(x^*) + \delta_k p_k^T \nabla f(x^*) + o(\|\delta_k\|)$$

το οποίο διασφαλίζει ότι:

$$p^T \nabla f(x^*) \geq 0 \quad (2.21)$$

και αφού το p είναι τυχαίο λαμβάνεται η (2.19). Επιπλέον η (2.21) υποδηλώνει ότι $p \notin D(x^*)$ και άρα $LD(x^*, \Omega) \cap D(x^*) = \emptyset$.

□

Το θεώρημα 2.1 δείχνει ότι δεν υπάρχει οριακή κατεύθυνση καθόδου σε ένα τοπικό ελάχιστο x^* , παρ' όλα αυτά, η αναγκαία αυτή συνθήκη έτσι όπως είναι διατυπωμένη δεν είναι πολύ χρήσιμη μιας και απαιτεί τη γνώση όλων των πιθανών οριακών κατευθύνσεων για όλες τις επιτρεπτές ακολουθίες

στο $T_\Omega(x^*)$. Συνεπώς είναι βολικό να θεωρηθεί ένα σχετικό σύνολο επιτρεπτών κατευθύνσεων σύμφωνα με τον ακόλουθο ορισμό, οι οποίες λαμβάνονται αν οι περιορισμοί γραμμικοποιηθούν.

Ορισμός 2.11

Έστω $x^* \in \Omega$ και $p \in \mathbb{R}^n$. Αν $p^T \nabla c_i(x^*) = 0$, $i \in \mathcal{E}$ και $p^T \nabla c_i(x^*) \geq 0$, $i \in \mathcal{A}(x^*) \cap \mathcal{I}$ τότε η κατεύθυνση p καλείται γραμμικοποιημένη επιτρεπτή κατεύθυνση του Ω στο x^* . Το σύνολο όλων των γραμμικοποιημένων επιτρεπτών κατευθύνσεων του Ω στο x^* συμβολίζεται με:

$$LFD(x^*, \Omega) = \left\{ p \left| \begin{array}{l} p^T \nabla c_i(x^*) = 0, \quad i \in \mathcal{E} \\ p^T \nabla c_i(x^*) \geq 0, \quad i \in \mathcal{A}(x^*) \cap \mathcal{I} \end{array} \right. \right\}$$

Μια σημαντική διαπίστωση είναι ότι το σύνολο $LFD(x^*, \Omega)$ εξαρτάται από τον ορισμό των συναρτήσεων των περιορισμών c_i , $i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}$ σε αντίθεση με τον εφαπτόμενο κώνο.

Λήμμα 2.2 ([3], Λήμμα 8.2.4, σελ.389).

Έστω $x^* \in \Omega$. Αν όλες οι συναρτήσεις των περιορισμών είναι διαφορίσιμες στο x^* τότε:

$$LD(x^*, \Omega) \subseteq LFD(x^*, \Omega)$$

Απόδειξη

Για κάθε $p \in LD(x^* \in \Omega)$ αν $p=0$ τότε $p \in LFD(x^*, \Omega)$. Για κάθε $p \in LD(x^* \in \Omega)$ αν $p \neq 0$ εξ'ορισμού του συνόλου $LD(x^*, \Omega)$ υπάρχουν ακολουθίες $\{\delta_k\}_{k=1}^\infty$ και $\{p_k\}_{k=1}^\infty$ τέτοιες ώστε $x^* + \delta_k p_k \in \Omega$, $\forall k$ και $p_k \rightarrow p$, $\delta_k \rightarrow 0$. Επιπλέον ισχύουν οι ακόλουθες εξισώσεις:

$$\begin{aligned} c_i(x^* + \delta_k p_k) &= \delta_k p_k^T \nabla c_i(x^*) + o(\|\delta_k p_k\|) = 0 \quad i \in \mathcal{E} \\ c_i(x^* + \delta_k p_k) &= \delta_k p_k^T \nabla c_i(x^*) + o(\|\delta_k p_k\|) \geq 0 \quad i \in \mathcal{A}(x^*) \cap \mathcal{I} \end{aligned}$$

Διαιρώντας της πιο πάνω εξισώσεις με $\delta_k > 0$ προκύπτει για $k \rightarrow \infty$ ότι:

$$\left. \begin{array}{l} p^T \nabla c_i(x^*) = 0, \quad i \in \mathcal{E} \\ p^T \nabla c_i(x^*) \geq 0, \quad i \in \mathcal{A}(x^*) \cap \mathcal{I} \end{array} \right\} \Rightarrow p \in LFD(x^*, \Omega) \Rightarrow LD(x^*, \Omega) \subseteq LFD(x^*, \Omega)$$

□

Είναι πολύ πρακτικό αν τα σύνολα $LD(x^*, \Omega)$ και $LFD(x^*, \Omega)$ είναι ίδια, κάτι το οποίο μπορεί να εγγυηθεί σύμφωνα με το λήμμα 2.3 που ακολουθεί, αν ισχύουν συγκεκριμένες συνθήκες γραμμικότητας ή ανεξαρτησίας.

Ορισμός 2.12

Αν όλοι οι περιορισμοί $c_i(x^*)$, $i \in \mathcal{A}(x^*)$ είναι γραμμικές συναρτήσεις, τότε λέμε ότι ισχύει η συνθήκη LFCQ (linear function constraint qualification).

Ορισμός 2.13

Αν οι κλίσεις των ενεργών περιορισμών $\nabla c_i(x^*)$, $i \in \mathcal{A}(x^*)$ είναι γραμμικώς ανεξάρτητες, τότε λέμε ότι ισχύει η συνθήκη LICQ (linear independence constraint qualification).

Λήμμα 2.3 ([3], Θεώρημα 8.2.11, σελ.394).

Έστω x^* ένα επιτρεπτό σημείο και $\mathcal{A}(x^*)$ το σύνολο δεικτών των ενεργών περιορισμών στο x^* . Τότε, ικανές συνθήκες έτσι ώστε να ισχύει $LD(x^*, \Omega) = LFD(x^*, \Omega)$ στο x^* είναι οι εξής:

1. ισχύει η συνθήκη (LFCQ) ή
2. ισχύει η συνθήκη (LICQ).

□

Για το λόγο αυτό, οι αναγκαία συνθήκη (2.19) του θεωρήματος (2.1) επαναδιατυπώνεται ως εξής:

$$\nabla f(x^*)^T p \geq 0, \forall p \in LFD(x^*, \Omega).$$

Δεδομένου τώρα ότι το σύνολο $LFD(x^*, \Omega)$ περιέχει σε γενικές γραμμές απείρως πολλά διανύσματα και επομένως είναι αδύνατον να διερευνηθεί, το ακόλουθο λήμμα προσφέρει έναν εναλλακτικό πρακτικό τρόπο διερεύνησης της συνθήκης αυτής μέσω της χρησιμοποίησης των πολλαπλασιαστών Lagrange.

Λήμμα 2.4 ([3], Λήμμα 8.2.6, σελ.391).

Το σύνολο $S = \{p: p^T \nabla f(x^*) < 0; p^T \nabla c_i(x^*) = 0, i \in \mathcal{E}; p^T \nabla c_i(x^*) \geq 0, i \in \mathcal{I}\}$ είναι κενό αν και μόνο αν υπάρχουν πραγματικοί αριθμοί $\lambda_i, i \in \mathcal{E}$ και μη-αρνητικοί πραγματικοί αριθμοί $\lambda_i \geq 0, i \in \mathcal{I}$ τέτοιοι ώστε: $\nabla f(x^*) = \sum_{i \in \mathcal{E}} \lambda_i \nabla c_i(x^*) + \sum_{i \in \mathcal{I}} \lambda_i \nabla c_i(x^*)$.

□

Από τον ορισμό 2.11 του συνόλου $LFD(x^*, \Omega)$ προκύπτει ότι το σύνολο S είναι το σύνολο των γραμμικοποιημένων επιτρεπτών κατευθύνσεων καθόδου ($p^T \nabla f(x) < 0$) και συνεπώς το γεγονός ότι το S είναι κενό υποδηλώνει ότι δεν υπάρχει κατεύθυνση καθόδου στο σύνολο $LFD(x^*, \Omega)$.

Πλέον είναι δυνατή μια επιπρόσθετη επαναδιατύπωση των συνθηκών (2.14) και (2.15) σε σχέση με όλους τους περιορισμούς αντί μόνο των ενεργών, παίρνοντας κατ' αυτόν τον τρόπο τις ακόλουθες συνθήκες ελαχίστου πρώτης τάξης για το γενικό πρόβλημα μη-γραμμικού προγραμματισμού οι οποίες συνδιάζονται στο ακόλουθο θεώρημα.

Θεώρημα 2.5 Karush–Kuhn–Taker ([3], Θεώρημα 8.2.7, σελ.391).

Έστω x^* ένα τοπικό ελάχιστο του προβλήματος (2.1). Αν ισχύει η συνθήκη $LD(x^*, \Omega) = LFD(x^*, \Omega)$ τότε υπάρχουν πολλαπλασιαστές Lagrange λ_i^* τέτοιοι ώστε στο (x^*, λ^*) ικανοποιούνται οι ακόλουθες συνθήκες:

$$\nabla f(x^*) - \sum_{i=1}^m \lambda_i^* \nabla c_i(x^*) = 0 \quad (2.22)$$

$$c_i(x^*) = 0, \quad \forall i \in \mathcal{E} \quad (2.23)$$

$$c_i(x^*) \geq 0, \quad \forall i \in \mathcal{I} \quad (2.24)$$

$$\lambda_i^* \geq 0, \quad \forall i \in \mathcal{I} \quad (2.25)$$

$$\lambda_i^* c_i(x^*) = 0, \quad \forall i \in \mathcal{I} \quad (2.26)$$

Απόδειξη

Αφού το σημείο x^* είναι ένα τοπικό ελάχιστο, το x^* είναι επιτρεπτό σημείο και οι (2.23) και (2.24) ικανοποιούνται. Έστω $p \in LD(x^*, \Omega)$. Αφού το x^* είναι τοπικό ελάχιστο προκύπτει από το θεώρημα 2.1 ότι $p^T \nabla f(x^*) \geq 0$. Από τη συνθήκη $LD(x^*, \Omega) = LFD(x^*, \Omega)$, $p \in LFD(x^*, \Omega)$ και από λήμμα 2.4 έπεται ότι το σύστημα:

$$\begin{cases} p^T \nabla c_i(x^*) = 0, & i \in \mathcal{E} \\ p^T \nabla c_i(x^*) \geq 0, & i \in \mathcal{A}(x^*) \cap \mathcal{I} \\ p^T \nabla f(x^*) < 0 \end{cases}$$

δεν έχει λύση και $\nabla f(x^*) = \sum_{i \in \mathcal{E}} \lambda_i^* \nabla c_i(x^*) + \sum_{i \in \mathcal{A}(x^*) \cap \mathcal{I}} \lambda_i^* \nabla c_i(x^*)$ όπου $\lambda_i^* \in \mathbb{R}, i \in \mathcal{E}$ και $\lambda_i^* \geq 0, i \in \mathcal{A}(x^*) \cap \mathcal{I}$

Θέτοντας $\lambda_i^* = 0, i \in \mathcal{I} \setminus \mathcal{A}(x^*) \cap \mathcal{I}$ συνεπάγεται ότι $\nabla f(x^*) = \sum_{i=1}^m \lambda_i^* \nabla c_i(x^*)$ η οποία είναι η σχέση (2.22) και είναι προφανές ότι $\lambda_i^* \geq 0, \forall i \in \mathcal{I}$ δηλαδή ικανοποιείται η (2.26).

Τέλος, όταν $i \in \mathcal{A}(x^*) \cap \mathcal{I}$ τότε $c_i(x^*) = 0$ και $\lambda_i^* \geq 0$ ώστε $\lambda_i^* c_i(x^*) = 0$. Επίσης, όταν $i \in \mathcal{I} \setminus \mathcal{A}(x^*) \cap \mathcal{I}$ τότε $c_i(x^*) > 0$, αλλά $\lambda_i^* = 0$ συνεπώς $\lambda_i^* c_i(x^*) = 0$. Επομένως λαμβάνεται ότι $\lambda_i^* c_i(x^*) = 0, \forall i \in \mathcal{I}$ και η (2.24) ικανοποιείται.

□

Οι συνθήκες (2.22) – (2.26) είναι γνωστές σαν συνθήκες Karush–Kuhn–Tacker (KKT) και ένα σημείο που τις ικανοποιεί αναφέρεται σαν σημείο Karush–Kuhn–Tacker (KKT). Η συνθήκη (2.22) αποκαλείται συνθήκη στάσιμου σημείου διότι μπορεί να επαναδιατυπωθεί ως εξής: $\nabla_x \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) = \nabla f(x^*) - \sum_{i=1}^m \lambda_i^* \nabla c_i(x^*) = 0$. Η συνθήκες (2.23) και (2.24) αποκαλούνται συνθήκες επιτευξιμότητας, η (2.25) είναι η συνθήκη μη-αρνητικότητας των πολλαπλασιαστών και τέλος η (2.26) είναι η συνθήκη συμπληρωματικότητας.

Μια ειδική περίπτωση της συνθήκης συμπληρωματικότητας (2.26) είναι η συνθήκη αυστηρής συμπληρωματικότητας η οποία ικανοποιείται αν ένας ακριβώς από τους πολλαπλασιαστές λ_i^* και τους περιορισμούς $c_i(x^*)$ είναι μηδέν για κάθε $i \in \mathcal{I}$. Με άλλα λόγια ισχύει $\lambda_i^* > 0 \quad \forall i \in \mathcal{I} \cap \mathcal{A}(x^*)$. Σύμφωνα με τα προαναφερθέντα ένας ανισωτικός περιορισμός $c_i(x^*)$ είναι αυστηρά ενεργός, αν $i \in \mathcal{I} \cap \mathcal{A}(x^*)$ και $\lambda_i^* > 0$, δηλαδή $\lambda_i^* > 0, c_i(x^*) = 0$ και είναι ασθενώς ενεργός αν $i \in \mathcal{I} \cap \mathcal{A}(x^*)$ και $\lambda_i^* = 0$, δηλαδή $\lambda_i^* = 0 = c_i(x^*)$.

2.2.2. Ικανές συνθήκες ελαχίστου 1^{ης} τάξης.

Οι αναγκαίες συνθήκες πρώτης τάξης της ενότητας 2.2.1 αποτελούν τις συνθήκες οι οποίες ισχύουν σε ένα τοπικό ελάχιστο του προβλήματος βελτιστοποίησης. Η ικανή συνθήκη τοπικού ελαχίστου πρώτης τάξης η οποία αν ισχύει σε κάποιο σημείο x εξασφαλίζει ότι το σημείο αυτό είναι η λύση του προβλήματος $x = x^*$, δίνεται από το θεώρημα 2.6 που ακολουθεί καθώς επίσης και το πόρισμα 2.7 το οποίο λαμβάνει υπόψη ότι $LD(x^*, \Omega) \subseteq LFD(x^*, \Omega)$.

Θεώρημα 2.6 ([3], Θεώρημα 8.2.14, σελ.397).

Έστω $x^* \in \Omega$, και $f(x), c_i(x), i=1, \dots, m$ είναι παραγωγίσιμες στο x^* . Αν

$$p^T \nabla f(x^*) > 0, \quad \forall p \neq 0 \in LD(x^*, \Omega) \quad (2.27)$$

τότε το x^* είναι ένα αυστηρό τοπικό ελάχιστο του προβλήματος (2.1).

□

Πόρισμα 2.7 ([3], Πόρισμα 8.2.15, σελ.397).

Έστω $x^* \in \Omega$ και $f(x), c_i(x), i=1, \dots, m$ είναι παραγωγίσιμες στο x^* . Αν

$$p^T \nabla f(x^*) > 0, \quad \forall p \neq 0 \in LFD(x^*, \Omega) \quad (2.28)$$

τότε το x^* είναι ένα αυστηρό τοπικό ελάχιστο του προβλήματος (2.1).

□

2.3. Κυρτότητα.

Τα προβλήματα κυρτού προγραμματισμού είναι προβλήματα βελτιστοποίησης με περιορισμούς στα οποία η αντικειμενική συνάρτηση f είναι κυρτή συνάρτηση και το επιτρεπτό σύνολο Ω είναι κυρτό σύνολο. Δυστυχώς, πολλά προβλήματα δεν ανήκουν στη κατηγορία αυτή όπως συμβαίνει για παράδειγμα στη περίπτωση όπου οι συναρτήσεις των περιορισμών είναι μη γραμμικές. Απ' την άλλη

μεριά, είναι δυνατόν να αναδειχθούν αρκετά ισχυρά (και απλά) αποτελέσματα σχετικά με την γενική φύση των λύσεων για ένα κυρτό πρόβλημα προγραμματισμού.

Ένα κυρτό σύνολο K στον \mathbb{R}^n ορίζεται από την ιδιότητα:

$$\forall x_0, x_1 \in K \Rightarrow x_\theta = (1-\theta)x_0 + \theta x_1 \in K, \forall \theta \in [0, 1] \quad (2.29)$$

Ένας πιο γενικός ορισμός που προκύπτει είναι ο ακόλουθος:

$$\forall x_0, x_1, \dots, x_m \in K \Rightarrow x_\theta = \sum_{i=0}^m \theta_i x_i \in K, \text{ όπου } \sum_{i=0}^m \theta_i = 1, \theta_i \geq 0 \quad (2.30)$$

και το διάνυσμα x_θ αναφέρεται ως κυρτός συνδιασμός των $x_i, i=1, \dots, m$.

Ένα απλό συμπέρασμα είναι ότι αν τα σύνολα $K_i, i=1, \dots, m$ είναι κυρτά τότε η τομή τους $K = \bigcap_{i=1}^m K_i$ είναι επίσης ένα κυρτό σύνολο. Στη περίπτωση αυτή αν οι συναρτήσεις των περιορισμών του προβλήματος βελτιστοποίησης ορίζουν κυρτά σύνολα, η επιτρεπτή περιοχή Ω που ορίζεται ως η τομή των συνόλων αυτών θα είναι ένα κυρτό σύνολο.

Μια συνεχής συνάρτηση $f(x)$ που ορίζεται σε ένα κυρτό σύνολο K είναι μια κυρτή συνάρτηση αν το σύνολο των σημείων στον $\mathbb{R} \times \mathbb{R}^n$ που βρίσκεται επί ή άνωθεν του γραφήματος της $f(x)$ είναι ένα κυρτό σύνολο. Συνεπώς μια κυρτή συνάρτηση ορίζεται μέσω της συνθήκης:

$$\forall x_0, x_1 \in K \Rightarrow f_\theta \leq (1-\theta)f_0 + \theta f_1, \forall \theta \in [0, 1] \quad (2.31)$$

όπου ο συμβολισμός f_θ αναφέρεται στην τιμή $f(x_\theta)$ και το σημείο x_θ δίνεται από την (2.29). Το δεξί μέρος της (2.31) είναι η το ευθύγραμμο τμήμα που ενώνει τα σημεία (x_0, f_0) και (x_1, f_1) πάνω στο γράφημα της $f(x)$ και η ανισότητα (2.31) εκφράζει το γεγονός ότι το γράφημα μιας κυρτής συνάρτησης βρίσκεται πάντα κάτω (ή κατά μήκος) του προαναφερθέντος ευθύγραμμου τμήματος. Μια αυστηρά κυρτή συνάρτηση ορίζεται οποτεδήποτε η ανισότητα στην (2.31) είναι αυστηρή $\forall x_0, x_1 \in K$ και $\theta \in (0, 1)$.

Αν οι συναρτήσεις $f_i(x), i=1, \dots, m$ είναι κυρτές σε ένα κυρτό σύνολο K και αν $\lambda_i \geq 0$ τότε το άθροισμα $\sum_i \lambda_i f_i(x)$ είναι κυρτή συνάρτηση στο K .

2.3.1. Κυρτό πρόβλημα προγραμματισμού.

Τυπικά, ένα μη-γραμμικό πρόβλημα προγραμματισμού της μορφής:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x), \quad \begin{cases} c_i(x) = 0, & i \in \mathcal{E} \\ c_i(x) \geq 0, & i \in \mathcal{I} \end{cases} \quad (2.32)$$

με την $f(x)$ να είναι μια κυρτή συνάρτηση, θα είναι ένα κυρτό πρόβλημα προγραμματισμού αν το σύνολο των περιορισμών:

$$\Omega = \{x : c_i(x) = 0, i \in \mathcal{E}, c_i(x) \geq 0, i \in \mathcal{I}\} \quad (2.33)$$

είναι κυρτό.

Μια ικανή συνθήκη για να είναι το επιτρεπόμενο σύνολο Ω κυρτό δίνεται από το ακόλουθο θεώρημα.

Θεώρημα 2.8 ([1], Λήμμα 9.4.3, σελ.216).

Αν οι περιορισμοί $c_i(x), i \in \mathcal{E}$ είναι γραμμικές συναρτήσεις και οι $-c_i(x), i \in \mathcal{E}$ είναι κυρτές συναρτήσεις τότε η επιτρεπόμενη περιοχή Ω που ορίζεται από την (2.33) είναι κυρτό σύνολο.

Απόδειξη

Για $x_0, x_1 \in \Omega$ και αν x_θ δίνεται από την (2.29), δηλαδή $x_\theta = (1-\theta)x_0 + \theta x_1, \forall \theta \in [0,1]$ ισχύουν τα ακόλουθα αποτελέσματα:

- Για x_0, x_1 να ανήκουν στο σύνολο των ισωτικών περιορισμών $\{x : c_i(x) = 0\}$ προκύπτει από τη γραμμικότητα των ισωτικών περιορισμών ότι: $c_i(x_\theta) = (1-\theta)c_i(x_0) + \theta c_i(x_1) = 0, i \in \mathcal{E}$. Συνεπώς το x_θ ανήκει στο σύνολο των ισωτικών περιορισμών και άρα το σύνολο αυτό είναι κυρτό.

- Για x_0, x_1 να ανήκουν στο σύνολο των ανισωτικών περιορισμών $\{x : c_i(x) \geq 0\}$ προκύπτει από τη κυρτότητα των $-c_i(x), i \in \mathcal{E}$ ότι :

$$\left. \begin{array}{l} c_i(x_\theta) \geq (1-\theta)c_i(x_0) + \theta c_i(x_1) \\ c_i(x_0), c_i(x_1) \geq 0 \end{array} \right\} \Rightarrow c_i(x_\theta) \geq 0, i \in \mathcal{I}. \text{ Συνεπώς}$$

το x_θ ανήκει στο σύνολο των ανισωτικών περιορισμών και άρα το σύνολο αυτό είναι κυρτό.

Τέλος, αφού η τομή κυρτών συνόλων είναι κυρτό σύνολο έπεται ότι το σύνολο Ω είναι κυρτό.

□

Όπως και στη περίπτωση προβλημάτων χωρίς περιορισμούς, το ακόλουθο θεώρημα υποδεικνύει ότι το τοπικό ελάχιστο ενός κυρτού προβλήματος ελαχιστοποίησης είναι επίσης και το γενικό ελάχιστο.

Θεώρημα 2.9 ([3], Θεώρημα 8.2.17, σελ.399).

Κάθε τοπικό ελάχιστο ενός κυρτού προβλήματος ελαχιστοποίησης της μορφής (2.32) είναι και το γενικό ελάχιστο του προβλήματος.

Απόδειξη

Έστω ότι το x^* είναι τοπικό αλλά όχι και γενικό ελάχιστο. Τότε $\exists x_1 \in \Omega : f(x_1) < f(x^*)$. Αν θεωρήσουμε το σημείο $x_\theta = (1-\theta)x^* + \theta x_1, \theta \in [0, 1]$ τότε από τη κυρτότητα του συνόλου Ω προκύπτει ότι $x_\theta \in \Omega$.

Επίσης από τη κυρτότητα της συνάρτησης κόστους $f(x)$ έπεται ότι:

$$\begin{aligned} f(x_\theta) &\leq (1-\theta)f(x^*) + \theta f(x_1) \\ &= f(x^*) + \theta(f(x_1) - f(x^*)) \\ &< f(x^*) \text{ , αφού } f(x_1) < f(x^*) \end{aligned}$$

Από την υπόθεση ότι το x^* είναι τοπικό ελάχιστο ισχύει: $f(x^*) \leq f(x) \forall x \in N(x^*, \varepsilon) \cap \Omega$. Για μικρό θ , $x_\theta \in N(x^*, \varepsilon) \cap \Omega$ και γι' αυτό $f(x^*) \leq f(x_\theta)$ το οποίο αποτελεί αντίφαση και επομένως τα τοπικά ελάχιστα είναι γενικά ελάχιστα. □

2.4. Συνθήκες ελαχίστου 2^{ης} τάξης.

Από το θεώρημα 2.6 προκύπτει ότι για $x^* \in \Omega$ αν ισχύει η σχέση (2.27) δηλαδή αν $p^T \nabla f(x^*) > 0$, $\forall p \neq 0 \in LD(x^*, \Omega)$, τότε το x^* είναι αυστηρό τοπικό ελάχιστο του προβλήματος (2.1). Από την άλλη μεριά, από το θεώρημα (2.1) συνεπάγεται ότι αν δεν ισχύει η (2.19) δηλαδή αν υπάρχει $p \in LD(x^*, \Omega)$ τέτοιο ώστε $p^T \nabla f(x^*) < 0$, τότε το x^* δεν μπορεί να είναι τοπικό ελάχιστο του προβλήματος (2.1). Τα αποτελέσματα αυτά εκφράζουν το γεγονός ότι είτε η (2.27) είτε η (2.19) μπορούν να χρησιμοποιηθούν για να καθορίσουν το κατά πόσο το σημείο x^* είναι τοπικό ελάχιστο. Αν τόσο η (2.12) όσο και η (2.22) δεν ισχύουν, δηλαδή αν:

$$p^T \nabla f(x^*) \geq 0, \forall p \in LD(x^*, \Omega) \quad (2.34)$$

$$\exists p \neq 0 \in LD(x^*, \Omega) \text{ τέτοιο ώστε } p^T \nabla f(x^*) = 0 \quad (2.35)$$

τότε στη περίπτωση αυτή για τον καθορισμό του κατά πόσο το σημείο x^* είναι τοπικό ελάχιστο και συνεπώς μια κίνηση κατά μήκος αυτής της κατεύθυνσης θα αυξήσει ή θα μειώσει την συνάρτηση κόστους f , είναι χρήσιμη η πληροφορία προερχόμενη από την παράγωγο 2^{ης} τάξης.

2.4.1 Αναγκαίες συνθήκες ελαχίστου 2^{ης} τάξης.

Έστω ότι ισχύει η συνθήκη $LD(x^*, \Omega) = LFD(x^*, \Omega)$. Προκύπτει από τη σχέση (2.34) ότι $p^T \nabla f(x^*) \geq 0$, $\forall p \in LFD(x^*, \Omega)$, όπου:

$$LFD(x^*, \Omega) = \{p: p^T \nabla c_i(x^*) = 0 \text{ } i \in \mathcal{E}, p^T \nabla c_i(x^*) \geq 0 \text{ } i \in \mathcal{A}(x^*) \cap \mathcal{I}\}$$

τότε, το σύνολο:

$$S = \{p: p^T \nabla f(x^*) < 0, p^T \nabla c_i(x^*) = 0 \text{ } i \in \mathcal{E}, p^T \nabla c_i(x^*) \geq 0 \text{ } i \in \mathcal{A}(x^*) \cap \mathcal{I}\}$$

είναι κενό και με βάση το θεώρημα (2.5) υπάρχουν $\lambda_i \in \mathbb{R}, i \in \mathcal{E}$ και $\lambda_i \geq 0, i \in \mathcal{A}(x^*) \cap \mathcal{I}$ τέτοια ώστε το x^* είναι σημείο KKT. Συνεπώς:

$$\nabla f(x^*) = \sum_{i \in \mathcal{E}} \lambda_i \nabla c_i(x^*) + \sum_{i \in \mathcal{A}(x^*) \cap \mathcal{I}} \lambda_i \nabla c_i(x^*) = \sum_{i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}} \lambda_i^* \nabla c_i(x^*)$$

και από την (2.35) συνεπάγεται ότι:

$$\exists p \neq 0 \in LD(x^*, \Omega) \text{ τέτοιο ώστε } p^T \nabla f(x^*) = \sum_{i=1}^m \lambda_i^* p^T \nabla c_i(x^*) = 0 \quad (2.36)$$

Όμως, από τη συνθήκη $LD(x^*, \Omega) = LFD(x^*, \Omega)$ ισχύει επίσης ότι $p \in LFD(x^*, \Omega)$ όπου

$$LFD(x^*, \Omega) = \left\{ p: p^T \nabla c_i(x^*) = 0 \quad i \in \mathcal{E}, \quad p^T \nabla c_i(x^*) \geq 0 \quad i \in \mathcal{A}(x^*) \cap \mathcal{I} \right\}.$$

Αυτό οδηγεί στο συμπέρασμα ότι η (2.36) είναι ισοδύναμη με τη συνθήκη:

$$\lambda_i^* p^T \nabla c_i(x^*) = 0, \quad \forall i \in \mathcal{A}(x^*) \cap \mathcal{I} \quad (2.37)$$

Έτσι, ορίζεται το σύνολο των ισχυρών ενεργών περιορισμών ως:

$$\mathcal{I}_+(x^*) = \left\{ i: i \in \mathcal{A}(x^*) \cap \mathcal{I} \text{ με } \lambda_i^* > 0 \right\} \subseteq \mathcal{A}(x^*) \cap \mathcal{I} \quad (2.38)$$

Δεδομένου ότι το σημείο x^* είναι ένα σημείο KKT και λ^* το διάνυσμα των αντίστοιχων πολλαπλασιαστών Lagrange, ορίζεται το σύνολο:

$$LFD(x^*, \lambda^*) = \left\{ p \left| \begin{array}{l} p \neq 0 \\ p^T \nabla c_i(x^*) = 0, \quad i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}_+(x^*) \\ p^T \nabla c_i(x^*) \geq 0, \quad i \in \{\mathcal{A}(x^*) \cap \mathcal{I}\} \setminus \mathcal{I}_+(x^*) \end{array} \right. \right\} \quad (2.39)$$

το οποίο γράφεται εναλλακτικά ως:

$$LFD(x^*, \lambda^*) = \left\{ p \left| \begin{array}{l} p \in LFD(x^*, \Omega) \\ p^T \nabla c_i(x^*) = 0, \quad i \in \mathcal{I}_+(x^*) \end{array} \right. \right\} \quad (2.40)$$

Ορίζεται επίσης το σύνολο:

$$LD(x^*, \lambda^*) = \left\{ p \left| \begin{array}{l} x_k = x^* + \delta_k p_k \in \Omega, \quad \delta_k > 0, \quad \delta_k \rightarrow 0, \quad p_k \rightarrow p \\ c_i(x_k) = 0, \quad i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}_+(x^*) \\ c_i(x_k) \geq 0, \quad i \in \{\mathcal{A}(x^*) \cap \mathcal{I}\} \setminus \mathcal{I}_+(x^*) \end{array} \right. \right\} \quad (2.41)$$

το οποίο γράφεται εναλλακτικά ως:

$$LD(x^*, \lambda^*) = \left\{ p \left| \begin{array}{l} p \in LD(x^*, \Omega) \\ \lambda_i^* c_i(x_k) = 0, \quad i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I} \end{array} \right. \right\} \quad (2.42)$$

Η αναγκαία συνθήκη δεύτερης τάξης δίνεται από το ακόλουθο θεώρημα.

Θεώρημα 2.10 ([3], Θεώρημα 8.3.3, σελ.403).

Έστω x^* τοπικό ελάχιστο του προβλήματος (2.1). Αν ισχύει η συνθήκη $LD(x^*, \Omega) = LFD(x^*, \Omega)$ τότε:

$$p^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) p \geq 0, \quad \forall p \in LD(x^*, \lambda^*) \quad (2.43)$$

Επιπλέον, αν $LD(x^*, \lambda^*) = LFD(x^*, \lambda^*)$ τότε:

$$p^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) p \geq 0, \quad \forall p \in LFD(x^*, \lambda^*) \quad (2.44)$$

Απόδειξη

Για κάθε $p \in LD(x^*, \lambda^*)$ και $p \neq 0$, προφανώς: $p^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) p = 0$. Έστω ότι $p \neq 0, p \in LD(x^*, \lambda^*)$. Τότε, υπάρχουν ακολουθίες $\{p_k\}$ και $\{\delta_k\}$ τέτοιες ώστε $x_k = (x^* + \delta_k p_k) \in \Omega$ και $\sum_{i=1}^m \lambda_i^* c_i(x^* + \delta_k p_k) = 0$. Η Λανγκρανζιανή συνάρτηση είναι $\mathcal{L}(x^*, \lambda^*) = f(x^*) - \sum_{i=1}^m \lambda_i^* c_i(x^*)$ και άρα:

$$\begin{aligned} f(x^* + \delta_k p_k) &= \mathcal{L}(x^* + \delta_k p_k, \lambda^*) \\ &= \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) + \delta_k p_k^T \nabla_x \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) + \frac{1}{2} \delta_k^2 p_k^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) p_k + o(\delta_k^2) \\ &= \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) + \frac{1}{2} \delta_k^2 p_k^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) p_k + o(\delta_k^2) \\ &= f(x^*) + \frac{1}{2} \delta_k^2 p_k^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) p_k + o(\delta_k^2) \end{aligned} \quad (2.45)$$

Αφού το x^* είναι τοπικό ελάχιστο, για k αρκετά μεγάλο ισχύει:

$$f(x^* + \delta_k p_k) \geq f(x^*) \quad (2.46)$$

Χρησιμοποιώντας τις (2.45) και (2.46) και παίρνοντας τα όρια προκύπτει ότι: $p^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) p \geq 0$ και δεδομένου ότι το p είναι τυχαίο τότε $p^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) p \geq 0, \forall p \in LD(x^*, \lambda^*)$. Επίσης, αν $LD(x^*, \lambda^*) = LFD(x^*, \lambda^*)$ τότε προκύπτει άμεσα η (2.44) από την (2.43).

□

2.4.2 Ικανές συνθήκες ελαχίστου 2^{ης} τάξης.

Η ικανή συνθήκη δεύτερης τάξης που διασφαλίζει ότι το x^* είναι τοπική λύση του προβλήματος διατυπώνεται στο ακόλουθο θεώρημα.

Θεώρημα 2.11 ([3], Θεώρημα 8.3.4, σελ.404).

Έστω x^* ένα σημείο KKT του προβλήματος (2.1). Αν

$$p^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) p > 0, \quad \forall p \in LFD(x^*, \lambda^*) \quad (2.47)$$

τότε το x^* είναι αυστηρό τοπικό ελάχιστο.

Απόδειξη

Αρκεί να αποδειχθεί ότι δοσμένης οποιασδήποτε επιτρεπτής ακολουθίας $\{x_k\}$ που προσεγγίζει το x^* έχουμε ότι $f(x_k) > f(x^*)$ για κάθε k αρκετά μεγάλο. Έστω ότι αυτό δεν είναι αληθές, δηλαδή υπάρχει ακολουθία:

$$\{x_k\} \subset \Omega : f(x_k) \leq f(x^*) \quad (2.48)$$

με $x_k \rightarrow x^*$ ($k=1,2,\dots$) και $x_k \neq x^*$.

Χωρίς βλάβη της γενικότητας θεωρούμε ότι:

$$\frac{x_k - x^*}{\|x_k - x^*\|} \rightarrow p \quad (2.49)$$

Θέτουμε $p_k = \frac{x_k - x^*}{\|x_k - x^*\|}$, $\delta_k = \|x_k - x^*\|$ και συνεπώς $p \in LD(x^*, \Omega) \subseteq LFD(x^*, \Omega)$.

$f(x_k) = f(x^*) + (x_k - x^*)^T \nabla f(x^*) + o(\|x_k - x^*\|)$ και διαιρώντας με $\|x_k - x^*\|$ και παίρνοντας το όριο καθώς $k \rightarrow \infty$ προκύπτει από τις (2.48) και (2.49) ότι:

$$p^T \nabla f(x^*) \leq 0 \quad (2.50)$$

Από τις συνθήκες KKT : $p^T \nabla f(x^*) = \sum_{i=1}^m \lambda_i^* p^T \nabla c_i(x^*)$ και επειδή $p \in LFD(x^*, \Omega)$ προκύπτει ότι:

$$p^T \nabla f(x^*) = \sum_{i=1}^m \lambda_i^* p^T \nabla c_i(x^*) \geq 0 \quad (2.51)$$

Οι (2.50) και (2.51) δίνουν $p^T \nabla f(x^*) = 0$ το οποίο εξασφαλίζει από την (2.51) και το γεγονός ότι $p \in LFD(x^*, \Omega)$ ότι:

$$\lambda_i^* p^T \nabla c_i(x^*) = 0, \quad \forall i \in \mathcal{A}(x^*) \cap \mathcal{I} \quad (2.52)$$

Άρα από το γεγονός ότι $p \in LFD(x^*, \Omega)$ και από την (2.52) έπεται ότι $p \in LFD(x^*, \lambda^*)$.

Από την (2.48) συνεπάγεται:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) &\geq \mathcal{L}(x_k, \lambda^*) \\ &= \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) + \frac{1}{2} \delta_k^2 p_k^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) p_k + o(\delta_k^2) \end{aligned}$$

Διαιρώντας με δ_k^2 και παίρνοντας το όριο δίνει $p^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) p < 0$ το οποίο αντικρούει την (2.47). \square

Ορίζοντας το σύνολο $\mathcal{A}_+(x^*, \lambda^*) = \mathcal{E}U\{i : i \in \mathcal{A}(x^*) \cap \mathcal{I}, \lambda_i > 0\} = \mathcal{E}U\mathcal{I}_+(x^*)$ η ικανή συνθήκη (2.47) γίνεται:

$$p^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) p > 0, \quad \forall p \neq 0 \text{ τέτοιο ώστε } p^T \nabla c_i(x^*) = 0, \quad \forall i \in \mathcal{A}_+(x^*, \lambda^*)$$

η οποία είναι επίσης μια ικανή συνθήκη δεύτερης τάξης καταλληλότερη να διαπιστωθεί στην πράξη.

2.5 Απλοποιημένη μήτρα Hessian και ικανές συνθήκες ελαχίστου 2^{ης} τάξης.

Οι συνθήκες 2^{ης} τάξης μπορούν να διατυπωθούν σε μια πιο ασθενή μορφή από τις (2.44) και (2.47). Όταν ο πολλαπλασιαστής λ^* που ικανοποιεί τις συνθήκες KKT είναι μοναδικός, όπως για παράδειγμα στη περίπτωση όπου ισχύει η συνθήκη LICQ δηλαδή οι κλίσεις $\nabla c_i(x^*)$, $i \in \mathcal{A}(x^*)$ είναι γραμμικά ανεξάρτητες και ισχύει η συνθήκη αυστηρής συμπληρωματικότητας, τότε $\{\mathcal{A}(x^*) \cap \mathcal{I}\} \setminus \mathcal{I}_+(x^*) = \emptyset$ και το σύνολο $LFD(x^*, \lambda^*)$ που δίνεται από τη σχέση (2.39) απλοποιείται στη μορφή:

$$LFD(x^*, \lambda^*) = \text{Null} [\nabla c_i(x^*)^T]_{i \in \mathcal{A}(x^*)} = \text{Null}(A^*) \quad (2.53)$$

όπου $A^{*T} = A(x^*)^T = [\nabla c_i(x^*)^T]_{i \in \mathcal{A}(x^*)}$, δηλαδή το σύνολο $LFD(x^*, \lambda^*)$ είναι ο μηδενικός χώρος της Ιακωβιανής των ενεργών περιορισμών A^* .

Συμβολίζοντας με $Z \in \mathbb{R}^{n \times \mathcal{L}(x^*)}$ τον πίνακα οι στήλες του οποίου αποτελούν μια βάση για τον μηδενικό χώρο του πίνακα A , τότε ισχύει $AZ=0$ και οι στήλες του πίνακα Z παράγουν τον χώρο $LFD(x^*, \lambda^*)$ δηλαδή: $LFD(x^*, \lambda^*) = \{Zu : u \in \mathbb{R}^{\mathcal{L}(x^*)}\}$

Κάθε διάνυσμα $p \in LDF(x^*, \lambda^*)$ μπορεί να γραφτεί ως $p=Zu$ για κάποιο διάνυσμα $u \in \mathbb{R}^{\mathcal{L}(x^*)}$ και αντιστρόφως έχουμε ότι $Zu \in LFD(x^*, \lambda^*)$ για κάθε u . Επομένως η αναγκαία συνθήκη δεύτερης τάξης (2.44) επαναδιατυπώνεται ως εξής:

$$u^T Z^T \nabla_{xx} \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) Zu \geq 0, \forall u$$

όπου η μήτρα $Z^T \nabla_{xx} \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) Z$ καλείται η απλοποιημένη μήτρα Hessian της Λανγκρανζιανής συνάρτησης (reduced Hessian), ή ισοδυνάμως ισχύει ότι:

$$\text{ο πίνακας } Z^T \nabla_{xx} \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) Z \text{ είναι θετικά ημιορισμένος} \quad (2.54)$$

Ομοίως η ικανή συνθήκη δεύτερης τάξης επαναδιατυπώνεται ως εξής:

$$\text{ο πίνακας } Z^T \nabla_{xx} \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) Z \text{ είναι θετικά ορισμένος} \quad (2.55)$$

Ο πίνακας Z μπορεί να υπολογιστεί κανοντας χρήση των μεθόδων οι οποίες περιγράφονται στις τεχνικές εξάλειψης των μεταβλητών σε μη-γραμμικά προβλήματα βελτιστοποίησης με περιορισμούς (κεφάλαιο 4), έτσι που οι συνθήκες (2.54) και (2.55) μπορούν στη πραγματικότητα να ελεγχθούν, δημιουργώντας αρχικά αυτούς τους πίνακες και βρίσκοντας στη συνέχεια τις ιδιοτιμές τους.

Κεφάλαιο 3

Μέθοδοι Quasi-Newton.

Σε ένα ευρύ φάσμα πρακτικών προβλημάτων το κόστος υπολογισμού των μητρών Hessian είναι μεγάλο και οδηγεί στις μεθόδους Quasi-Newton στις οποίες η μήτρα $\nabla^2 f_k^{-1}$ προσεγγίζεται σε κάθε επανάληψη από μια συμμετρική και θετικά ορισμένη μήτρα H_k . Είναι επιθυμητό οι επαναλαμβανόμενες ανανεώσεις να αλλάζουν την τυχαία αρχική μήτρα H_0 σε μια αρκετά καλή προσέγγιση της $\nabla^2 f_k^{-1}$.

Η ιδέα των μεθόδων Quasi-Newton είναι η ακόλουθη. Η συνάρτηση κόστους $f(x)$ προσεγγίζεται στη τρέχουσα επανάληψη x_k με το τετραγωνικό μοντέλο:

$$m_k(p) = f_k + \nabla f_k^T p + \frac{1}{2} p^T B_k p \quad (3.1)$$

έτσι που η τιμή της συνάρτησης του μοντέλου και η κλίση της στο $p=0$ να ταιριάζουν με τις τιμές f_k και ∇f_k αντίστοιχα. Το σημείο ελαχίστου του μοντέλου:

$$p_k = -B_k^{-1} \nabla f_k \quad (3.2)$$

χρησιμοποιείται στη συνέχεια ως κατεύθυνση έρευνας και η νέα επανάληψη είναι $x_{k+1} = x_k + a_k p_k$. Η διαφορά με τη μέθοδο αναζήτηση γραμμής του Newton είναι ότι στη θέση της πραγματικής μήτρας Hessian χρησιμοποιείται η $n \times n$ προσεγγιστική μήτρα B_k η οποία είναι συμμετρική και θετικά ορισμένη και θα αναθεωρείται ή θα ανανεώνεται σε κάθε επανάληψη.

Για τη κατασκευή στη νέα επανάληψη x_{k+1} ενός νέου τετραγωνικού μοντέλου το οποίο θα έχει τη μορφή:

$$m_{k+1}(p) = f_{k+1} + \nabla f_{k+1}^T p + \frac{1}{2} p^T B_{k+1} p$$

όπου B_{k+1} είναι μια προσέγγιση της μήτρας Hessian, μία λογική απαίτηση η οποία επιβάλλεται στη μήτρα B_{k+1} - βασιζόμενη σε δεδομένα κατά την διάρκεια της τελευταίας επανάληψης - είναι η κλίση της συνάρτησης m_{k+1} να ταιριάζει με αυτή της $f(x)$ στις δύο τελευταίες επαναλήψεις x_k και x_{k+1} . Η δεύτερη από αυτές τις συνθήκες ικανοποιείται αυτόματα αφού $\nabla m_{k+1}(0) = \nabla f_{k+1}$, ενώ η πρώτη γράφεται μαθηματικά ως εξής:

$$\nabla m_{k+1}(-a_k p_k) = \nabla f_{k+1} - a_k B_{k+1} p_k = \nabla f_k$$

Ορίζοντας τα διανύσματα $s_k = x_{k+1} - x_k$, $y_k = \nabla f_{k+1} - \nabla f_k$ η παραπάνω εξίσωση γίνεται:

$$B_{k+1} s_k = y_k \quad (3.3)$$

$$\text{ή } H_{k+1} y_k = s_k \quad (3.4)$$

όπου $H_{k+1} = B_{k+1}^{-1}$.

Οι εξισώσεις αυτές είναι γνωστές σαν συνθήκες Quasi-Newton και δεδομένης της μετατόπισης s_k και της μεταβολής των κλίσεων y_k , εκφράζουν την απαίτηση η συμμετρικά και θετικά ορισμένη μήτρα B_{k+1} να αποικονίζει το s_k στο y_k ή η μήτρα H_{k+1} να αποικονίζει το y_k στο s_k .

Πολλαπλασιάζοντας και τα δύο μέρη της (3.3) με s_k^T ή τα δύο μέρη της (3.4) με y_k^T , διαπιστώνεται εύκολα ότι η παραπάνω απαίτηση είναι δυνατή αν και μόνο αν τα s_k και y_k ικανοποιούν τη λεγόμενη συνθήκη καμπυλότητας:

$$s_k^T y_k > 0 \quad (3.5)$$

Από τα προαναφερθέντα, η βασική ιδέα της μεθόδου Quasi-Newton είναι να παράγει τη μήτρα H_{k+1} (ή την B_{k+1}) μέσω κάποιων βολικών μεθοδολογιών, έτσι που οι συνθήκες Quasi-Newton (3.3) (ή (3.4)) να ικανοποιούνται. Ο στόχος είναι να βρεθεί μια μεθοδολογία η οποία είναι απλή και με μικρό υπολογιστικό κόστος. Ένας γενικός αλγόριθμος Quasi-Newton για προβλήματα χωρίς περιορισμούς φαίνεται παρακάτω:

Αλγόριθμος 3.1 (Γενικός αλγόριθμος Quasi-Newton)

Given $x_0 \in \mathbb{R}^n$, $H_0 \in \mathbb{R}^n$, $0 \leq \varepsilon < 1$

$k=0$

if $\|\nabla f_k\| \leq \varepsilon$ stop

else compute $p_k = -H_k \nabla f_k$ (or solve $B_k p_k = -\nabla f_k$ for p_k)

- Find $a_k > 0$ by line search and set $x_{k+1} = x_k + a_k p_k$
- Update H_k into H_{k+1} so that (3.4) holds (or update B_k into B_{k+1} so that (3.3) holds)

end

$k = k+1$

Η αρχική μήτρα H_0 μπορεί να είναι οποιαδήποτε θετικά ορισμένη μήτρα συχνά ωστόσο γίνεται η επιλογή $H_0 = I$.

3.1 Η ανανέωση SR1.

Ο απλούστερος τρόπος παραγωγής της H_{k+1} από την H_k είναι να ισχύει:

$$H_{k+1} = H_k + E_k = H_k + a u u^T, \quad u \in \mathbb{R}^n$$

όπου μια συμμετρική μήτρα $E_k = a u u^T$ βαθμού 1 προστίθεται στη μήτρα H_k . Για να ικανοποιείται η εξίσωση (3.4) προκύπτει ότι $(a u^T y_k) u = s_k - H_k y_k$ και άρα το διάνυσμα u πρέπει να βρίσκεται στη

κατεύθυνση του διανύσματος $s_k - H_k y_k$. Θέτοντας $u = s_k - H_k y_k$ είναι εμφανές ότι το a ορίζεται από τη σχέση $au^T y_k = 1$. Συνεπώς, ο τύπος ανανέωσης βαθμού 1 δίνεται ως εξής:

$$H_{k+1}^{SR1} = H_k + \frac{(s_k - H_k y_k)(s_k - H_k y_k)^T}{(s_k - H_k y_k)^T y_k} \quad (3.6)$$

και επιτρέπει τον υπολογισμό της κατεύθυνσης έρευνας (3.2) μέσω απλού πολλαπλασιασμού πίνακα-διανύσματος.

Ο αντίστοιχος τύπος ανανέωσης για την προσέγγιση B_{k+1} της μήτρας Hessian προκύπτει από την εφαρμογή του τύπου των Sherman-Morrison-Woodbury (παράρτημα Π.8) και δίνεται από τη σχέση:

$$B_{k+1}^{SR1} = B_k + \frac{(y_k - B_k s_k)(y_k - B_k s_k)^T}{(y_k - B_k s_k)^T s_k} \quad (3.7)$$

Ο τύπος ανανέωσης SR1 πάσχει από δύο σοβαρά μειονεκτήματα:

1. Ακόμη και αν η μήτρα B_k (ή H_k) είναι θετικά ορισμένη, η μήτρα B_{k+1} (ή H_{k+1}) μπορεί να μην έχει αυτή την ιδιότητα. Για τον σκοπό αυτό θα πρέπει να ισχύει $(s_k - H_k y_k)^T y_k > 0$, ωστόσο η συνθήκη αυτή είναι δύσκολο να εγγυηθεί. Για τον λόγο αυτό η ανανέωση SR1 χρησιμοποιείται επιτυχώς στα πλαίσια των αλγόριθμων περιοχής εμπιστοσύνης όπου δεν απαιτείται οι προσεγγίσεις της μήτρας Hessian να είναι θετικά ορισμένες.
2. Κάποιες φορές ο παρανομαστής στη σχέση (3.6) (ή στην (3.7)) είναι πολύ μικρός ή μηδέν και οδηγεί σε σοβαρές αριθμητικές δυσκολίες.

Αναφορικά με τον πίνακα B_k (όμοια επιχειρήματα απευθύνονται και για την περίπτωση του πίνακα H_k) υπάρχουν τρεις περιπτώσεις:

- ❶ $(y_k - B_k s_k)^T s_k \neq 0$: υπάρχει ένας μοναδικός τύπος ανανέωσης βαθμού 1 ο οποίος δίνεται από τη σχέση (3.7) που ικανοποιεί τις συνθήκες Quasi-Newton (3.3).
- ❷ $y_k = B_k s_k$: ο μόνος τύπος ανανέωσης που ικανοποιεί τις συνθήκες (3.3) είναι απλά $B_{k+1} = B_k$.
- ❸ $y_k \neq B_k s_k$ και $(y_k - B_k s_k)^T s_k = 0$: δεν υπάρχει τύπος ανανέωσης βαθμού 1 που να ικανοποιεί τις συνθήκες (3.3).

Παρ'όλα αυτά, η μέθοδος SR1 παρουσιάζει ενδιαφέρον για τους εξής λόγους:

- 1) Οι μήτρες που δημιουργούνται μέσω του τύπου SR1 τείνουν να είναι καλές προσεγγίσεις της πραγματικής μήτρας Hessian.
- 2) Ένα απλό μέτρο προστασίας εμποδίζει επαρκώς την κατάρρευση της μεθόδου και την εμφάνιση αριθμητικών ασταθειών, σύμφωνα με το οποίο γίνεται χρήση της σχέσης (3.7) μόνο εάν:

$$|s_k^T (y_k - B_k s_k)| \geq \tau \|s_k\| \|y_k - B_k s_k\| \quad (3.8)$$

- 3) Αν ο τύπος SR1 εφαρμοστεί σε τετραγωνικές συναρτήσεις ισχύουν οι ακόλουθες ιδιότητες:

- α) Η ανανέωση SR1 δεν χρειάζεται να εφαρμόσει την τεχνική αναζήτησης γραμμής και τερματίζει σε τουλάχιστον $n+1$ επαναλήψεις.
- β) Η συνθήκη Quasi-Newton ικανοποιείται όχι μόνο κατά μήκος των πιο πρόσφατων κατευθύνσεων έρευνας αλλά και κατά μήκος όλων των προηγούμενων, ανεξάρτητα από το πως εκτελείται η αναζήτηση γραμμής (ακριβής ή μη-ακριβής).

Οι ιδιότητες (3α) και (3β) αποδεικνύονται με το ακόλουθο θεώρημα θεωρώντας για απλότητα ένα ομοιόμορφο μήκος βήματος ίσο με ένα, δηλαδή

$$p_k = -H_k \nabla f_k, \quad x_{k+1} = x_k + p_k \quad (3.9)$$

Θεώρημα 3.1 ([2], Θεώρημα 6.1, σελ. 147).

Έστω η συνάρτηση $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ δίνεται από τη σχέση $f(x) = \frac{1}{2}x^T A x + b^T x + c$ όπου ο πίνακας Hessian A είναι συμμετρικός και θετικά ορισμένος και έστω ότι $(s_k - H_k y_k)^T y_k \neq 0, \forall k$. Τότε για κάθε αρχικό σημείο x_0 και κάθε συμμετρικό αρχικό πίνακα H_0 , οι επαναλήψεις $\{x_k\}$ που παράγονται από τη μέθοδο SR1 συγκλίνουν στο σημείο ελαχίστου της συνάρτησης το πολύ σε n βήματα. Επιπλέον, αν εκτελεστούν n βήματα και οι κατευθύνσεις έρευνας s_i είναι γραμμικά ανεξάρτητες τότε $H_n = A^{-1}$.

Απόδειξη

Αφού $(s_k - H_k y_k)^T y_k \neq 0$ η μέθοδος SR1 είναι καλά ορισμένη. Από τον κανόνα παραγώγισης $\nabla(u^T v) = -\nabla(u^T)v + \nabla(v^T)u$ και παίρνοντας $u = x, v = Ax$ προκύπτει (δεδομένης της συμμετρίας του πίνακα A): $\nabla f(x) = \frac{1}{2}\nabla(x^T A x) + \nabla(b^T x) = \frac{1}{2}(A + A^T)x + b = Ax + b$. Συνεπώς η $f(x)$ έχει σταθερή μήτρα Hessian A και η κλίση της είναι γραμμική συνάρτηση του x έτσι που ισχύει $\nabla f(x_2) - \nabla f(x_1) = A(x_2 - x_1)$ για κάθε x_1, x_2 . Η παραπάνω εξίσωση μπορεί να γραφτεί ως:

$$y_i = A s_i \quad (3.10)$$

Αποδεικνύεται πρώτα επαγωγικά, ότι η συνθήκη Quasi-Newton (3.4) ικανοποιείται κατά μήκος όλων των κατευθύνσεων, δηλαδή ισχύει:

$$H_k y_j = s_j, \quad j = 0, \dots, k-1 \quad (3.11)$$

Για $k=1$ και από τον ορισμό (3.6) προκύπτει ότι: $H_1 y_0 = S_0$ δηλαδή η (3.4) ικανοποιείται. Θεωρείται τώρα ότι η (3.11) ισχύει για $k > 1$ και δείχνεται ότι ισχύει για $k+1$. Από την (3.6):

$$H_{k+1}^{SR1} y_j = H_k y_j + \frac{(s_k - H_k y_k)(s_k - H_k y_k)^T y_j}{(s_k - H_k y_k)^T y_k}$$

Όμως $(s_k - H_k y_k)^T y_j \stackrel{(3.11)}{=} s_k^T y_j - y_k^T s_j \stackrel{(3.10)}{=} s_k^T A s_j - s_k^T A s_j = 0, \forall j < k$

Συνεπάγεται ότι $H_{k+1} y_j = H_k y_j$ και από την επαγωγική υπόθεση έπεται ότι $H_{k+1} y_j = H_k y_j = s_j, \forall j < k$. Επίσης ως άμεσο επακόλουθο της (3.6) είναι ότι $H_{k+1} y_k = s_k$ και γι' αυτό η (3.11) ισχύει για κάθε k .

Αν ο αλγόριθμος εκτελεί n - επαναλήψεις : $s_j = H_n y_j \stackrel{(3.10)}{=} H_n A s_j$, $j=0,1,\dots,n-1$. Αν τα βήματα $\{s_j\}$ είναι γραμμικά ανεξάρτητα έπεται ότι $H_n A = I \Rightarrow H_n = A^{-1}$. Επομένως το βήμα που λαμβάνεται στο σημείο x_n είναι το βήμα της μεθόδου Newton και έτσι ο τερματισμός του αλγόριθμου λαμβάνει χώρα τότε αν όχι πιο πριν, αφού:

$$s_n = p_n = A^{-1} y_n \Rightarrow -A^{-1} \nabla f_n = A^{-1} (\nabla f_{n+1} - \nabla f_n) \Rightarrow \nabla f_{n+1} = 0.$$

Αν τα βήματα είναι γραμμικά εξαρτημένα τότε $s_k = \xi_0 s_0 + \xi_1 s_1 + \dots + \xi_{k-1} s_{k-1}$ και από την (3.10):

$$H_k y_k = H_k A s_k = \xi_0 H_k A s_0 + \dots + \xi_{k-1} H_k A s_{k-1} \stackrel{(3.10)}{=} \xi_0 H_k y_0 + \dots + \xi_{k-1} H_k y_{k-1} \stackrel{(3.11)}{=} \xi_0 s_0 + \dots + \xi_{k-1} s_{k-1} = s_k$$

Προκύπτει η σχέση: $H_k y_k = s_k \Rightarrow H_k (\nabla f_{k+1} - \nabla f_k) = -H_k \nabla f_k$ η οποία λόγω της αντιστρεψιμότητας του πίνακα H_k διασφαλίζει ότι $\nabla f_{k+1} = 0$ και άρα το σημείο x_{k+1} είναι η λύση. □

Η μέθοδος SR1 δίνεται με τον αλγόριθμο που ακολουθεί ([2], Αλγόριθμος 6.2, σελ. 146), στο πλαίσιο της μεθοδολογίας περιοχής εμπιστοσύνης - το οποίο μπορεί να εξυπηρετήσει μη θετικά ορισμένες προσεγγίσεις της μήτρας Hessian - και με μια συγκεκριμένη στρατηγική ανανέωσης της ακτίνας της περιοχής εμπιστοσύνης. Για να επιτευχθεί γρήγορος ρυθμός σύγκλισης είναι σημαντικό ο πίνακας B_k να ανανεώνεται ακόμη και κατά μήκος μιας αποτυχημένης κατεύθυνσης s_k η οποία απορρίπτεται από τον αλγόριθμο.

Αλγόριθμος 3.2 (ανανέωση SR1- περιοχή εμπιστοσύνης)

Given starting point x_0 , initial Hessian approximation B_0 , trust region radius Δ_0 , convergence tolerance $\varepsilon > 0$ and parameters $\eta \in (0, 10^{-3})$ and $\tau \in (0, 1)$.

$k=0$, While $\|\nabla f_k\| > \varepsilon$

Solve $\min_s \nabla f_k^T s + \frac{1}{2} s^T B_k s$, $\|s\| \leq \Delta_k$

Compute $y_k = \nabla f(x_k + s_k) - \nabla f(x_k)$

ared = $f(x_k) - f(x_k + s_k)$ πραγματική μείωση, pred = $-(\nabla f_k^T s_k + \frac{1}{2} s_k^T B_k s_k)$ προβλεπόμενη μείωση

if ared/pred > η : $x_{k+1} = x_k + s_k$

else: $x_{k+1} = x_k$

end(if)

if ared/pred > 0.75:

if $\|s_k\| \leq 0.8 \Delta_k$: $\Delta_{k+1} = \Delta_k$

else: $\Delta_{k+1} = 2\Delta_k$

end(if)

else if $0.1 \leq \text{ared}/\text{pred} \leq 0.75$: $\Delta_{k+1} = \Delta_k$

else: $\Delta_{k+1} = 0.5\Delta_k$

end(if)

if $|s_k^T (y_k - B_k s_k)| \geq \tau \|s_k\| \|y_k - B_k s_k\|$ compute B_{k+1}^{SR1} using (3.7) even if $x_{k+1} = x_k$.

else: $B_{k+1}^{SR1} = B_k$

end(if).

$k=k+1$

end (while)

3.2.1 Η ανανέωση DFP.

Η ανανέωση DFP προτεινόμενη αρχικά από τον Davidson και αναπτυγμένη αργότερα από τους Fletcher και Powell, είναι μια ανανέωση βαθμού 2 δηλαδή ο πίνακας H_{k+1} σχηματίζεται προσθέτοντας στον πίνακα H_k δύο συμμετρικούς πίνακες βαθμού 1. Η ανανέωση βαθμού 2 λαμβάνεται ως εξής:

$$H_{k+1} = H_k + a u u^T + b v v^T, \quad u, v \in \mathbb{R}^n.$$

Από την απαίτηση ικανοποίησης της συνθήκης Quasi-Newton (3.4) προκύπτει ότι $s_k = H_k y_k + a u u^T y_k + b v v^T y_k$ όπου τα διανύσματα u και v δεν ορίζονται πλέον μοναδικά. Μια προφανής επιλογή είναι να τεθεί $u = s_k$, $v = H_k y_k$ περίπτωση κατά την οποία τα a και b ορίζονται από τις σχέσεις $a u^T y_k = 1$ και $b v^T y_k = -1$. Η ανανέωση DFP του αντιστρόφου της προσέγγισης του πίνακα Hessian είναι:

$$H_{k+1}^{DFP} = H_k - \frac{H_k y_k y_k^T H_k}{y_k^T H_k y_k} + \frac{s_k s_k^T}{y_k^T s_k} \quad (3.12)$$

Η αντίστοιχη ανανέωση DFP σχετικά με τον πίνακα B_k λαμβάνεται από τον τύπο Sherman-Morrison-Woodbury και δίνεται από τη σχέση:

$$B_{k+1}^{DFP} = B_k + \left(1 + \frac{s_k^T B_k s_k}{y_k^T s_k} \right) \frac{y_k y_k^T}{y_k^T s_k} - \frac{y_k^T s_k^T B_k + B_k s_k y_k^T}{y_k^T s_k} \quad (3.13)$$

$$= (I - \gamma_k y_k s_k^T) B_k (I - \gamma_k s_k y_k^T) + \gamma_k y_k y_k^T, \quad \gamma_k = \frac{1}{y_k^T s_k} \quad (3.14)$$

Η μέθοδος αυτή έχει αποδειχθεί να λειτουργεί καλά στη πράξη και συνεπώς έχει χρησιμοποιηθεί ευρέως. Επιπλέον για τετραγωνικές συναρτήσεις έχει ένα αριθμό από σημαντικές ιδιότητες αλλά μόνο για την περίπτωση μιας ακριβούς αναζήτησης γραμμής, η οποίες εισάγονται με το θεώρημα που ακολουθεί.

Θεώρημα 3.2 ([3], Θεώρημα 5.1.7, σελ 215).

Έστω $f(x): \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ μια τετραγωνική συνάρτηση με θετικά ορισμένη μήτρα Hessian G . Αν εκτελεστεί μια ακριβής αναζήτηση γραμμής η ακολουθία $\{s_j\}$ παραγόμενη από την μέθοδο DFP ικανοποιεί τις ακόλουθες ιδιότητες:

- i. οι επαναλήψεις συγκλίνουν στη λύση το πολύ σε n - βήματα.
- ii. η συνθήκη Quasi-Newton ικανοποιείται για όλες τις προηγούμενες κατευθύνσεις, δηλαδή ισχύει:

$$H_{i+1} y_j = s_j, \quad j = 0, 1, \dots, i$$

□

Μία ακόμη σημαντική ιδιότητα της μεθόδου DFP η οποία αναφέρεται σε γενικές συναρτήσεις (οχι αποκλειστικά τετραγωνικές) είναι ότι διατηρεί τους πίνακες προσέγγισης της μήτρας Hessian θετικά ορισμένους έτσι που η κατεύθυνση p_{k+1} στην $k+1$ επανάληψη και η οποία δίνεται από τη σχέση $p_{k+1} = -H_{k+1} \nabla f_{k+1}$ θα είναι μια κατεύθυνση καθόδου. Συνεπώς οποτεδήποτε η μήτρα H_k είναι θετικά ορισμένη η μήτρα H_{k+1} θα είναι επίσης θετικά ορισμένη σύμφωνα με την ακόλουθη πρόταση.

Πρόταση 3.3

Αν $y_k^T s_k > 0 \quad \forall k$, η ανανέωση DFP διατηρεί τους πίνακες H_k θετικά ορισμένους.

Απόδειξη

Έστω ότι η συνθήκη καμπυλότητας (3.5) ικανοποιείται, δηλαδή $y_k^T s_k > 0$ έτσι που ο τύπος ανανέωσης (3.14) είναι καλά ορισμένος. Για κάθε διάνυσμα $z \neq 0$ και χρησιμοποιώντας τη σχέση (3.14), έπεται ότι:

$$z^T B_{k+1}^{DFP} z = \omega^T B_k^{DFP} \omega + \gamma_k (z^T y_k)^2 \quad (3.15)$$

όπου $\omega = z - \gamma_k s_k (y_k^T z)$. Το δεξί μέρος της (3.15) μπορεί να είναι μηδέν μόνο όταν $z^T y_k = 0$ αλλά στη περίπτωση αυτή ισχύει ότι $\omega = z \neq 0$ το οποίο διασφαλίζει ότι $z^T H_{k+1} z > 0$.

□

Η συνθήκη $y_k^T s_k > 0$ μπορεί πάντα να επιτευχθεί. Για μια τετραγωνική συνάρτηση και μέσω της (3.10) προκύπτει ότι $s_k^T y_k = s_k^T G s_k > 0$ αφού η μήτρα G είναι θετικά ορισμένη. Για μια γενική συνάρτηση $y_k^T s_k = \nabla f_{k+1}^T s_k - \nabla f_k^T s_k$. Τότε από την ιδιότητα καθόδου ισχύει $\nabla f_k^T s_k < 0$ και αν πραγματοποιείται μια ακριβής αναζήτηση γραμμής τότε $\nabla f_{k+1}^T s_k = 0$ και προκύπτει πάλι ότι $y_k^T s_k > 0$. Τέλος, ακόμη και για προσεγγιστικές αναζητήσεις γραμμής εφόσον επιβάλλεται η συνθήκη Wolfe (1.15) ή η ισχυρή συνθήκη Wolfe (1.16β), διαπιστώνεται από τους ορισμούς των s_k και y_k αλλά και από την (1.15) ότι $\nabla f_{k+1}^T s_k \geq c_2 \nabla f_k^T s_k \Rightarrow y_k^T s_k \geq (c_2 - 1) a_k \nabla f_k^T p_k$. Συνεπώς, αφού $c_2 < 1$ και αφού το p_k είναι μια κατεύθυνση καθόδου προκύπτει ότι $y_k^T s_k > 0$.

3.3 Η ανανέωση BFGS.

Ένα ακόμη σημαντικός τύπος προτεινόμενος από τους Boyden, Fletcher, Goldfarb και Shanno, είναι γνωστός ως τύπος BFGS και θεωρείται ότι είναι ο πιο αποτελεσματικός από όλους τους τύπους προσέγγισης Quasi-Newton. Η ανανέωση BFGS λαμβάνεται από την ανανέωση DFP (3.12) σε σχέση με τον πίνακα H_k και κάνοντας τις ανταλλαγές $H_{k+1} \leftrightarrow B_{k+1}$ και $s_k \leftrightarrow y_k$:

$$B_{k+1}^{BFGS} = B_k + \frac{y_k y_k^T}{y_k^T s_k} - \frac{B_k s_k s_k^T B_k}{s_k^T B_k s_k} \quad (3.16)$$

Ο αντίστροφος του πίνακα B_{k+1}^{BFGS} ο οποίος επιτρέπει τον υπολογισμό της κατεύθυνσης έρευνας μέσω απλού πολλαπλασιασμού πίνακα-διανύσματος βρίσκεται από τον τύπο Sherman-Morrison-Woodbury (παράρτημα Π.8) και δίνεται από τη σχέση:

$$H_{k+1}^{BFGS} = H_k + \left(1 + \frac{y_k^T H_k y_k}{s_k^T y_k} \right) - \frac{s_k s_k^T}{s_k^T y_k} - \frac{s_k y_k^T H_k - H_k y_k s_k^T}{s_k^T y_k} \quad (3.17)$$

$$= (I - \rho_k s_k y_k^T) H_k (I - \rho_k y_k s_k^T) + \rho_k s_k s_k^T, \quad \rho_k = \frac{1}{y_k^T s_k} \quad (3.18)$$

Η ανανέωση BFGS έχει όλες τις καλές ιδιότητες της ανανέωσης DFP και επιπρόσθετα όταν εκτελείται μια μη ακριβής αναζήτηση γραμμής (όπως συμβαίνει σε πρακτικές εφαρμογές προβλημάτων βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς), παρουσιάζει γενική σύγκλιση σε αντίθεση με την ανανέωση DFP όπου η ιδιότητα αυτή αποτελεί μέχρι και σήμερα ένα ανοικτό για έρευνα πρόβλημα. Επιπλέον ο ρυθμός σύγκλισης τέτοιων αλγόριθμων είναι υπεργραμμικός.

Η απόδοση της μεθόδου BFGS μπορεί να αποκλίνει αν η αναζήτηση γραμμής δεν βασίζεται στη συνθήκη Wolfe. Για παράδειγμα σε περιπτώσεις αναζήτησης γραμμής με αντιστροφή θέσης (Backtracking) όπου δοκιμάζεται πρώτα το μοναδιαίο μήκος βήματος $a_k=1$ και στη συνέχεια μειώνεται επανηληπτικά έως ότου να ικανοποιηθεί μια συνθήκη επαρκούς μείωσης, δεν είναι εγγυημένο ότι η συνθήκη $y_k^T s_k > 0$ θα εξασφαλιστεί από το επιλεγμένο βήμα, αφού ίσως απαιτείται κάποιο μήκος βήματος μεγαλύτερο του ένα.

Σε τέτοιες περιπτώσεις η στρατηγική (η οποία χρησιμοποιείται σε κάποιες εφαρμογές) του να παραλείπεται η ανανέωση BFGS και να τείθεται $H_{k+1}=H_k$ όταν $y_k^T s_k < 0$ ή όταν $y_k^T s_k \approx 0$ δεν συνιστάται, λόγω του ότι είναι πιθανό οι ανανεώσεις να παραλείπονται αρκετά συχνά. Μια πιο δραστική στρατηγική είναι η αποκαλούμενη ανανέωση *damped BFGS* και η οποία παρουσιάζεται στο κεφάλαιο 4.

3.4 Σύγκλιση των μεθόδων Quasi-Newton. BFGS.

3.4.1 Σύγκλιση της μεθόδου BFGS.

A. Γενική σύγκλιση.

Για την γενική σύγκλιση της μεθόδου BFGS γίνονται οι ακόλουθες υποθέσεις:

- I. η $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ είναι δύο φορές συνεχώς παραγωγίσιμη σε ένα κυρτό σύνολο D.

II. η $f:\mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ είναι ομοιόμορφα κυρτή δηλαδή υπάρχουν θετικές σταθερές m και M τέτοιες ώστε $\forall x \in D \supset \Omega = \{x \in \mathbb{R}^n : f(x) \leq f(x_0)\}$ ισχύει:

$$m \|u\|^2 \leq u^T \nabla^2 f(x) u \leq M \|u\|^2 \quad \forall u \in \mathbb{R}^n, x \in \Omega \quad (3.19)$$

Η υπόθεση II εξασφαλίζει το ότι η μήτρα $\nabla^2 f(x)$ είναι θετικά ορισμένη στο Ω και η f έχει μοναδικό ελάχιστο στο σημείο x^* του Ω .

Θεώρημα 3.4 ([2], Θεώρημα 6.5, σελ. 154).

Έστω B_0 ένας οποιοσδήποτε συμμετρικός και θετικά ορισμένος αρχικός πίνακας, x_0 ένα αρχικό σημείο για το οποίο ικανοποιούνται οι υποθέσεις I και II. Τότε η ακολουθία $\{x_k\}$ που παράγεται από τη μέθοδο BFGS στα πλαίσια μιας μη ακριβούς αναζήτησης γραμμής έτσι ώστε να ικανοποιείται η συνθήκη Wolfe, συγκλίνει στο σημείο ελαχίστου x^* της f .

Απόδειξη

Πρέπει αποδειχθεί ότι $x_k \rightarrow x^*$ και δεδομένου ότι το πρόβλημα είναι κυρτό πρέπει να αποδειχθεί ότι $\lim_{k \rightarrow \infty} \|\nabla f_k\| = 0$. Λόγω του θεωρήματος του Zoutendijk αποδεικνύεται ότι $\sum_{k=0}^{\infty} \cos^2 \theta_k \|\nabla f_k\|^2 < \infty$. Η εν' λόγω συνθήκη υποδηλώνει ότι $\cos^2 \theta_k \|\nabla f_k\|^2 \rightarrow 0$ και συνεπώς αν η μέθοδος επιλογής της κατεύθυνσης έρευνας p_k διασφαλίζει ότι η γωνία θ_k είναι φραγμένη μακριά από τις 90° , υπάρχει ένα $\delta > 0$ τέτοιο ώστε $\cos \theta_k \geq \delta > 0, \forall k$ και γι' αυτό $\lim_{k \rightarrow \infty} \|\nabla f_k\| = 0$. Ωστόσο, αρκεί να αποδειχθεί το ασθενέστερο αποτέλεσμα $\liminf_{k \rightarrow \infty} \|\nabla f_k\| = 0$ ότι δηλαδή απλώς μια υπακολουθία $\{\nabla f_{k_j}\}$ συγκλίνει στο 0 και όχι ολόκληρη η ακολουθία. Για τον σκοπό αυτό αρκεί να αποδειχθεί ότι μια υπακολουθία $\{\cos \theta_{k_j}\}$ είναι φραγμένη μακριά από το μηδέν.

Το βήμα Quasi – Newton είναι:

$$s_k = -a_k B_k^{-1} \nabla f_k = -a_k p_k \quad (3.20)$$

Η γωνία μεταξύ της κατεύθυνσης απότομης καθόδου $-\nabla f_k$ και της κατεύθυνσης έρευνας p_k είναι:

$$\cos \theta_k = \frac{-\nabla f_k^T p_k}{\|\nabla f_k\| \|p_k\|} \stackrel{(3.20)}{=} \frac{s_k^T B_k s_k}{\|s_k\| \|B_k s_k\|},$$

συνεπώς είναι η γωνία μεταξύ των s_k και $B_k s_k$.

Δεδομένου του τύπου BFGS (3.16) ορίζεται η ακόλουθη συνάρτηση του πίνακα B:

$$\psi(B) = \text{trace}(B) - \ln(\det(B)) \quad (3.21)$$

Όμως $\text{trace}(B) = \sum_{i=1}^n \lambda_i$ και $\det(B) = \prod_{i=1}^n \lambda_i$, $0 < \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n$ και άρα:

$$\psi(B) = \sum_{i=1}^n \lambda_i - \ln \left(\prod_{i=1}^n \lambda_i \right) = \sum_{i=1}^n \lambda_i - \sum_{i=1}^n \ln(\lambda_i) = \sum_{i=1}^n (\lambda_i - \ln(\lambda_i)) \quad (3.22)$$

Δείχνεται ότι $\psi(B) > 0$ ως ακολούθως:

Θεωρείται η συνάρτηση:

$$f(\lambda) = \lambda - \ln(\lambda) \quad (3.23)$$

με $\lambda > 0$ και $\ln(\lambda) = \int_1^\lambda \frac{1}{t} dt$. Η συνάρτηση $\frac{1}{t}$ είναι συνεχής στο $[1, \lambda]$ και από το θεώρημα μέσης τιμής

$\exists c \in (1, \lambda)$ τέτοιο ώστε: $\int_1^\lambda \frac{1}{t} dt = \frac{1}{c}(\lambda - 1)$ δηλαδή $\ln(\lambda) = \frac{1}{c}(\lambda - 1)$.

Για να αποδειχθεί ότι $f(\lambda) > 0$ αποδεικνύεται ότι $\frac{1}{c}(\lambda - 1) < \lambda$, $\forall \lambda > 0$, $c \in (1, \lambda)$ ως εξής:

i. $0 < \lambda < c < 1$: $1 < \frac{1}{c} < \frac{1}{\lambda} \rightarrow \frac{1}{c}(\lambda - 1) < (\lambda - 1) \Rightarrow \ln(\lambda) < \lambda - 1 \Rightarrow \ln(\lambda) < \lambda$

ii. $1 < c < \lambda$: $\frac{1}{\lambda} < \frac{1}{c} < 1 \Rightarrow \frac{1}{c}(\lambda - 1) < (\lambda - 1) \Rightarrow \ln(\lambda) < \lambda - 1 \Rightarrow \ln(\lambda) < \lambda$.

Επομένως $f(\lambda) = \lambda - \ln(\lambda) > 0$, $\forall \lambda$ και γι' αυτό $\psi(B) > 0$.

Στη συνέχεια κατασκευάζεται η συνάρτηση:

$$\psi(B_{k+1}) = \text{trace}(B_{k+1}) - \ln(\det(B_{k+1})) \quad (3.24)$$

Για τον σκοπό αυτό υπολογίζονται τα μεγέθη $\text{trace}(B_{k+1})$ και $\det(B_{k+1})$.

Από τις ιδιότητες του ίχνους (trace) και χρησιμοποιώντας τον τύπο BFGS (3.16) προκύπτει ότι:

$$\text{trace}(B_{k+1}) = \text{trace}(B_k) - \frac{1}{s_k^T B_k s_k} \text{trace}(B_k s_k s_k^T B_k) + \frac{1}{y_k^T s_k} \text{trace}(y_k y_k^T).$$

Όμως $\text{trace}(y_k y_k^T) = y^1 + y^2 + \dots + y^n = \|y_k\|^2$ και $\text{trace}(B_k s_k s_k^T B_k) \stackrel{B=B^T}{=} \text{trace}(B_k s_k (B_k s_k)^T) = \|B_k s_k\|^2$

Συνεπώς:

$$\text{trace}(B_{k+1}) = \text{trace}(B_k) - \frac{\|B_k s_k\|^2}{s_k^T B_k s_k} + \frac{\|y_k\|^2}{y_k^T s_k} \quad (3.25)$$

Για την εύρεση του $\det(B_{k+1})$ ο τύπος ανανέωσης BFGS (3.16) γράφεται ως εξής:

$$B_{k+1} = B_k \left(I - \frac{s_k s_k^T B_k}{s_k^T B_k s_k} + \frac{B_k^{-1} y_k y_k^T}{y_k^T s_k} \right)$$

έτσι που:

$$\det(B_{k+1}) = \det(B_k) \det \left(I - \frac{s_k s_k^T B_k}{s_k^T B_k s_k} + \frac{B_k^{-1} y_k y_k^T}{y_k^T s_k} \right)$$

και χρησιμοποιώντας την ιδιότητα $B = B^T$ λαμβάνεται:

$$\begin{aligned} \det(B_{k+1}) &= \det(B_k) \det \left(I - \frac{B_k s_k s_k^T}{s_k^T B_k s_k} + \frac{B_k^{-1} y_k y_k^T}{y_k^T s_k} \right) \\ &= \det(B_k) \det(I + u s_k^T + v y_k^T) \end{aligned} \quad (3.26)$$

Επομένως:

$$\det(I + u s_k^T + v y_k^T) = \det(I + u s_k^T) \det[I + (I + u s_k^T)^{-1} v y_k^T] \quad (3.27)$$

Υποθέτοντας ότι $u \neq 0$ μπορούν να βρεθούν διανύσματα w_1, \dots, w_{n-1} τέτοια ώστε ο πίνακας $Q = [u, w_1, \dots, w_{n-1}]$ είναι αντιστρέψιμος και $u = Qe_1$, $e_1 = (1, 0, \dots, 0)^T$. Αν οριστεί $s_k^T Q = (z_1, \dots, z_n)$ έπεται ότι $z_1 = s_k^T Q e_1 = s_k^T Q (Q^{-1}u) = s_k^T u$. Επομένως:

$$\det(I + us_k^T) = \det(Q^{-1}(I + us_k^T)Q) = \det(I + e_1 s_k^T Q) = \det(I + s_k^T u) = 1 + s_k^T u \quad (3.28)$$

$$\begin{aligned} \det\left(I + (I + us_k^T)^{-1} v y_k^T\right) &= \det\left(I + v^T \left(1 - \frac{us_k^T}{I + us_k^T}\right) y_k\right) \\ &= \det\left(\frac{1}{I + us_k^T}\right) \det\left((I + s_k^T u)(I + y_k^T v) - (u^T y_k)(s_k^T v)\right) \\ &= \det\left(\frac{1}{I + us_k^T}\right) \det\left(\frac{y_k^T s_k}{s_k^T B_k s_k}\right) \end{aligned} \quad (3.29)$$

Άρα από την (3.26) μαζί με την (3.28) και την (3.29) προκύπτει:

$$\det(B_{k+1}) = \det(B_k) \frac{y_k^T s_k}{s_k^T B_k s_k} \quad (3.30)$$

και από την (3.24) μαζί με την (3.25) και την (3.30) προκύπτει:

$$\begin{aligned} \psi(B_{k+1}) &= \text{trace}(B_k) - \frac{\|B_k s_k\|^2}{s_k^T B_k s_k} + \frac{\|y_k\|^2}{y_k^T s_k} - \ln(\det(B_k)) - \ln\left(\frac{y_k^T s_k}{s_k^T B_k s_k}\right) \\ &\stackrel{(3.21)}{=} \psi(B_k) - \frac{\|B_k s_k\|^2}{s_k^T B_k s_k} + \frac{\|y_k\|^2}{y_k^T s_k} - \ln\left(\frac{y_k^T s_k}{s_k^T B_k s_k}\right) \end{aligned} \quad (3.31)$$

Ορίζεται η σταθερά $M_k = \frac{\|y_k\|^2}{y_k^T s_k} = \frac{y_k^T y_k}{y_k^T s_k}$.

Επίσης $\frac{\|B_k s_k\|^2}{s_k^T B_k s_k} = \frac{\|B_k s_k\|^2 s_k^T B_k s_k \|s_k\|^2}{(s_k^T B_k s_k)^2 \|s_k\|^2} = \frac{s_k^T B_k s_k}{\cos^2 \theta_k \|s_k\|^2} = \frac{q_k}{\cos^2 \theta_k}$, $q_k = \frac{s_k^T B_k s_k}{s_k^T s_k}$

Ορίζεται επίσης η σταθερά $m_k = \frac{y_k^T s_k}{s_k^T s_k}$ έτσι που $\frac{y_k^T s_k}{y_k^T B_k s_k} = \frac{m_k}{q_k}$.

Άρα από την (3.31):

$$\begin{aligned} \psi(B_{k+1}) &= \psi(B_k) - \frac{q_k}{\cos^2 \theta_k} + M_k - \ln(m_k) + \ln(q_k) \\ &= \psi(B_k) + (M_k - \ln(m_k) - 1) + \left(1 - \frac{q_k}{\cos^2 \theta_k} + \ln \frac{q_k}{\cos^2 \theta_k}\right) + \ln(\cos^2 \theta_k) \end{aligned}$$

Δεδομένου τώρα ότι $\ln \leq t - 1$, $\forall t > 0$ συνεπάγεται ότι $\left(1 - \frac{q_k}{\cos^2 \theta_k} + \ln \frac{q_k}{\cos^2 \theta_k}\right) \leq 0$.

Άρα $\psi(B_{k+1}) \leq \psi(B_k) + (M_k - \ln(m_k) - 1) + \ln(\cos^2 \theta_k)$ και αθρίζοντας τα δύο μέρη:

$$\psi(B_{k+1}) \leq \psi(B_1) + \sum_{j=1}^k (M_j - \ln(m_j) - 1) + \sum_{j=1}^k \ln(\cos^2 \theta_j) \quad (3.32)$$

Από το θεώρημα Taylor $y_k = \bar{G}_k a_k p_k = \bar{G}_k s_k$ όπου $\bar{G}_k = \int_0^1 \nabla^2 f(x_k + \tau a_k p_k) d\tau$.

Έπεται ότι $\frac{y_k^T s_k}{s_k^T s_k} = \frac{s_k^T \bar{G}_k s_k}{s_k^T s_k}$ και αφού η μήτρα \bar{G}_k είναι θετικά ορισμένη προκύπτει από την υπόθεση

(II) ότι $\frac{y_k^T s_k}{s_k^T s_k} \stackrel{(3.19)}{\geq} m$ και συνεπώς $m_k \geq m$.

Επιπλέον: $\frac{\|y_k\|^2}{y_k^T s_k} = \frac{s_k^T \bar{G}^2 s_k}{s_k^T \bar{G} s_k}$ και θέτοντας $z_k = \bar{G}^{\frac{1}{2}} s_k$ (\bar{G}_k θετικά ορισμένη) προκύπτει:

$$\frac{\|y_k\|^2}{y_k^T y_k} = \frac{s_k^T \bar{G}^{-1/2} \bar{G} \bar{G}^{-1/2} s_k}{s_k^T \bar{G}^{-1/2} \bar{G}^{-1/2} s_k} = \frac{z_k^T \bar{G}_k z_k}{z_k^T z_k} \stackrel{(3.19)}{\leq} M \text{ και συνεπώς } M_k \leq m.$$

Άρα η (3.32) μπορεί να γραφτεί ως εξής:

$$0 < \psi(B_{k+1}) \leq \psi(B_1) + ck + \sum_{j=1}^k \ln(\cos^2 \theta_j) \quad (3.33)$$

όπου χωρίς βλάβη της γενικότητας θεωρούμε ότι η σταθερά $c = M - \ln(m) - 1$ είναι θετική.

Προχωρώντας με εις άτοπον απαγωγή θεωρούμε ότι $\cos \theta_j \rightarrow 0$. Τότε $\exists k_1 > 0$ τέτοιο ώστε $\forall j > k_1 \quad \ln(\cos^2 \theta_j) < -2c$. Συνεπώς $\forall k > k_1$ έπεται από την (3.33) ότι:

$$\begin{aligned} 0 < \psi(B_1) + ck + \sum_{j=1}^{k_1} \ln(\cos^2 \theta_j) + \sum_{j=k_1+1}^k (-2c) \\ &= \psi(B_1) + ck + \sum_{j=1}^{k_1} \ln(\cos^2 \theta_j) + (-2c)(k - (k_1 + 1) + 1) \\ &= \psi(B_1) + \sum_{j=1}^{k_1} \ln(\cos^2 \theta_j) + 2ck_1 - ck \end{aligned}$$

Ωστόσο για μεγάλα k το δεξί μέρος της παραπάνω σχέσεις είναι αρνητικό οδηγώντας σε αντίθεση. Άρα, υπάρχει υπακολουθία δεικτών $\{j_k\}$ τέτοια ώστε $\{\cos \theta_{j_k}\} \geq \delta > 0$ και επομένως $\liminf \|\nabla f_k\| \rightarrow 0 \Rightarrow x_k \rightarrow x^*$.

□

B. Υπεργραμμική σύγκλιση.

Κάνοντας την ακόλουθη επιπρόσθετη υπόθεση ότι:

III. Η μήτρα Hessian $\nabla^2 f$ είναι Lipschitz συνεχής στο x^* δηλαδή υπάρχει μια γειτονιά $N(x^*, \varepsilon)$ του x^* τέτοια ώστε:

$$\|\nabla^2 f(x) - \nabla^2 f(x^*)\| \leq L \|x - x^*\|, \quad \forall x \in N(x^*, \varepsilon) \quad (3.34)$$

αποδεικνύεται η υπεργραμμική σύγκλιση της μεθόδου BFGS σύμφωνα με τα ακόλουθα δύο θεωρήματα, η οποία απευθύνεται σε γενικές μη γραμμικές – όχι μόνο κυρτές – συναρτήσεις κόστους.

Θεώρημα 3.5 ([2], Θεώρημα 6.6, σελ. 158).

Έστω η f είναι δύο φορές συνεχώς παραγωγίσιμη και οι επαναλήψεις που παράγονται από τον αλγόριθμο BFGS συγκλίνουν στο σημείο ελαχίστου x^* στο οποίο ικανοποιείται η υπόθεση III. Έστω

επίσης $\sum_{k=1}^{\infty} \|x_k - x^*\| < \infty$ δηλαδή η ακολουθία $\|x_k - x^*\|$ συγκλίνει στο μηδέν αρκετά γρήγορα. Τότε:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|[B_k - \nabla^2 f(x^*)]s_k\|}{\|s_k\|} = 0 \quad (3.35)$$

□

Θεώρημα 3.6 ([3], Θεώρημα 5.4.4, σελ. 244).

Έστω η $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ ικανοποιεί τις υποθέσεις I και II και έστω $\{B_k\}$ μια ακολουθία συμμετρικών και θετικά ορισμένων πινάκων. Για δεδομένο $x_0 \in D$, αν η ακολουθία $\{x_k\}$ των επαναλήψεων $x_{k+1} = x_k - a_k B_k^{-1} \nabla f_k$ όπου το μήκος βήματος a_k ορίζεται από τον κανόνα Wolfe παραμένει στο D και

$$x_k \neq x^*, \forall k \geq 0 \text{ και αν } x_k \rightarrow x^* \text{ τότε όταν: } \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|[B_k - \nabla^2 f(x^*)]s_k\|}{\|s_k\|} = 0$$

- i. το μήκος βήματος είναι $a_k = 1 \quad \forall k$ μεγαλύτερο από κάποιο προκαθορισμένο k_o .
- ii. αν $a_k = 1, \forall k > k_o$ η ακολουθία $\{x_k\}$ συγκλίνει στο x^* υπεργραμμικά.

Απόδειξη

Αποδεικνύεται αρχικά ότι για αρκετά μεγάλο k οι συνθήκες Wolfe-Powell ικανοποιούνται για $a_k = 1$ δηλαδή ισχύουν:

$$f(x_k - B_k^{-1} \nabla f_k) \leq f(x_k) - c_1 \nabla f_k^T B_k^{-1} \nabla f_k \quad (3.36)$$

$$\nabla f(x_k - B_k^{-1} \nabla f_k)^T B_k^{-1} \nabla f_k \leq c_2 \nabla f_k^T B_k^{-1} \nabla f_k \quad (3.37)$$

όπου $c_1 < \frac{1}{2}, 0 < c_1 < c_2 < 1$.

Από την (3.35) και έχοντας $s_k = -B_k^{-1} a_k \nabla f_k$ προκύπτει:

$$\begin{aligned} \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|[B_k - \nabla^2 f(x^*)]B_k^{-1}(-a_k) \nabla f_k\|}{\|B_k^{-1}(-a_k) \nabla f_k\|} = 0 &\Rightarrow \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|\nabla f_k - \nabla^2 f(x^*) B_k^{-1} \nabla f_k\|}{\|B_k^{-1} \nabla f_k\|} = 0 \Rightarrow \\ &\Rightarrow \|\nabla f_k - \nabla^2 f(x^*) B_k^{-1} \nabla f_k\| = o(\|B_k^{-1} \nabla f_k\|) \Rightarrow \\ &\Rightarrow (B_k^{-1} \nabla f_k)^T \nabla f_k = (B_k^{-1} \nabla f_k)^T \nabla^2 f(x^*) B_k^{-1} \nabla f_k + o(\|B_k^{-1} \nabla f_k\|^2) \end{aligned}$$

Αλλά για μεγάλα $k: x_k \rightarrow x^*$ έτσι που:

$$\nabla f_k^T B_k^{-1} \nabla f_k = (B_k^{-1} \nabla f_k)^T \nabla^2 f_k B_k^{-1} \nabla f_k + o(\|B_k^{-1} \nabla f_k\|^2)$$

Από το θεώρημα Taylor:

$$f(x_k - B_k^{-1} \nabla f_k) - f(x_k) = -\nabla f_k^T B_k^{-1} \nabla f_k + \frac{1}{2} (B_k^{-1} \nabla f_k)^T \nabla^2 f_k B_k^{-1} \nabla f_k + o(\|B_k^{-1} \nabla f_k\|^2) \quad (3.38)$$

και λαμβάνοντας υπόψη την (3.38) προκύπτει:

$$\begin{aligned} f(x_k - B_k^{-1} \nabla f_k) - f(x_k) &= -\frac{1}{2} \nabla f_k^T B_k^{-1} \nabla f_k + o(\|B_k^{-1} \nabla f_k\|^2) \\ &\leq -c_1 \nabla f_k^T B_k^{-1} \nabla f_k, \quad c_1 < \frac{1}{2} \end{aligned}$$

Επομένως η συνθήκη (3.36) ικανοποιείται.

Από το θεώρημα Taylor:

$$\nabla f(x_k + p_k) = \nabla f(x_k) + \int_0^1 \nabla^2 f(x_k + tp_k) p_k dt \quad (3.39)$$

Για x_{k+1}, x_k και $x^* \in D$ και $p_k = x_{k+1} - x_k$ έπεται ότι:

$$\begin{aligned} \|\nabla f_{k+1} - \nabla f_k - \nabla^2 f(x^*) p_k\| &\stackrel{(3.39)}{=} \left\| \int_0^1 [\nabla^2 f(x_k + tp_k) - \nabla^2 f(x^*)] p_k dt \right\| \\ &\leq \int_0^1 \|\nabla^2 f(x_k + tp_k) - \nabla^2 f(x^*)\| \|p_k\| dt \\ &\leq \sup_{0 \leq t \leq 1} \{\|\nabla^2 f(x_k + tp_k) - \nabla^2 f(x^*)\|\} \|p_k\| \end{aligned}$$

και αφού $x_k \rightarrow x^*$ και εξαιτίας της συνέχειας της μήτρας $\nabla^2 f(x)$ προκύπτει ότι:

$$\|\nabla f_{k+1} - \nabla f_k - \nabla^2 f(x^*) p_k\| = o(\|p_k\|)$$

Η προηγούμενη σχέση υποδηλώνει ότι: $\nabla f_{k+1}^T p_k - \nabla f_k^T p_k - p_k^T \nabla^2 f(x^*) p_k = o(\|p_k\|^2)$
Ξαναγράφοντας την (3.38) ως: $-\nabla f_k^T p_k = p_k^T \nabla^2 f(x^*) p_k + o(\|p_k\|^2)$ όπου $x_k \rightarrow x^*$, προκύπτει από τις δύο τελευταίες εξισώσεις ότι: $\nabla f_{k+1}^T p_k = o(\|p_k\|^2) \leq c^2 \nabla f_k^T p_k$ και άρα η (3.37) ικανοποιείται. Έπεται ότι οι (3.36) και (3.37) ισχύουν και άρα $a_k = 1$ για k αρκετά μεγάλο $k > k_0$.

Έστω ότι $\{a_k\} \rightarrow 1$ και η (3.35) ισχύει. Τότε ισχύει επίσης:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|[a_k^{-1} B_k - \nabla^2 f(x^*)] s_k\|}{\|s_k\|} = 0.$$

Λαμβάνοντας υπόψη ότι $s_k = a_k p_k$ και $p_k = -B_k^{-1} \nabla f_k$ προκύπτει:

$$\begin{aligned} [a_k^{-1} B_k - \nabla^2 f(x^*)] s_k &= -\nabla f_k - \nabla^2 f(x^*) s_k = [\nabla f_{k+1} - \nabla f_k - \nabla^2 f(x^*) s_k] - \nabla f_{k+1} \Rightarrow \\ \Rightarrow \|\nabla f_{k+1}\| &\leq \|[a_k^{-1} B_k - \nabla^2 f(x^*)] s_k\| + \|\nabla f_{k+1} - \nabla f_k - \nabla^2 f(x^*) s_k\| \end{aligned} \quad (3.40)$$

Όμως

$$\begin{aligned} \|\nabla f_{k+1} - \nabla f_k - \nabla^2 f(x^*) s_k\| &\leq \int_0^1 \|\nabla^2 f(x_k + ts_k) - \nabla^2 f(x^*)\| \|s_k\| dt \\ &\stackrel{(3.34)}{\leq} L \int_0^1 \|x_k + ts_k - x^*\| \|s_k\| dt \\ &\leq L \sup_{0 \leq t \leq 1} \|x_k + t(x_{k+1} - x_k) - x^*\| \|s_k\| \end{aligned}$$

Επομένως:

$$\frac{\|\nabla f_{k+1} - \nabla f_k - \nabla^2 f(x^*) s_k\|}{\|s_k\|} \leq L \max \{\|x_k - x^*\|, \|x_{k+1} - x^*\|\} \quad (3.41)$$

Από την (3.40) και το γεγονός ότι $x_k \xrightarrow{k \rightarrow \infty} x^*$ έπεται:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|\nabla f_{k+1}\|}{\|s_k\|} \leq \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|[a_k^{-1} B_k - \nabla^2 f(x^*)] s_k\|}{\|s_k\|} + \lim_{k \rightarrow \infty} \{L \max \{\|x_k - x^*\|, \|x_{k+1} - x^*\|\}\} = 0 \quad (3.42)$$

Επίσης:

$$\begin{aligned}
\|\nabla f_{k+1}\| &= \|\nabla f_{k+1} - \nabla f(x^*)\| = \|\nabla^2 f(x^*)(x_{k+1} - x^*) + \nabla f_{k+1} - \nabla^2 f(x^*)(x_{k+1} - x^*)\| \\
&\geq \|\nabla^2 f(x^*)(x_{k+1} - x^*)\| - \|\nabla f_{k+1} - \nabla^2 f(x^*)(x_{k+1} - x^*)\| \\
&\stackrel{(3.41)}{\geq} \left\{ \frac{1}{\|\nabla^2 f(x^*)^{-1}\|} - L \max\{\|0\|, \|x_{k+1} - x^*\|\} \right\} \|x_{k+1} - x^*\| \\
&= \beta \|x_{k+1} - x^*\|
\end{aligned}$$

και προκύπτει:

$$\frac{\|\nabla f_{k+1}\|}{\|s_k\|} \geq \frac{\beta \|x_{k+1} - x^*\|}{\|x_{k+1} - x^*\| + \|x_k - x^*\|} = \beta \frac{\tau_k}{\tau_{k+1}}, \quad \tau_k = \frac{\|x_{k+1} - x^*\|}{\|x_k - x^*\|} \quad (3.43)$$

Από τις (3.42) και (3.43) έπεται ότι $\frac{\tau_k}{1+\tau_k} \rightarrow 0 \Rightarrow \lim_{k \rightarrow \infty} \tau_k = 0 \Rightarrow \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|x_{k+1} - x^*\|}{\|x_k - x^*\|} = 0$ και άρα η $\{x_k\}$

συγκλίνει στο x^* υπεργραμμικά.

□

3.4.2 Σύγκλιση της μεθόδου SR1.

Για την μέθοδο SR1 δεν υπάρχει κάποιο αποτέλεσμα αναφορικά με τη γενική σύγκλιση αυτής όπως το θεώρημα (3.4) ή κάποιο αποτέλεσμα τοπικής υπεργραμμικής σύγκλισης όπως το θεώρημα (3.6) τα οποία ίσχυαν στη μεθόδου BFGS, εκτός των αποτελεσμάτων εκείνων της περίπτωσης τετραγωνικών συναρτήσεων. Ωστόσο για τον αλγόριθμο στα πλαίσια της μεθόδου της περιοχής εμπιστοσύνης ένα ενδιαφέρον αποτέλεσμα είναι αυτό το οποίο εκφράζεται με το ακόλουθο θεώρημα.

Θεώρημα 3.6 ([15], Θεώρημα 2.7, σελ.1034).

Έστω η ακολουθία επαναλήψεων $\{x_k\}$ παράγεται από τον αλγόριθμο περιοχής εμπιστοσύνης και την ανανέωση SR1 και έστω επίσης ότι ισχύουν οι ακόλουθες συνθήκες.

- I. Η ακολουθία $\{x_k\}$ δεν τερματίζει και παραμένει σε ένα κλειστό κα φραγμένο κυρτό σύνολο D στο οποίο η f είναι δύο φορές συνεχώς διαφορίσιμη και έχει μοναδικό στάσιμο σημείο το x^* .
- II. Η μήτρα Hessian $\nabla^2 f(x^*)$ είναι θετικά ορισμένη και Lipschitz συνεχής σε μια γειτονιά του x^* .
- III. Η ακολουθία των πινάκων $\{B_k\}$ είναι φραγμένη ως προς την νόρμα.
- IV. Η ανανέωση SR1 δεν παραλείπεται ποτέ, δηλαδή η συνθήκη (3.8) ισχύει σε κάθε επανάληψη.

Τότε $\lim_{k \rightarrow \infty} x_k \rightarrow x^*$ και $\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|x_{k+n+1} - x^*\|}{\|x_k - x^*\|} = 0$ δηλαδή οι επαναλήψεις συγκλίνουν στο x^* με

υπεργραμμικό λόγο $(n+1)$ βημάτων.

□

Κεφάλαιο 4

Επαναληπτικός τετραγωνικός προγραμματισμός.

Ο επαναληπτικός τετραγωνικός προγραμματισμός (sequential quadratic programming-SQP) αποτελεί μια από τις πιο αποτελεσματικές μεθόδους επίλυσης μη γραμμικών προβλημάτων βελτιστοποίησης με περιορισμούς, η οποία παράγει μια ακολουθία βημάτων μέσω της επίλυσης υποπροβλημάτων τετραγωνικού προγραμματισμού, στα πλαίσια τόσο της μεθοδολογίας αναζήτησης γραμμής (line search method) όσο και της μεθοδολογίας περιοχής εμπιστοσύνης (trust-region method). Η μέθοδος αυτή είναι κατάλληλη για την επίλυση μικρών αλλά και μεγάλων προβλημάτων με σημαντικές μη γραμμικότητες στους περιορισμούς, εμφανίζοντας ουσιαστικά αποτελέσματα.

Υπάρχουν δύο ειδών μέθοδοι επαναληπτικού τετραγωνικού προγραμματισμού, οι μέθοδοι ανισωτικού τετραγωνικού προγραμματισμού και οι μέθοδοι ισωτικού τετραγωνικού προγραμματισμού. Κατά την πρώτη προσέγγιση ένα τετραγωνικό πρόβλημα με ανισωτικούς περιορισμούς επιλύεται σε κάθε επανάληψη με σκοπό τόσο τον υπολογισμό της κατεύθυνσης όσο και μιας εκτίμησης του βέλτιστου ενεργού συνόλου. Κατά την δεύτερη προσέγγιση, η οποία είναι πιο διαδεδομένη στην πράξη και περιγράφεται πιο κάτω, οι υπολογισμοί αυτοί διαχωρίζονται παράγοντας αρχικά μια εκτίμηση του βέλτιστου ενεργού συνόλου και εν συνεχεία της κατεύθυνση έρευνας μέσω της επίλυσης ενός τετραγωνικού προβλήματος με ισωτικούς περιορισμούς.

4.1 Εισαγωγή.

Ξεκινώντας με το πρόβλημα ελαχίστου πεπερασμένων διαστάσεων με ισωτικούς περιορισμούς:

$$\min f(x) , \quad c_i(x)=0 \quad , \quad i \in \mathcal{E} = \{1, \dots, m_e\} \quad (4.1)$$

όπου $f(x): \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ και $c_i: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ είναι συνεχώς διαφορίσιμες τουλάχιστον μία φορά, η κεντρική ιδέα της μεθόδου SQP είναι η μοντελοποίηση στο τρέχων βήμα x_k του προβλήματος (4.1) μέσω ενός υποπροβλήματος τετραγωνικού προγραμματισμού το οποίο να αποφέρει μια καλή κατεύθυνση έρευνας για το μη γραμμικό πρόβλημα και εν συνεχεία η χρησιμοποίηση του σημείου ελαχίστου του τετραγωνικού υποπροβλήματος για τον προσδιορισμό της νέας επανάληψης x_{k+1} .

Η μέθοδος SQP μπορεί να θεωρηθεί ως η εφαρμογή της μεθόδου Newton στις συνθήκες Karush-Kuhn-Tucker (KKT) του προβλήματος (4.1) ως εξής:

Η Λαγκρανζιανή συνάρτηση του προβλήματος είναι $\mathcal{L}(x, \lambda) = f(x) - \lambda^T c(x)$ και έστω η $m_e \times n$

Ιακωβιανή μήτρα των περιορισμών συμβολίζεται με $A(x)$ δηλαδή $A(x)^T = [\nabla c_1(x), \nabla c_2(x), \dots, \nabla c_{m_e}(x)]$

όπου $c_i(x)$ είναι η i -στή συνιστώσα του διανύσματος των περιορισμών $c(x)$.

Οι συνθήκες KKT πρώτης τάξης του προβλήματος (4.1) μπορούν να διατυπωθούν μέσω ενός συστήματος $n+m$ αγνώστων x και λ ως εξής:

$$F(x, \lambda) = \begin{pmatrix} \nabla f(x) - A(x)^T \lambda \\ c(x) \end{pmatrix} = 0 \quad (4.2)$$

Οποιαδήποτε λύση (x^*, λ^*) του προβλήματος ελαχίστου με ισωτικούς περιορισμούς (4.1) για την οποία ο $m_e \times n$ πίνακας $A(x^*)$ έχει πλήρη βαθμό ικανοποιεί το σύστημα των μη γραμμικών εξισώσεων (4.2) το οποίο μπορεί να επιλυθεί με τη μέθοδο Newton. Για το σκοπό αυτό η Ιακωβιανή του συστήματος (4.2) αναφορικά με τα x και λ είναι:

$$F'(x, \lambda) = \begin{pmatrix} \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x, \lambda) & -A(x)^T \\ A(x) & 0 \end{pmatrix} \quad (4.3)$$

Η μετατόπιση Newton από το τρέχων σημείο (x_k, λ_k) δίνεται ως εξής:

$$\begin{pmatrix} x_{k+1} \\ \lambda_{k+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_k \\ \lambda_k \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} p_k \\ p_\lambda \end{pmatrix} \quad (4.4)$$

όπου, p_k και p_λ επιλύουν το ακόλουθο σύστημα Newton-KKT:

$$\begin{pmatrix} \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k & -A_k^T \\ A_k & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_k \\ p_\lambda \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\nabla f_k + A_k^T \lambda_k \\ -c_k \end{pmatrix} \quad (4.5)$$

όπου $\nabla f_k = \nabla f(x_k)$, $c_k = c(x_k)$, $A_k = A(x_k)$ και $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k = \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x_k)$.

Αποδεικνύεται στο Λήμμα 4.1 ότι η επανάληψη Newton είναι καλώς ορισμένη αν ισχύουν οι ακόλουθες υποθέσεις στο σημείο $(x, \lambda) = (x_k, \lambda_k)$.

Υποθέσεις 4.1

α. Στο σημείο (x, λ) ισχύει η συνθήκη LICQ (linear Independence Constrained Qualification) δηλαδή τα $\nabla c_i(x)$, $i=1, \dots, m_e$ είναι γραμμικώς ανεξάρτητα διανύσματα και ισχύει η ισότητα:

$$LD(x^*, \Omega) = LFD(x^*, \Omega).$$

β. Ο πίνακας $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x, \lambda)$ ικανοποιεί την ιδιότητα $p^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x, \lambda) p > 0$, $\forall p \neq 0$ τέτοιο ώστε $A(x)p = 0$, δηλαδή για κάθε p που ανήκει στο μηδενικό χώρο του πίνακα $A(x)$.

Λήμμα 4.1 ([2], Λήμμα 16.1, σελ. 452).

Έστω ότι ισχύουν οι υποθέσεις (4.1). Τότε ο KKT πίνακας $\begin{pmatrix} \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k & -A_k^T \\ A_k & 0 \end{pmatrix}$ είναι μη ιδιάζων και άρα υπάρχει ένα μοναδικό ζεύγος διανυσμάτων (p_k, p_λ) που ικανοποιεί το σύστημα (4.5).

Απόδειξη

Έστω ότι ο KKT πίνακας είναι ιδιάζων, δηλαδή υπάρχουν διανύσματα $w \neq 0$, $v \neq 0$ τέτοια ώστε:

$$\begin{pmatrix} \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k & -A_k^T \\ A_k & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \omega \\ \nu \end{pmatrix} = 0 \quad (4.6)$$

Από την (4.6) προκύπτουν $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k \omega - A_k^T \nu = 0$ και $A_k \omega = 0$ και έτσι:

$$(\omega^T \nu^T) \begin{pmatrix} \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k & -A_k^T \\ A_k & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \omega \\ \nu \end{pmatrix} = 0 \stackrel{A_k \omega = 0}{\Rightarrow} \omega^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k \omega = 0$$

Δεδομένου ότι ο πίνακας $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k$ είναι θετικά ορισμένος έχουμε: $\omega^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k \omega > 0$, $\forall \omega \neq 0$ τέτοιο ώστε $A_k \omega = 0$ το οποίο είναι άτοπο. Επομένως $\omega = 0$ και από την (4.6) προκύπτει ότι $\nu = 0$. Άρα η (4.6) ικανοποιείται μόνο εάν $\omega = \nu = 0$ και επομένως ο πίνακας είναι αντιστρέψιμος.

□

Η μέθοδος SQP αναπαριστά έναν εναλλακτικό τρόπο αντίληψης των επαναλήψεων που ορίζονται από τις εξισώσεις (4.4) και (4.5). Για το σκοπό αυτό έστω ότι προσεγγίζουμε το πρόβλημα (4.1) στην επανάληψη (x_k, λ_k) μέσω του τετραγωνικού προγράμματος:

$$\min_p f_k + \nabla f_k^T p + \frac{1}{2} p^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k p, \quad A_k p + c_k = 0 \quad (4.7)$$

Αν ισχύουν οι υποθέσεις 4.1 τότε το πρόβλημα (4.7) έχει μοναδική λύση (p_k, l_k) που ικανοποιεί τις συνθήκες KKT πρώτης τάξης, δηλαδή

$$\begin{pmatrix} \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k & -A_k^T \\ A_k & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_k \\ l_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\nabla f_k \\ -c_k \end{pmatrix} \quad (4.8)$$

Δεδομένου ότι ο όρος $\nabla_x \mathcal{L}_k = -\nabla f_k + A_k^T \lambda_k$ είναι γραμμικός αναφορικά με το λ_k , αφαιρώντας τον όρο $A_k^T \lambda_k$ και από τα δύο μέρη της πρώτης εξίσωσης του συστήματος (4.5), προκύπτει η (4.8) με τη μεταβλητή λ_{k+1} στη θέση της l_k . Συνεπώς, δεδομένης της αντιστρεψιμότητας του πίνακα των συντελεστών προκύπτει ότι $\lambda_{k+1} = l_k$ και άρα τα διανύσματα p_k και l_k μπορούν να προσδιοριστούν είτε μέσω της επίλυσης των εξισώσεων Newton (4.5) είτε μέσω της επίλυσης του τετραγωνικού προβλήματος βελτιστοποίησης (4.7).

Η κατεύθυνση έρευνας p_k που ικανοποιεί την (4.8) είναι η μοναδική γενική λύση του τετραγωνικού προγράμματος (4.7) σύμφωνα με το ακόλουθο θεώρημα. Για το σκοπό αυτό έστω ο πίνακας Z δηλώνει τον $n \times (n-m)$ πίνακα οι στήλες του οποίου αποτελούν μια βάση για το μηδενικό χώρο του πίνακα A , δηλαδή ο πίνακας Z είναι πλήρους βαθμού και ικανοποιεί τη σχέση $AZ = 0$. Τότε η υπόθεση (4.1β) μετασχηματίζεται στη συνθήκη ότι ο απλοποιημένος πίνακας Hessian $Z^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k Z$ είναι θετικά ορισμένος.

Θεώρημα 4.2 ([2], Θεώρημα 16.2, σελ. 453).

Έστω ότι ικανοποιείται η υπόθεση (4.1α) και ο απλοποιημένος πίνακας Hessian $Z^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k Z$ είναι

θετικά ορισμένους. Τότε η κατεύθυνση έρευνας p_k που ικανοποιεί τη σχέση (4.8) είναι η μοναδική γενική λύση του προβλήματος ελαχιστοποίησης (4.7).

Απόδειξη

Έστω p_{k+1} είναι ένα οποιοδήποτε άλλο σημείο του επιτρεπτού συνόλου του προβλήματος (4.7) (ικανοποιεί δηλαδή $A_k p_{k+1} + c_k = 0$) και έστω $\delta p_k = p_k - p_{k+1}$. Τότε, $A p_k = A p_{k+1} = -c_k$ και συνεπώς $A \delta p_k = 0$, δηλαδή το δp_k βρίσκεται στο μηδενικό χώρο του πίνακα A . Έστω $m(p)$ είναι η αντικειμενική συνάρτηση του προβλήματος (4.7), τότε:

$$\begin{aligned} m(p_{k+1}) &= \frac{1}{2} (p_k - \delta p_k)^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k (p_k - \delta p_k) + \nabla f_k^T (p_k - p) \\ &= \frac{1}{2} \delta p_k^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k \delta p_k - \delta p_k^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k p_k - \nabla f_k^T \delta p + m(p_k) \end{aligned} \quad (4.9)$$

Από την (4.8) $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k p_k = -\nabla f_k + A_k^T \lambda_{k+1}$ και συνεπώς:

$$\delta p_k^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k p_k = \delta p_k^T (-\nabla f_k + A_k^T \lambda_{k+1}) \stackrel{A \delta p_k = 0}{=} -\delta p_k^T \nabla f_k$$

Από την (4.9) επακολουθεί ότι:

$$m(p_{k+1}) = \frac{1}{2} \delta p_k^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k p_k + m(p_k) \quad (4.10)$$

Όμως το δp_k ανήκει στον μηδενικό χώρο του πίνακα A , επομένως μπορεί να γραφτεί ως $\delta p_k = Z u$ για κάποιο $u \in \mathbb{R}^{n-m}$ και η (4.10) δίνει:

$$m(p_{k+1}) = \frac{1}{2} u^T Z^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k Z u + m(p_k)$$

Δεδομένου τώρα ότι ο πίνακας $Z^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k Z$ είναι θετικά ορισμένος προκύπτει ότι $m(p_{k+1}) > m(p_k)$ εκτός εάν $u=0$, δηλαδή όταν $\delta p_k=0$ και άρα $p_{k+1}=p_k$. Επομένως, η κατεύθυνση έρευνας p_k είναι η μοναδική γενική λύση του προβλήματος ελαχίστου (4.7).

□

Αλγόριθμος 4.1 (Η μέθοδος SQP)

Choose an initial pair (x_0, λ_0)

$k=0$

Repeat until a convergence test is satisfied

- i. Evaluate: $f_k, \nabla f_k, \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k, c_k$ and A_k
- ii. Solve the quadratic program (4.7) to obtain p_k and l_k
- iii. Set $x_{k+1} = x_k + p_k$, $\lambda_{k+1} = l_k$

end (repeat)

Ο γραμμικός όρος $\nabla f_k^T p$ στην αντικειμενική συνάρτηση του τετραγωνικού προβλήματος (4.7), μπορεί να αντικατασταθεί από τον όρο $\nabla_x \mathcal{L}(x_k, \lambda_k)^T p$ δεδομένου ότι λόγω του περιορισμού $A_k p + c_k$ οι δύο επιλογές είναι ισοδύναμες όπως φαίνεται παρακάτω:

$$\mathcal{L}(x, \lambda) = f(x) - \lambda^T c(x) \Rightarrow \nabla_x \mathcal{L}(x, \lambda) = \nabla f(x) - A(x)^T \lambda \Rightarrow p^T \nabla_x \mathcal{L}(x, \lambda) = p^T \nabla f(x) - p^T A(x)^T \lambda$$

Όμως $A(x)p + c(x) = 0$, και συνεπώς:

$$\nabla_x \mathcal{L}(x, \lambda)^T p = \nabla f(x)^T p + c(x)^T \lambda \stackrel{c(x)=0}{=} \nabla f(x)^T p$$

Με την παρατήρηση αυτή η επιλογή του τετραγωνικού μοντέλου στην (4.7) πραγματοποιείται αντικαθιστώντας αρχικά το μη γραμμικό πρόβλημα (4.1) με το πρόβλημα ελαχιστοποίησης της Λαγκρανζιανής συνάρτησης $\mathcal{L}(x, \lambda)$ υπό τους περιορισμούς $c(x)=0$ και εν συνεχεία κατασκευάζοντας μια τετραγωνική προσέγγιση της $\mathcal{L}(x, \lambda)$ και μια γραμμική προσέγγιση των περιορισμών.

Για το γενικό μη γραμμικό πρόβλημα ελαχιστοποίησης της μορφής:

$$\min f(x), \quad \begin{cases} c_i(x) = 0, & i \in \mathcal{E} = \{1, \dots, m_e\} \\ c_i(x) \geq 0, & i \in \mathcal{I} = \{m_e, \dots, m\} \end{cases} \quad (4.11)$$

Το τετραγωνικό υποπρόβλημα ελαχιστοποίησης ορίζεται μέσω της γραμμικοποίησης τόσο των ανισωτικών όσο και των ισωτικών περιορισμών.

$$\min_p f_k + \nabla f_k^T p + \frac{1}{2} p^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k p, \quad \begin{cases} \nabla c_i(x_k)^T p + c_i(x_k) = 0, & i \in \mathcal{E} = \{1, \dots, m_e\} \\ \nabla c_i(x_k)^T p + c_i(x_k) \geq 0, & i \in \mathcal{I} = \{m_e, \dots, m\} \end{cases} \quad (4.12)$$

Στη περίπτωση αυτή η μέθοδος SQP για το πρόβλημα (4.11) περιγράφεται επίσης από τον αλγόριθμο (4.1), με τη διαφοροποίηση ότι η κατεύθυνση έρευνας p_k και η εκτίμηση των πολλαπλασιαστών $\lambda_k = \lambda_{k+1}$ ερμηνεύονται ως η λύση και οι αντίστοιχοι πολλαπλασιαστές Lagrange του τετραγωνικού προβλήματος (4.12).

4.2 Εξάλειψη μεταβλητών σε μη γραμμικά προβλήματα βελτιστοποίησης με περιορισμούς.

Μια φυσιολογική ιδέα σε προβλήματα ελαχιστοποίησης με περιορισμούς είναι η χρησιμοποίηση των περιορισμών με τέτοιο τρόπο, έτσι ώστε κάποιες από τις μεταβλητές του προβλήματος να εξαλειφθούν και να προκύψει ένα πιο απλοϊκό πρόβλημα. Ωστόσο, η ιδέα αυτή δεν χρησιμοποιείται στη πράξη δεδομένου ότι η χρήση μη γραμμικών εξισώσεων κατά την εξάλειψη των μεταβλητών μπορεί να διαφοροποιήσει το πρόβλημα ή να επηρεάσει τον δείκτη κατάστασης. Για τον λόγο αυτό, αρκετοί αλγόριθμοι γραμμικοποιούν τους περιορισμούς και η διαδικασία εξάλειψης των μεταβλητών εφαρμόζεται στο απλοποιημένο πρόβλημα ως εξής:

Έστω το πρόβλημα με ισωτικούς περιορισμούς της μορφής:

$$\min_{x \in R} f(x), \quad Ax = b$$

όπου $f(x)$ μη γραμμική συνάρτηση και A $m \times n$ με $m \leq n$ πίνακας πλήρους βαθμού. Υπό αυτές τις συνθήκες μπορεί να βρεθεί ένας πίνακας αντιμετάθεσης P τέτοιος ώστε:

$$AP = [B \mid N] \quad (4.13)$$

όπου B είναι ένας $m \times m$ πίνακας οι στήλες του οποίου αποτελούν ένα γραμμικώς ανεξάρτητο υποσύνολο των στηλών του πίνακα A και ο $m \times (n-m)$ πίνακας N συμπεριλαμβάνει τις εναπομείναντες στήλες του πίνακα A . Ορίζοντας τα διανύσματα $x_B \in \mathbb{R}^m$ και $x_N \in \mathbb{R}^{n-m}$ ως ακολούθως:

$$\begin{pmatrix} x_B \\ x_N \end{pmatrix} = P^T x \quad (4.14)$$

και δεδομένου ότι $PP^T = I$, προκύπτει ότι $b = Ax = AP(P^T x) = Bx_B + Nx_N$ και άρα:

$$x_B = B^{-1}b - B^{-1}Nx_N \quad (4.15)$$

Συνεπώς, ένα επιτρεπτό σημείο των περιορισμών $Ax = b$ προκύπτει για οποιαδήποτε τιμή του x_N . Από την (4.14):

$$\begin{pmatrix} x_B \\ x_N \end{pmatrix} = P^T x \Rightarrow x = (P^T)^{-1} \begin{pmatrix} x_B \\ x_N \end{pmatrix} \Rightarrow x = P \begin{pmatrix} B^{-1}b - B^{-1}Nx_N \\ x_N \end{pmatrix}$$

και γι' αυτό τον λόγο το αρχικό πρόβλημα είναι ισοδύναμο με το πρόβλημα ελαχίστου χωρίς περιορισμούς:

$$\min_{x_N} h(x_N) = f \left(P \begin{bmatrix} B^{-1}b - B^{-1}Nx_N \\ x_N \end{bmatrix} \right) \quad (4.16)$$

Οι μεταβλητές x_B καλούνται βασικές μεταβλητές και ο πίνακας B πίνακας βάσης.

Θεωρώντας ότι ο πίνακας P είναι δεδομένος και ότι $P = I$ δηλαδή οι βασικές στήλες εμφανίζονται στις πρώτες m θέσεις, από τις (4.14) και (4.15) έχουμε:

$$\begin{pmatrix} x_B \\ x_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B^{-1}b - B^{-1}Nx_N \\ x_N \end{pmatrix} = Yb + Zx_N \quad (4.17)$$

$$\text{όπου } Y = \begin{pmatrix} B^{-1} \\ 0 \end{pmatrix}, Z = \begin{pmatrix} -B^{-1}N \\ I \end{pmatrix} \quad (4.18)$$

Ο πίνακας Z έχει $n-m$ γραμμικώς ανεξάρτητες στήλες (εξαιτίας του ταυτοτικού πίνακα στο κατώτερο τμήμα) και επιπλέον αποτελεί μια βάση για τον μηδενικό χώρο του πίνακα A αφού:

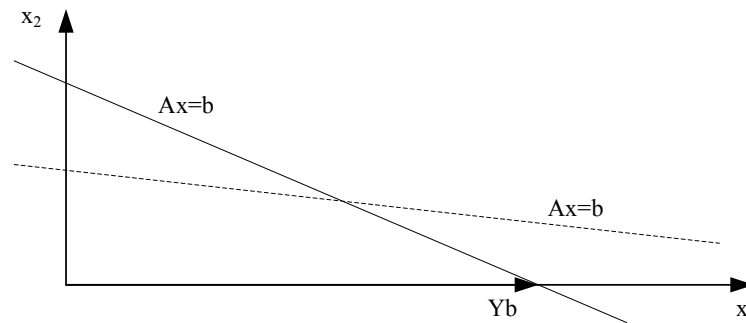
$$AZ \stackrel{P=I}{=} APZ = [B \mid N] Z = [B \mid N] \begin{pmatrix} -B^{-1}N \\ I \end{pmatrix} = -N + N = 0$$

Απ' την άλλη μεριά, ο όρος Yb αποτελεί μια ειδική λύση των περιορισμών $Ax = b$ αφού:

$$Ax = b \Rightarrow A(Yb + Zx_N) = b \Rightarrow AYb + [B \mid N] \begin{pmatrix} -B^{-1}N \\ I \end{pmatrix} x_N = b \Rightarrow AYb = b$$

Για το λόγο αυτό η τεχνική εξάλειψης των μεταβλητών αναπαριστά τα σημεία του επιτρεπτού συνόλου ως το άθροισμα μιας ειδικής λύσης Yb του συστήματος $Ax = b$ και μιας μετατόπισης Zx_N

κατά μήκος του μηδενικού χώρου των περιορισμών. Στο σχήμα 4.1 η λύση Yb προκύπτει επιλέγοντας το βασικό πίνακα B να είναι η πρώτη στήλη του πίνακα A .



Σχήμα 4.1 Τεχική εξάλειψης μεταβλητών: η μεταβλητή x_2 σταθεροποιείται στο 0 και η x_1 επιλέγεται έτσι ώστε να διασφαλίζεται η ικανοποίηση των περιορισμών.

Εάν απ' την άλλη μεριά το επιτρεπτό σύνολο $Ax=b$ δίνεται με τη διακεκομμένη γραμμή (σχεδόν παράλληλα με το x_1) όπως φαίνεται στο σχήμα 4.1, τότε το βήμα Yb κατά μήκος του άξονα x_1 θα είναι πολύ μεγάλο. Δεδομένου όμως ότι η συνολική μετατόπιση x στη σχέση (4.17) δεν είναι πολύ μεγάλη σε γενικές γραμμές, θα υπολογιζόταν ως η διαφορά πολύ μεγάλων διανυσμάτων δίνοντας αφορμή για αριθμητικές αστάθειες. Στη περίπτωση αυτή θα ήταν προτιμότερο το βήμα Yb να βρισκόταν κατά μήκος του x_2 άξονα, όπου ο πίνακας B θα ήταν η δεύτερη στήλη του πίνακα A .

Προς αποφυγή αυτού του κινδύνου η λύση Yb ορίζεται ως η ελάχιστη απόσταση από το επιτρεπτό σύνολο των περιορισμών. Για το σκοπό αυτό επιλέγονται οι πίνακες $Y \in \mathbb{R}^{n \times m}$ και $Z \in \mathbb{R}^{n \times (n-m)}$ με τις ακόλουθες ιδιότητες:

$$\begin{cases} [Y \mid Z] \in \mathbb{R}^{n \times n} \text{ αντιστρέψιμος} \\ AZ=0 \end{cases} \quad (4.19)$$

Δεδομένου ότι ο πίνακας A είναι πλήρους βαθμού, το ίδιο ισχύει και για τον πίνακα $A[Y \mid Z] = [AY \mid 0]$ και επομένως ο $n \times m$ πίνακας AY είναι αντιστρέψιμος.

Οποιαδήποτε λύση του συστήματος $Ax=b$ εκφράζεται για κάποια $x_Y \in \mathbb{R}^m$, $x_Z \in \mathbb{R}^{n-m}$ ως εξής:

$$x = Yx_Y + Zx_Z \quad (4.20)$$

Γι' αυτό το λόγο, $Ax=b \stackrel{(4.20)}{\Rightarrow} Ax=(AY)x_Y=b \Rightarrow x_Y=(AY)^{-1}b$. Αντικαθιστώντας το x_Y στην (4.20) προκύπτει η σχέση:

$$x=Y(AY)^{-1}b+Zx_Z \quad (4.21)$$

η οποία ικανοποιεί τους περιορισμούς $Ax=b$, $\forall x_Z \in \mathbb{R}^{n-m}$. Άρα το πρόβλημα:

$$\min f(x), Ax=b$$

μπορεί να εκφραστεί ως το ακόλουθο πρόβλημα ελαχιστοποίησης χωρίς περιορισμούς:

$$\min_{x_z} f(Y(AZ)^{-1}b + Zx_z).$$

Για να έχει ο πίνακας AZ καλό δείκτη κατάστασης (δεδομένου ότι χρειάζεται να παραγοντοποιηθεί για να μας δώσει τον όρο $(AZ)^{-1}b$ στην (4.21)), οι πίνακες Y και Z υπολογίζονται μέσω της παραγοντοποίησης QR του πίνακα A^T ως ακολούθως:

$$A^T \Pi = [Q_1 \ Q_2] \begin{bmatrix} R \\ 0 \end{bmatrix} \quad (4.22)$$

όπου ο πίνακας $[Q_1 \ Q_2]$ είναι ορθογώνιος, οι πίνακες $Q_1 \in \mathbb{R}^{n \times m}$ και $Q_2 \in \mathbb{R}^{n \times (n-m)}$ έχουν ορθοκανονικές στήλες, ο πίνακας $R \in \mathbb{R}^{m \times m}$ είναι άνω τριγωνικός και αντιστρέψιμος και $\Pi \in \mathbb{R}^{m \times m}$ είναι ο πίνακας αντιμετάθεσης. Ορίζοντας $Y=Q_1$ και $Z=Q_2$ προκύπτει:

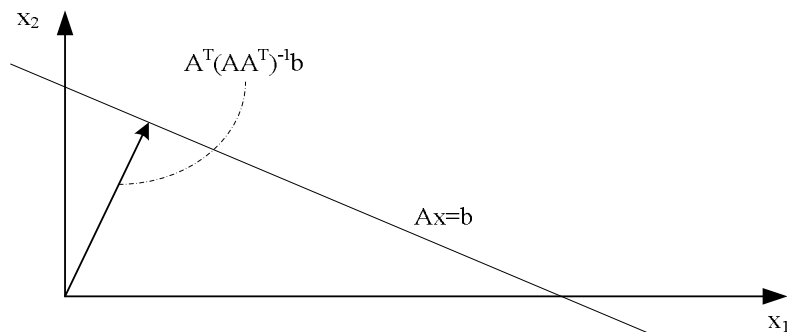
$$A^T \Pi = [Y \ Z] \begin{bmatrix} R \\ 0 \end{bmatrix} = YR \Rightarrow A^T = YR\Pi^T$$

Επομένως, $Y^T A^T = Y^T YR\Pi^T \Rightarrow (AZ)^T = R\Pi^T \Rightarrow AZ = \Pi R^T$ και ο δείκτης κατάστασης του πίνακα AZ είναι ο ίδιος με αυτόν του πίνακα R .

Ένας απλός υπολογισμός δείχνει ότι η ειδική λύση: $Y(AZ)^{-1}b = Y(\Pi R^T)^{-1}b = QR^{-T}\Pi^T b$ μπορεί επίσης να γραφτεί ως $A^T(AA^T)^{-1}b$ η οποία αποτελεί τη λύση του ακόλουθου προβλήματος:

$$\min \|x\|^2, Ax=b$$

και είναι η λύση ελάχιστης νόρμας του συστήματος $Ax=b$ όπως φαίνεται στο σχήμα 4.2.



Σχήμα. 4.2 Το βήμα ελάχιστης νόρμας.

Επισημαίνεται ότι η μέθοδος εξάλειψης των μεταβλητών δεν είναι πάντα ευεργετική όταν υπάρχουν ανισωτικοί περιορισμοί μιας και οι περιορισμοί αυτοί θα μπορούσαν να καταστούν πιο πολύπλοκοι με την εφαρμογή της μεθόδου. Ένα παράδειγμα αυτού του φαινομένου δίνεται στο ([2], σελ.434).

4.3 Υπολογισμός της κατεύθυνσης έρευνας τετραγωνικών προβλημάτων.

Η προσπάθεια που απαιτείται για την εξεύρεση λύσης του τετραγωνικού προβλήματος εξαρτάται από τα χαρακτηριστικά της συνάρτησης κόστους και τον αριθμό των ανισωτικών περιορισμών. Αν η μήτρα Hessian είναι θετικά ημιορισμένη το πρόβλημα είναι ένα κυρτό τετραγωνικό πρόβλημα ελαχίστου η επίλυση του οποίου είναι παρόμοια σε δυσκολία με εκείνη ενός γραμμικού προβλήματος. Αυστηρά κυρτά προβλήματα είναι εκείνα στα οποία η μήτρα Hessian είναι θετικά ορισμένη και τέλος μη κυρτά προβλήματα είναι εκείνα στα οποία η μήτρα Hessian είναι αόριστη (δηλ. κάποιες από τις ιδιοτιμές της είναι θετικές και κάποιες άλλες αρνητικές), περίπτωση κατά την οποία μπορεί να υπάρχουν διάφορα στάσιμα σημεία και τοπικά ελάχιστα.

4.3.1 Τετραγωνικό πρόβλημα με ισωτικούς περιορισμούς.

Έστω ότι στην επανάληψη (x_k, λ_k) ορίζεται το τετραγωνικό πρόβλημα (4.7) το οποίο δίνεται από τη σχέση:

$$\min_p \frac{1}{2} p^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k p + \nabla f_k^T p, \quad A_k p + c_k = 0$$

Θεωρούμε επίσης ότι ικανοποιούνται οι υποθέσεις (4.1), έτσι που η λύση του προβλήματος (4.7) δίνεται από το σύστημα (4.8):

$$\begin{pmatrix} \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k & -A_k^T \\ A_k & O \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_k \\ \lambda_{k+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\nabla f_k \\ -c_k \end{pmatrix}$$

Μια σημαντική παρατήρηση αναφορικά με τον πίνακα KKT είναι ότι εάν $m \geq 1$ είναι πάντα αόριστος. Αποδεικνύεται ότι εάν ο πίνακας $Z^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k Z$ είναι θετικά ορισμένος τότε ο KKT πίνακας έχει n θετικές και m αρνητικές ιδιοτιμές ([2], Θεώρημα 16.3, σελ. 454).

A. Η μέθοδος συμπληρώματος του Shur.

Η μέθοδος συμπληρώματος του Shur (Shur-Complement Method) χρησιμοποιείται όταν η μήτρα δευτέρων παραγώγων της Λανγκρανζιανής συνάρτησης $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k$ είναι θετικά ορισμένη. Πολλαπλασιάζοντας την πρώτη εξίσωση στο σύστημα (4.8) με $A_k \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k^{-1}$ και εν συνεχεία αφαιρώντας τη δεύτερη εξίσωση προκύπτει το ακόλουθο γραμμικό σύστημα:

$$(A_k \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k^{-1} A_k^T) \lambda_{k+1} = A_k \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k^{-1} \nabla f_k - c_k \quad (4.23)$$

Το σύστημα αυτό επιλύεται ως προς λ_{k+1} και κατόπιν το p_k υπολογίζεται από την πρώτη εξίσωση του συστήματος (4.8):

$$\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k p_k = -\nabla f_k + A_k^T \lambda_{k+1} \quad (4.24)$$

Η προσέγγιση αυτή, δεδομένου ότι απαιτεί την εκτέλεση υπολογισμών με τον πίνακα $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k^{-1}$ καθώς επίσης και την παραγοντοποίηση του $m \times m$ πίνακα $A_k \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k^{-1} A_k^T$, είναι ωφέλιμη όταν:

- i. ο πίνακας $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k$ αντιστρέφεται εύκολα (Για παράδειγμα όταν ο πίνακας $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k$ είναι διαγώνιος ή block-διαγώνιος), ή
- ii. ο πίνακας $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k^{-1}$ είναι γνωστός μέσω ενός τύπου ενημέρωσης Quasi-Newton, ή
- iii. ο αριθμός των περιορισμών m είναι μικρός έτσι που ο αριθμός των απαιτούμενων οπισθοδρομίσεων (πίσω αντικαταστάσεων) για τη μορφοποίηση του πίνακα $A \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k^{-1} A^T$ δεν είναι πολύ μεγάλος.

Η ονομασία “Schur-Complement” της μεθόδου προέρχεται από το γεγονός ότι οι εξισώσεις (4.23) και (4.24) προκύπτουν από την εφαρμογή της μεθόδου απαλοιφής Gauss στην στο σύστημα (4.8) με τον πίνακα $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k$ οδηγό, περίπτωση κατά την οποία ο KKT πίνακας λαμβάνει την άνω τριγωνική block μορφή:

$$\begin{pmatrix} \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k & A_k^T \\ \mathbf{0} & -A \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k^{-1} A^T \end{pmatrix}$$

και ο πίνακας $A \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k^{-1} A^T$ είναι γνωστός στην ωρολόγια της γραμμικής άλγεβρας ως το συμπλήρωμα schur της μήτρας $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k$ στον KKT πίνακα.

B. Η Μέθοδος Μηδενικού Χώρου.

Η Μέθοδος Μηδενικού Χώρου (Null-Space Method) δεν απαιτεί την αντιστρεψιμότητα της μήτρας $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k$ και συνεπώς παρουσιάζει ευρύτατη εφαρμοσιμότητα. Η μέθοδος αυτή αξιώνει μόνο ο πίνακας A_k να είναι πλήρους βαθμού και η και η απλοποιημένη μήτρα δευτέρων παραγώγων της Λανγκρανζιανής συνάρτησης $Z_k^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k Z_k$ να είναι θετικά ορισμένη. Ωστόσο, στη μέθοδο αυτή απαιτείται η γνώση του $n \times (n-m)$ πίνακα βάσης Z_k . Όπως και στη μέθοδο συμπληρώματος το σύστημα εξισώσεων (4.8) διαχωρίζεται σε δύο μικρότερα συστήματα.

Αντικαθιστώντας την κατεύθυνση έρευνας $p_k = Y_k p_Y + Z_k p_Z$, όπου $Y_k p_Y$ είναι μια συγκεκριμένη λύση του προβλήματος $A_k p_k = -c_k$ και $Z_k p_Z$ είναι μια μετατόπιση κατά μήκος αυτών των περιορισμών, στη δεύτερη εξίσωση του συστήματος (4.8) και ανακαλώντας ότι $A_k Z_k = 0$, τότε:

$$(A_k Y_k) p_Y = -c_k \quad (4.25)$$

και δεδομένου ότι ο πίνακας $A_k Y_k$ είναι αντιστρέψιμος, το p_Y είναι καλώς ορισμένο.

Επιπλέον, αντικαθιστώντας το p_k στην πρώτη εξίσωση του συστήματος (4.8) και πολλαπλασιάζοντας με Z_k^T προκύπτει το εξής σύστημα:

$$(Z_k^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k Z_k) p_Z = -Z_k^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k Y_k p_Y - Z_k^T \nabla f_k \quad (4.26)$$

το οποίο, επιλύεται ως προς p_Z εκτελώντας μια παραγοντοποίηση cholesky στην απλοποιημένη μήτρα δευτέρων παραγώγων της Λανγκρανζιανής συνάρτησης $Z_k^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k Z_k$.

Λόγω τώρα της αντιστρεψιμότητας του πίνακα $A_k Y_k$, ο πολλαπλασιαστής Lagrange λ_{k+1} λαμβάνεται μέσω της πρώτης εξίσωσης του συστήματος (4.8) ως η λύση του ακόλουθου γραμμικού συστήματος:

$$(A_k Y_k)^T \lambda_{k+1} = Y_k^T (\nabla f_k + \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k p_k) \quad (4.27)$$

Μέσω της εισαγωγής διαφόρων προσεγγίσεων ο υπολογισμός της μήτρας Hessian είναι δυνατόν να αποφευχθεί.

Σαν πρώτη εκδοχή, ο όρος που συμπεριλαμβάνει τη κατεύθυνση έρευνας p_k εξαλείφεται από το δεξιό μέλος της σχέσης (4.27) διαχωρίζοντας κατά αυτόν τον τρόπο τους υπολογισμούς των p_k και λ_{k+1} . Η απλούστευση αυτή δικαιολογείται από την παρατήρηση του ότι η κατεύθυνση έρευνας p_k συγκλίνει στο μηδέν όσο πλησιάζουμε στη λύση ενώ για το ∇f_k φυσιολογικά δεν ισχύει κάτι τέτοιο. Συνεπώς οι πολλαπλασιαστές υπολογισμένοι κατά αυτόν το τρόπο θα αποτελούν ικανοποιητικές εκτιμήσεις των πολλαπλασιαστών του τετραγωνικού προβλήματος αρκετά κοντά στη λύση. Επιπλέον, επιλέγοντας $Y_k = A_k^T$ (όταν ο πίνακας A_k είναι πλήρους βαθμού), το λ_{k+1} δίνεται μέσω:

$$\lambda_{k+1} = (A_k A_k^T)^{-1} A_k \nabla f_k \quad (4.28)$$

και καλούνται επίσης πολλαπλασιαστές ελαχίστων τετραγώνων δεδομένου ότι μπορούν να προκύψουν επίσης από την επίλυση του προβλήματος:

$$\min_{\lambda_{k+1}} \|\nabla f_k - A_k^T \lambda_{k+1}\|_2^2.$$

Οι πολλαπλασιαστές αυτοί είναι χρήσιμοι ακόμη και όταν η τρέχουσα επανάληψη είναι μακριά από την λύση μιας και επιχειρούν να ικανοποιήσουν τις συνθήκες βελτίστου πρώτης τάξης (4.2) όσο το δυνατόν καλύτερα.

Σε αλγόριθμους στη πράξη, για τον υπολογισμό του λ_{k+1} χρησιμοποιώντας την πιο πρόσφατη διαθέσιμη πληροφορία, πρώτα βρίσκεται η κατεύθυνση έρευνας p_k μέσω των εξισώσεων (4.25)-(4.26) και το λ_{k+1} ορίζεται στη συνέχεια μέσω της (4.27) με τους όρους στο δεξιο μέλος αποτιμημένους στην επανάληψη x_{k+1} .

Μια δεύτερη απλούστευση της μεθόδου αποτελεί η απομάκρυνση του όρου $Z_k^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k Y_k p_Y$ στην (4.26) αποφέροντας με αυτό τον τρόπο το απλούστερο σύστημα:

$$(Z_k^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k Z_k) p_Z = -Z_k^T \nabla f_k \quad (4.29)$$

Η παράληψη του όρου $Z_k^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k Y_k p_Y$ δικαιολογείται όταν για τον υπολογισμό του p_Z γίνεται χρήση

μιας Quasi-Newton προσέγγιση της απλοποιημένης μήτρας Hessian $Z_k^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k Z_k$ παρέχοντας κατ' αυτόν τον τρόπο υπεργραμμική σύγκλιση, ενώ απ' την άλλη μεριά η p_Y συνιστώσα (4.25) βασίζεται σε μια επανάληψη Newton εφαρμοσμένη στους περιορισμούς $c(x)=0$ έτσι που αναμένεται για το p_Y να συγκλίνει στο μηδέν τετραγωνικά. Συνεπώς παρατηρείται στη πράξη ότι $\frac{\|p_Y\|}{\|p_Z\|} \rightarrow 0$ και άρα η (3.20) είναι μια καλή προσέγγιση της (4.26). Η μεθόδευση αυτή έχει το πλεονέκτημα ότι απαιτείται μόνο η προσέγγιση της μήτρας $Z_k^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k Z_k$ και όχι της $Z_k^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k Y_k$ αλλά το τίμημα είναι ότι το συνολικό βήμα p_k δεν αποτελεί πλέον μια λύση του συστήματος KKT αλλά μια προσέγγιση αυτής.

Σε γενικές γραμμές ο ουσιώδης περιορισμός της μεθόδου κρύβεται στην αναγκαιότητα του πίνακα Z_k ο υπολογισμός του οποίου μπορεί να είναι πολύ δαπανηρός σε μεγάλης έκτασης προβλήματα και εάν η επιλογή του είναι ανεπαρκής (δεδομένου ότι δεν ορίζεται με μοναδικό τρόπο), το απλοποιημένο σύστημα (4.26) ή (4.29) μπορεί να προκύψει να έχει μη ικανοποιητική κατάσταση. Απ' την άλλη μεριά, εάν ο πίνακας Z_k επιλεγθεί να έχει ορθοκανονικές στήλες, τότε η κατάσταση της μήτρας $Z_k^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k Z_k$ είναι τουλάχιστον τόσο καλή όσο και αυτή της μήτρας $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k$ με εξαίρεση τη περίπτωση μεγάλων σε μέγεθος προβλημάτων (ο πίνακας A να είναι μεγάλος), στα οποία ο υπολογισμός ενός ορθοκανονικού πίνακα Z_k είναι δαπανηρός. Στη περίπτωση αυτή χρησιμοποιείται μια από τις λιγότερο αξιόπιστες επιλογές για τον πίνακα Z_k όπως έχουν περιγραφεί στην ενότητα 4.2.

4.3.2 Τετραγωνικό πρόβλημα με ισωτικούς και ανισωτικούς περιορισμούς.

Η κατεύθυνση έρευνας στις μεθόδους SQP με αναζήτηση γραμμής για προβλήματα βελτιστοποίησης με ανισωτικούς περιορισμούς προκύπτει από την επίλυση του υποπροβλήματος (4.12) διαμέσου της μεθόδου ενεργού συνόλου η οποία είναι αποτελεσματική για μικρά και μεσαία σε μέγεθος κυρτά τετραγωνικά προβλήματα.

Αν $i \notin \mathcal{I} \cap \mathcal{A}(p^*)$ τότε $\nabla c_i(x_k)^T p^* + c_i(x_k) > 0$ και από τη συνθήκη συμπληρωματικότητας $\lambda_i^* = 0$. Εξειδικεύοντας τις συνθήκες KKT στο πρόβλημα (4.12), οποιαδήποτε λύση p^* του (4.12) ικανοποιεί τις ακόλουθες συνθήκες 1^{ης} τάξης, για κάποιους πολλαπλασιαστές Lagrange λ_i^* ,

$$i \in \mathcal{A}(p^*) = \{i \in \mathcal{E} \cup \{i \in \mathcal{I} : \nabla c_i(x_k)^T p^* + c_i(x_k) = 0\}\}$$

$$\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k p^* + \nabla f_k - \sum_{i \in \mathcal{A}(p^*)} \lambda_i^* \nabla c_i(x_k) = 0 \quad (4.30\alpha)$$

$$\nabla c_i(x_k)^T p^* + c_i(x_k) = 0, \forall i \in \mathcal{A}(p^*) \quad (4.30\beta)$$

$$\nabla c_i(x_k)^T p^* + c_i(x_k) \geq 0, \forall i \in \mathcal{I} \setminus \mathcal{A}(p^*) \quad (4.30\gamma)$$

$$\lambda_i^* \geq 0, \forall i \in \mathcal{I} \cap \mathcal{A}(p^*) \quad (4.30\delta)$$

Στις συνθήκες βελτίστου (4.30) δεν θεωρείται ότι ισχύει η συνθήκη LICQ, δηλαδή της γραμμικής ανεξαρτησίας των κλίσεων των ενεργών περιορισμών στην λύση μιας και αυτή μπορεί να αντικατασταθεί από κάποια άλλη όπως η γραμμικότητα των περιορισμών η οποία σαφώς και ικανοποιείται σε προβλήματα τετραγωνικού προγραμματισμού.

Για κυρτά προβλήματα τετραγωνικού προγραμματισμού (όταν η μήτρα $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k$ είναι θετικά ημιορισμένη), οι συνθήκες (4.30) είναι όντως ικανές για την κατεύθυνση έρευνας p^* ώστε να αποτελεί τη γενική λύση σύμφωνα με τι ακόλουθο θεώρημα.

Θεώρημα 4.3 ([2], Θεώρημα 16.4, σελ. 464).

Αν η κατεύθυνση έρευνας p^* ικανοποιεί τις συνθήκες (4.30) για κάποιο λ_i^* , $i \in \mathcal{A}(p^*)$ και η μήτρα $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}$ είναι θετικά ημιορισμένη, τότε το p^* είναι γενική λύση του προβλήματος (4.12).

□

Οι ικανές συνθήκες 2^{n_s} τάξης έτσι ώστε η κατεύθυνση έρευνας p^* να αποτελεί ένα τοπικό ελάχιστο ικανοποιούνται αν η απλοποιημένη μήτρα $Z^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k Z$ είναι θετικά ορισμένη, όπου ο πίνακας Z είναι μία βάση στον μηδενικό χώρο του Ιακωβιανού πίνακα των ενεργών περιορισμών οι γραμμές του οποίου είναι οι a_i^T , $\forall i \in \mathcal{A}(p^*)$. Στη περίπτωση αυτή η κατεύθυνση έρευνας p^* είναι μια αυστηρά τοπική λύση σύμφωνα με το θεώρημα 2.11.

Όταν η μήτρα $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}$ δεν είναι θετικά ορισμένη το γενικό πρόβλημα ελαχιστοποίησης (4.12) αποτελεί ένα μη κυρτό πρόβλημα τετραγωνικού προγραμματισμού (αποκαλούμενο αλλιώς και ως αόριστο) και μπορεί να έχει περισσότερα από ένα αυστηρά τοπικά ελάχιστα, προκαλώντας κατά αυτόν τον τρόπο κάποια επιπλοκή στον αλγόριθμο.

Μια δεύτερη ιδιότητα η οποία προκαλεί δυσκολίες σε κάποιους αλγόριθμους είναι ο εκφυλισμός ο οποίος αναφέρεται σε καταστάσεις στις οποίες:

- i. Οι κλίσεις των ενεργών περιορισμών $\nabla c_i(x)$, $\forall i \in \mathcal{A}(p^*)$ είναι γραμμικά εξαρτημένες στη λύση p^* ή/και
- ii. Η συνθήκη αυστηρής συμπληρωματικότητας δεν ισχύει, δηλαδή υπάρχουν ασθενώς ενεργοί περιορισμοί.

Κατά την περίπτωση όπου λαμβάνει χώρα η κατάσταση (i) προξενούνται αριθμητικές δυσκολίες κατά τον υπολογισμό του βήματος, αφού συγκεκριμένοι πίνακες οι οποίοι πρέπει να παραγοντοποιηθούν καθίστανται με ελλιπή βαθμό. Από την άλλη μεριά στη περίπτωση της κατάστασης (ii) είναι δύσκολο να προσδιοριστεί από τον αλγόριθμο το κατά πόσον οι περιορισμοί αυτοί είναι ενεργοί στην λύση.

A. Μέθοδος ενεργού συνόλου για κυρτά προβλήματα τετραγωνικού προγραμματισμού.

Θεωρείται ότι η μήτρα δευτέρων παραγώγων της Λανγκρανζιανής συνάρτησης $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k$ είναι θετικά ορισμένη και μελετάται το τετραγωνικό πρόβλημα (4.12). Στην περίπτωση όπου τα περιεχόμενα του βέλτιστου ενεργού συνόλου $\mathcal{A}(p^*)$ θα μπορούσαν να ήταν από πριν γνωστά, η λύση p^* θα ήταν δυνατόν να εξευρεθεί από την επίλυση του τετραγωνικού προβλήματος με ισωτικούς περιορισμούς:

$$\min_p f_k + \nabla f_k^T p + \frac{1}{2} p^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k p, \quad \nabla c_i(x_k)^T p + c_i(x_k) = 0, \quad i \in \mathcal{A}(p^*)$$

Η εκδοχή των μεθόδων ενεργού συνόλου η οποία χρησιμοποιείται περισσότερο συχνά στη πράξη είναι η προσέγγιση μέσω ενός τετραγωνικού προβλήματος με ισωτικούς περιορισμούς, σύμφωνα με την οποία επιλέγεται ένα υποσύνολο των περιορισμών σε κάθε επανάληψη p_k να είναι το αποκαλούμενο δοκιμαστικό σύνολο W_k και επιλύονται μόνο προβλήματα με ισωτικούς περιορισμούς της μορφής (4.7), με τους περιορισμούς στα δοκιμαστικά σύνολα να επιβάλλονται σαν ισότητες και όλους τους υπόλοιπους να αγνοούνται. Για το λόγο αυτό η προσέγγιση αυτή παρουσιάζει το πλεονέκτημα ότι σε μεγάλης κλίμακας προβλήματα τα τετραγωνικά υποπροβλήματα με ισωτικούς περιορισμούς είναι λιγότερο δαπανηρά κατά την επίλυσή τους από ότι το γενικό πρόβλημα (4.12).

Δεδομένης μιας επανάληψης p_k και του δοκιμαστικού συνόλου των ενεργών περιορισμών W_k , αν το p_k δεν ελαχιστοποιεί το τετραγωνικό μοντέλο στον υπόχωρο που ορίζεται από το W_k , υπολογίζεται μια κατεύθυνση έρευνας \tilde{p}_k επιλύοντας ένα τετραγωνικό υποπρόβλημα ισωτικών περιορισμών με τους περιορισμούς στο δοκιμαστικό σύνολο να θεωρούνται ως ισότητες και όλους τους υπόλοιπους να μην λαμβάνονται προσωρινά υπόψη. Το δοκιμαστικό σύνολο ανανεώνεται σε κάθε επανάληψη είτε με την προσθήκη σε αυτό του περιορισμού που γίνεται πρώτος ενεργός κατά μήκος της \tilde{p}_k είτε μέσω κανόνων βασισμένων στις εκτιμήσεις των πολλαπλασιαστών Lagrange.

Ορίζοντας, $\tilde{p} = p - p_k$ και αντικαθιστώντας για το p στη συνάρτηση κόστους προκύπτει:

$$\tilde{m}(\tilde{p}) = \frac{1}{2} \tilde{p}^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k \tilde{p} + g_k^T \tilde{p} + \rho_k \quad \text{όπου} \quad g_k = \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k p_k + \nabla f_k, \quad \rho_k = \frac{1}{2} p_k^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k p_k + \nabla f_k^T p_k.$$

Ο όρος ρ_k είναι ανεξάρτητος του \tilde{p} έτσι που η τετραγωνική συνάρτηση κόστους η οποία πρέπει να ελαχιστοποιηθεί στην k επανάληψη είναι $\tilde{m}(p) = \frac{1}{2} \tilde{p}^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k \tilde{p} + g_k^T \tilde{p}$. Από την άλλη μεριά, για κάθε $i \in W_k$, η τιμή $\nabla^T c_i(x_k) p$ δεν μεταβάλλεται κατά μήκος της λύσης \tilde{p}_k αν ικανοποιείται η σχέση:

$$\nabla^T c_i(x_k) \tilde{p}_k = 0, \quad i \in W_k$$

αφού $\nabla c_i^T(x_k)(p_k + a_k \tilde{p}_k) = \nabla^T c_i(x_k) p_k = -c_i(x_k)$, $\forall a_k$, άρα οι περιορισμοί ικανοποιούνται για κάθε a_k .

Με βάση όλα τα παραπάνω το προς επίλυση στην k επανάληψη υποπρόβλημα γράφεται ως:

$$\min_p \frac{1}{2} \tilde{p}^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k \tilde{p} + g^T \tilde{p}, \quad \nabla c_i(x_k)^T \tilde{p} = 0, \quad i \in W_k \quad (4.31)$$

Αν το $p = p_k + \tilde{p}_k$ ανήκει στο επιτρεπτό σύνολο σε σχέση με όλους τους περιορισμούς, τότε $p_{k+1} = p_k + \tilde{p}_k$ διαφορετικά $p_{k+1} = p_k + a_k \tilde{p}_k$ όπου a_k επιλέγεται να είναι το μεγαλύτερο μήκος βήματος στο διάστημα $[0, 1]$ για το οποίο όλοι οι περιορισμοί ικανοποιούνται και το οποίο προσδιορίζεται αποκλειστικά από τους περιορισμούς που δεν ανήκουν στο δοκιμαστικό σύνολο W_k ως εξής:

- Αν $\nabla c_i(x_k)^T \tilde{p} \geq 0$ για κάποιο $i \notin W_k$, τότε $\nabla c_i(x_k)^T (p_k + a_k \tilde{p}_k) \geq \nabla c_i(x_k)^T p_k \geq -c_i(x_k)$, $\forall a_k \geq 0$ έτσι που ο περιορισμός i θα ικανοποιείται.
- Αν $\nabla c_i(x_k)^T \tilde{p} < 0$ για κάποιο $i \notin W_k$, τότε $\nabla c_i(x_k)^T (p_k + a_k \tilde{p}_k) \geq -c_i(x_k)$ μόνο στη περίπτωση που

$$a_k \leq \frac{-c_i(x_k) - \nabla c_i(x_k)^T p_k}{\nabla c_i(x_k)^T \tilde{p}_k} \quad (4.32)$$

Η μείωση της αντικειμενικής συνάρτησης $m_k(\tilde{p})$ μεγιστοποιείται με παράλληλη ικανοποίηση των περιορισμών όταν το a_k επιλέγεται ως:

$$a_k = \min \left(1, \min_{\substack{i \notin W_k \\ \nabla c_i(x_k)^T \tilde{p}_k < 0}} \frac{-c_i(x_k) - \nabla c_i(x_k)^T p_k}{\nabla c_i(x_k)^T \tilde{p}_k} \right) \quad (4.33)$$

Οι περιορισμοί για τους οποίους επιτυγχάνεται το ελάχιστο μέσα στις παρενθέσεις στη σχέση (4.33) καλούνται περιορισμοί μπλοκαρίσματος (blocking constraints) και το ελάχιστο αυτό είναι το μέγιστο μήκος βήματος κατά μήκος της \tilde{p}_k που εφασφαλίζει ότι το επόμενο σημείο θα είναι επιτρεπτό.

- Αν $a_k < 1$, το σύνολο του επιτρεπτού συνόλου απαντάται πριν ολοκληρωθεί η κάθοδος στη κατεύθυνση \tilde{p}_k μέχρι το σημείο $p = p^*$ που αντιστοιχεί σε $a_k = 1$ (το βήμα κατά μήκος της \tilde{p}_k έχει μπλοκαριστεί από κάποιο περιορισμό $i \notin W_k$). Στο νέο σημείο $p_{k+1} = p_k + a_k \tilde{p}_k$ ο περιορισμός ο οποίος δεν ήταν ενεργός στο p_k καθίσταται ενεργός. Τότε κατασκευάζεται ένα νέο δοκιμαστικό σύνολο W_{k+1} προσθέτοντας αυτόν τον περιορισμό στο W_k και η διαδικασία επαναλαμβάνεται ώσπου να εξευρεθεί ένα σημείο p^* που ελαχιστοποιεί την συνάρτηση κόστους στο τρέχων δοκιμαστικό σύνολο W^* και οι αντίστοιχοι πολλαπλασιαστές Lagrange λ_i^* , $i \in W_k$.
- Αν $a_k = 1$ τότε $p_{k+1} = p_k + \tilde{p}_k = p^*$ οπότε στην επόμενη επανάληψη θα είναι $\tilde{p}_{k+1} = 0$ και τερματίζουμε ανάλογα με το πρόσιμο των πολλαπλασιαστών Lagrange.

Το υποπρόβλημα (4.31) έχει μια λύση $\tilde{p} = 0$ και από τις συνθήκες βελτίστου προκύπτει ότι:

$$\sum_{i \in W^*} \nabla c_i(x_k)^T \lambda_i^* = g_k = \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k p^* + \nabla f_k \quad (4.34)$$

Τα p^*, λ^* ικανοποιούν την συνθήκη KKT (4.30α) αν $\lambda_i^* = 0$ για $i \notin W^*$. Επιπλέον λόγω του επιβαλλόμενου ελέγχου στο a_k η κατεύθυνση p^* είναι επιτρεπτή αναφορικά με όλους τους

περιορισμούς έτσι που οι συνθήκες KKT (4.30β) και (4.30γ) ικανοποιούνται. Αναφορικά με το πρόσημο των πολλαπλασιαστών λ_i^* που αντιστοιχούν στους ανισωτικούς περιορισμούς του δοκιμαστικού συνόλου, δηλαδή για τους δείκτες $i \in W^* \cap \mathcal{I}$, αν είναι όλοι μη αρνητικοί, τότε η συνθήκη KKT (4.30δ) ικανοποιείται επίσης και συμπεραίνεται επομένως ότι το p^* είναι ένα σημείο KKT για το γενικό πρόβλημα (4.12). Αν απ' την άλλη μεριά, ένα ή περισσότερα από τα λ_i^* , $i \in W^* \cap \mathcal{I}$ είναι αρνητικό, η συνάρτηση κόστους $m(\cdot)$ μπορεί να μειωθεί παραλείποντας έναν από αυτούς τους περιορισμούς απ' το δοκιμαστικό σύνολο και εν συνεχεία ένα καινούργιο βήμα υπολογίζεται μέσω της επίλυσης ενός νέου υποπροβλήματος (4.12). Η στρατηγική αυτή παράγει μια κατεύθυνση έρευνας \tilde{p} στη νέα επανάληψη η οποία ανήκει στο επιτρεπτό σύνολο αναφορικά με τον περιορισμό που έχει παραληφθεί ([2], Θεώρημα 16.5, σελ. 470).

Στην πράξη συχνά επιλέγεται να παραληφθεί ο περιορισμός i , στον οποίο αντιστοιχεί ο πιο αρνητικός πολλαπλασιαστής λ_i^* , παρακεινούμενοι από το γεγονός ότι ο ρυθμός μείωσης στη συνάρτηση κόστους όταν ένας από τους περιορισμούς απαλείφεται είναι ανάλογος του μέτρου του πολλαπλασιαστή Lagrange για τον εν λόγω περιορισμό.

Τέλος αποδεικνύεται ότι οποτεδήποτε το \tilde{p}_k το οποίο λαμβάνεται από την (4.31) είναι διαφορετικό του μηδενός και ικανοποιεί τις ικανές συνθήκες 2^{ης} τάξης για το τρέχων δοκιμαστικό σύνολο, η συνάρτηση κόστους $m(\cdot)$ είναι αυστηρά φθίνουσα κατά μήκος της κατεύθυνσης \tilde{p}_k ([2], Θεώρημα 16.6, σελ. 471) και επομένως όταν η μήτρα $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k$ είναι θετικά ορισμένη – αυστηρά κυρτή περίπτωση – οι ικανές συνθήκες δεύτερης τάξης ικανοποιούνται για κάθε $\tilde{p}_k \neq 0$.

Η μέθοδος ενεργού συνόλου περιγράφεται από τον αλγόριθμο 4.2 που ακολουθεί ([2], Αλγόριθμος 16.3, σελ. 472).

Αλγόριθμος 4.2 (Μέθοδος ενεργού συνόλου)

Compute a feasible starting point p_o and set W_o

For $k=0,1,2,\dots$

Solve (4.31) to find \tilde{p}_k

if $\tilde{p}_k=0$: Compute λ_i^* that satisfy (4.34) with $W^*=W_k$

if $\lambda_i^* \geq 0, \forall i \in W_k \cap \mathcal{I}$: set solution $p^*=p_k$

else: find index $i \in W_k \cap \mathcal{I}$ in which corresponds the most negative Multiplier λ_i^*

Set $W_{k+1}=W_k \setminus \{i\}$ and $p_{k+1}=p_k$

else ($\tilde{p}_k \neq 0$): compute a_k from (4.33) and set $p_{k+1}=p_k+a_k\tilde{p}_k$

if there are blocking constraints obtain W_{k+1} by adding one of these constraints to W_k .

else: set $W_{k+1}=W_k$.

end (for).

4.4 Η μήτρα Hessian του τετραγωνικού μοντέλου

Στη πράξη οι μέθοδοι SQP πρέπει να είναι ικανές να συγκλίνουν από απομακρυσμένα αρχικά σημεία αλλά και σε περιπτώσεις μη κυρτών προβλημάτων. Η αντιστοιχία μεταξύ των μεθόδων SQP και Newton βασίζεται στην επιλογή της μήτρας Hessian ως τη μήτρα Hessian της Λαγκρανζιανής συνάρτησης $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x_k, \lambda_k)$ η οποία οδηγεί σε τετραγωνική τάξη σύγκλισης υπό κατάλληλες (εύλογες) προϋποθέσεις. Ωστόσο, η μήτρα αυτή περιέχει δευτερες παραγώγους της συνάρτησης κόστους και των περιορισμών, πληροφορία που δεν είναι εύκολο να υπολογιστεί σε ορισμένες εφαρμογές. Επιπλέον μπορεί να μην είναι πάντα θετικά ορισμένη στον μηδενικό χώρο των περιορισμών.

Σε προβλήματα χωρίς περιορισμούς η επανάληπτική διαδικασία του Newton για την ελαχιστοποίηση μιας συνάρτησης f κάνει ένα βήμα προς το ελάχιστο του τετραγωνικού μοντέλου της συνάρτησης. Ωστόσο, η προσέγγιση αυτή είναι χρήσιμη κοντά στη λύση όπου η μήτρα Hessian $\nabla^2 f_k$ είναι κανονικά θετικά ορισμένη και η τετραγωνική συνάρτηση έχει ένα καλά ορισμένο σημείο ελαχίστου. Στην αντίθετη περίπτωση, οι μέθοδοι περιοχής εμπιστοσύνης διασφαλίζουν ότι η νέα επανάληψη είναι πάντα καλώς ορισμένη μέσω του περιορισμού του υποψήφιου βήματος p_k σε μια γειτονιά του σημείου αναφοράς και οι μέθοδοι αναζήτησης γραμμής απ' την άλλη μεριά, τροποποιούν τη μήτρα Hessian $\nabla^2 f_k$ έτσι ώστε να καταστεί θετικά ορισμένη - κυρίως μέσω της αντικατάστασής της από μια Quasi-Newton προσέγγιση B_k - με σκοπό να διασφαλιστεί ότι η κατεύθυνση έρευνας p_k αποτελεί μια κατεύθυνση καθόδου για την αντικειμενική συνάρτηση.

Παρόμοιες τεχνικές χρησιμοποιούνται και στις μεθόδους SQP. Αν η μήτρα $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k$ ικανοποιεί τη συνθήκη $p^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k p > 0, \forall p \neq 0$, τότε το πρόβλημα τετραγωνικού προγραμματισμού έχει μοναδική λύση. Στην αντίθετη περίπτωση οι μέθοδοι αναζήτησης γραμμής απ' τη μια μεριά αντικαθιστούν τη μήτρα $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k$ με μια θετικά ορισμένη προσεγγιστική μήτρα B_k και οι μέθοδοι περιοχής εμπιστοσύνης απ' την άλλη μεριά (οι οποίες δύνανται να χειριστούν αόριστες μήτρες Hessians), προσθέτουν έναν περιορισμό στο υποπρόβλημα περιορίζοντας το βήμα σε μια περιοχή στην οποία το μοντέλο θεωρείται αξιόπιστο. Επιπλοκές μπορεί να προκύψουν ωστόσο, αφού ο συνυπολογισμός του περιορισμού αυτού μπορεί να καταστήσει το υποπρόβλημα μη εφικτό (infeasible) στη πράξη.

4.4.1 Quasi-Newton προσεγγίσεις της πλήρους μήτρας Hessian.

Δεδομένου ότι οι τύποι ανανέωσης BFGS και SR1 έχουν αποδειχθεί αρκετά επιτυχημένοι σε προβλήματα βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς, εφαρμόζονται εξίσου καλά και στα πλαίσια της

μεθόδου SQP σε προβλήματα με περιορισμούς. Η διαδικασία ανανέωσης του πίνακα B_k κάνει χρήση των διανυσμάτων:

$$s_k = x_{k+1} - x_k, \quad y_k = \nabla_x \mathcal{L}(x_{k+1}, \lambda_{k+1}) - \nabla_x \mathcal{L}(x_k, \lambda_{k+1}) \quad (4.35)$$

και η νέα προσέγγιση B_{k+1} υπολογίζεται κάνοντας χρήση των τύπων BFGS και SR1 που δίνονται από τις σχέσεις (3.16) και (3.7) αντίστοιχα.

A. Η ανανέωση BFGS.

Αν η μήτρα $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k$ είναι θετικά ορισμένη στη περιοχή όπου λαμβάνει χώρα η ελαχιστοποίηση, η επαναληπτική διαδικασία θα συγκλίνει αποτελεσματικά και γρήγορα ακριβώς όπως και στη μέθοδο BFGS σε προβλήματα χωρίς περιορισμούς. Ωστόσο, αν η μήτρα $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k$ έχει αρνητικές ιδιοτιμές, τότε η προσέγγιση αυτής μέσω μιας θετικά ορισμένης μήτρας χρησιμοποιώντας τον τύπο BFGS μπορεί να είναι αναποτελεσματική αφού απαιτεί τα s_k, y_k να ικανοποιούν τη συνθήκη καμπυλότητας $s_k^T y_k > 0$, η οποία όμως ίσως και να μην διασφαλίζεται ακόμη και όταν οι επαναλήψεις λαμβάνουν χώρα κοντά στην λύση όταν τα s_k και y_k ορίζονται μέσω της σχέσης (4.35). Η δυσκολία αυτή ξεπερνιέται μέσω δύο στρατηγικών:

▪ Στρατηγική Παράλειψης (Skipping strategy).

Με τη τεχνική αυτή η ανανέωση BFGS παραλείπεται αν δεν ικανοποιείται η συνθήκη:

$$s_k^T y_k \geq \theta s_k^T B_k s_k, \quad \text{όπου } \theta > 0 \quad (\approx 10^{-2}) \quad (4.36)$$

Ωστόσο, παρόλο που η στρατηγική αυτή έχει εκτελεστεί ικανοποιητικά σε αρκετά προβλήματα, σε άλλα προβλήματα παρουσιάζει φτωχές επιδόσεις ή ακόμη και αποτυχία.

▪ Μετριασμένη BFGS Ανανέωση (Damped BFGS Updating).

Η τεχνική αυτή [17], είναι πιο δραστική και εξασφαλίζει ότι η ανανέωση είναι πάντα καλώς ορισμένη τροποποιώντας το y_k έτσι ώστε να διατηρείται η μήτρα B_k θετικά ορισμένη.

Δεδομένων των s_k και y_k μέσω της (4.35) έστω $\tau_k = \theta_k y_k + (1 - \theta_k) B_k s_k$, όπου το:

$$\theta_k = \begin{cases} 1 & , \text{ if } s_k^T y_k \geq 0.2 s_k^T B_k s_k \\ (0.8 s_k^T B_k s_k) / (s_k^T B_k s_k - s_k^T y_k) & , \text{ if } s_k^T y_k < 0.2 s_k^T B_k s_k \end{cases} \quad (4.37)$$

επιλέγεται να διατηρεί σε κάποιο βαθμό τη μήτρα B_k θετικά ορισμένη. Η ανανέωση B_k δίνεται από τον καθιερωμένο BFGS τύπο με το y_k αντικαταστημένο από το τ_k και εγγυάται ότι η μήτρα B_{k+1} είναι θετικά ορισμένη όταν $\theta_k \neq 1$ αφού:

$$s_k^T \tau_k = 0.2 s_k^T B_k s_k > 0$$

Μια τιμή για το θ_k με $\theta_k \in (0, 1)$ παράγει μια μήτρα η οποία παρεμβάλλει την τρέχουσα προσέγγιση $B_{k+1} = B_k$ ($\theta_k = 0$) και εκείνη την οποία παράγεται από τη μη τροποποιημένη ανανέωση BFGS ($\theta_k = 1$) – και η οποία είναι πιθανόν να παράγει μια αόριστη μήτρα – διασφαλίζοντας ότι η νέα προσέγγιση παραμένει αρκετά κοντά με την τρέχουσα B_k και έτσι να εξασφαλίζεται ότι η μήτρα είναι θετικά ορισμένη.

B. Η ανανέωση SR1.

Δεδομένου ότι η τεχνική μετριασμένης BFGS ανανέωσης αποτυγχάνει να διακπεραιώσει το πρόβλημα στη περίπτωση όπου η μήτρα $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k$ ίσως να μην είναι θετικά ορισμένη – και επομένως η μήτρα B_k να μην αποτελεί μια ακριβή προσέγγιση της $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k$ – η ανανέωση SR1 στα πλαίσια της μεθοδολογίας περιοχής εμπιστοσύνης αποδεικνύεται καταλληλότερη. Η ανανέωση SR1 επιτυγχάνεται μέσω της εφαρμογής του τύπου (3.7) με τα y_k και s_k ορισμένα μέσω της σχέσης (4.35), χρησιμοποιώντας τα αναγκαία μέτρα ασφάλειας. Αν η ανανέωση SR1 χρησιμοποιείται στο πλαίσιο των μεθόδων SQP με αναζήτηση γραμμής οι οποίες δεν μπορούν να χειριστούν αόριστες προσεγγίσεις της μήτρας Hessian, ο SR1 τύπος πρέπει να τροποποιηθεί, πιθανόν με την προσθήκη ενός αρκετά μεγάλου πολλαπλασίου του ταυτοτικού πίνακα.

4.4.2 Quasi – Newton προσεγγίσεις της απλοποιημένης μήτρας Hessian.

Η μέθοδος της απλοποιημένης μήτρας Hessian προσεγγίζει μόνο την απλοποιημένη μήτρα Hessian της Λανγκρανζιανής συνάρτησης $Z_k^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x_k, \lambda_k) Z_k$ παρακινούμενη από το γεγονός ότι η μήτρα αυτή είναι συνήθως θετικά ορισμένη κοντά στην λύση. Η μέθοδος αυτή αναλύεται για προβλήματα με ισωτικούς περιορισμούς δεδομένου ότι οι SQP μέθοδοι για το πλήρες πρόβλημα (4.11) κάνουν χρήση της μεθόδου μόνον αφού ένα υποπρόβλημα με ισωτικούς περιορισμούς έχει παραχθεί, παρουσιάζοντας επομένως το πλεονέκτημα του ότι η πληροφορία αναφορικά με τη μήτρα Hessian η οποία πρέπει να αποθηκευτεί είναι λιγότερη.

Η μέθοδος αυτή προκύπτει θεωρώντας τη διαδικασία υπολογισμού του βήματος ενός τετραγωνικού προβλήματος με ισωτικούς περιορισμούς μέσω της μεθόδου μηδενικού χώρου κάνοντας χρήση των εξισώσεων (4.25) και (4.29) αντίστοιχα:

$$(A_k Y_k) p_Y = -c_k \quad \text{και} \quad (Z_k^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k Z_k) p_Z = -Z_k^T \nabla f_k$$

Για την προσέγγιση της μήτρας $Z_k^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k Z_k$, έστω:

$$a_k p_k = x_{k+1} - x_k = a_k Z_k p_Z + a_k Y_k p_Y \quad (4.38)$$

είναι ένα βήμα από το (x_k, λ_k) στο (x_{k+1}, λ_{k+1}) .

Κάνοντας χρήση του Θεωρήματος Taylor (παράρτημα Π.1) και των πολλαπλασιαστών ελαχίστων τετραγώνων οι οποίοι δίνονται από τη σχέση $\lambda_{k+1}=(A_{k+1}A_{k+1}^T)^{-1}A_{k+1}\nabla f_{k+1}$ με σκοπό να γίνει χρήση της πιο πρόσφατης διαθέσιμης πληροφορίας αναφορικά με το διάνυσμα των κλίσεων, προκύπτει:

$$\nabla_{xx}^2\mathcal{L}(x_{k+1}, \lambda_{k+1})a_k p_k \approx \nabla_x \mathcal{L}(x_k + a_k p_k, \lambda_{k+1}) - \nabla_x \mathcal{L}(x_k, \lambda_{k+1})$$

Πολλαπλασιάζοντας εκατέρωθεν με Z_k^T και χρησιμοποιώντας την σχέση (4.38) προκύπτει ότι:

$$Z_k^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x_{k+1}, \lambda_{k+1}) Z_k a_k p_Z \approx -Z_k^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x_{k+1}, \lambda_{k+1}) Y_k a_k p_Y + Z_k^T [\nabla_x \mathcal{L}(x_k + a_k p_k, \lambda_{k+1}) - \nabla_x \mathcal{L}(x_k, \lambda_{k+1})]$$

Απαλλοίφοντας τον όρο $Z_k^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x_{k+1}, \lambda_{k+1}) Y_k a_k p_Y$ όπως και στη μέθοδο μηδενικού χώρου προκύπτει:

$$M_{k+1} s_k = y_k \quad (4.39)$$

όπου:

$$s_k = a_k p_Z \quad (4.40\alpha)$$

$$y_k = Z_k^T [\nabla_x \mathcal{L}(x_k + a_k p_k, \lambda_{k+1}) - \nabla_x \mathcal{L}(x_k, \lambda_{k+1})] \quad (4.40\beta)$$

Η νέα προσέγγιση M_{k+1} ορίζεται εφαρμόζοντας τον τύπο ανανέωσης BFGS και χρησιμοποιώντας τη σχέση (4.40) για τα s_k και y_k .

Ένα πλεονέκτημα της μεθόδου είναι το γεγονός ότι η απλοποιημένη μήτρα Hessian είναι πολύ πιο πιθανόν να είναι θετικά ορισμένη ακόμη και όταν η τρέχουσα επανάληψη δεν είναι κοντά στη λύση και έτσι ο μηχανισμός ασφάλειας στις υλοποιήσεις με τη μέθοδο αναζήτησης γραμμής θα απαιτείται λιγότερο συχνά. Το ότι η συνθήκη $y_k^T s_k > 0$ αναμένεται να ικανοποιείται κοντά στη λύση εξηγείται σύμφωνα με την ανάλυση που ακολουθεί. Παίρνοντας το s_k να είναι το πλήρες βήμα προκύπτει:

$$y_k^T s_k = y_k^T p_Z \quad (4.41)$$

Από τον ορισμό (4.40β) του y_k και το θεώρημα Taylor (παράρτημα Π.2) προκύπτει:

$$y_k = Z_k^T \tilde{W}_k p_k = Z_k^T \tilde{W}_k Z_k p_Z + Z_k^T \tilde{W}_k Y_k p_Y \quad \text{όπου} \quad \tilde{W}_k = \int_0^1 \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x_k + t p_k, \lambda_{k+1}) dt$$
 είναι η μέση μήτρα Hessian

της Λανγκρανζιανής συνάρτησης στη διάρκεια του βήματος p_k . Επακολουθεί από την (4.41) ότι:

$$y_k^T s_k = p_Z^T Z_k^T \tilde{W}_k Z_k p_Z + p_Z^T Z_k^T \tilde{W}_k Y_k p_Y \quad (4.42)$$

Ο πρώτος όρος του δεξιού μέλους της (4.42) είναι θετικά ορισμένος με την υπόθεση ότι ισχύουν οι ικανές συνθήκες 2^{ης} τάξης. Επιπρόσθετα, ο όρος αυτός θα επικρατήσει τελικά του δεύτερου όρου - ο οποίος είναι απροσδιόριστου προσίμου - αφού το p_Y συγκλίνει στο μηδέν γρηγορότερα από το p_Z , καταλήγοντας σε μια θετική τιμή του $y_k^T s_k$. Ωστόσο η ιδιότητα αυτή δεν είναι εγγυημένη ακόμη και αρκετά κοντά στη λύση και γι' αυτό το λόγο ο μηχανισμός ασφάλειας είναι αναγκαίος για την αποφυγή κακών Quasi-Newton ανανεώσεων. Στη περίπτωση αυτή, η παράλειψη της ανανέωσης όταν η συνθήκη (4.36) δεν διασφαλίζεται, είναι περισσότερο εύλογη στις μεθόδους της απλοποιημένης

μήτρα Hessian μιας και εμφανίζεται λιγότερο συχνά.

Υπάρχουν πολλές παραλλαγές της (4.40β) με παρόμοιες ιδιότητες. Μια ικανοποιητική προσέγγιση προτεινόμενη από τους Coleman και Conn [18] ορίζει το y_k με:

$$y_k = Z_k^T [\nabla_x \mathcal{L}(x_k + Z_k p_Z, \lambda_{k+1}) - \nabla_x \mathcal{L}(x_k, \lambda_{k+1})] \quad (4.43)$$

όπου το $y_k^T s_k = p_Z^T Z_k \tilde{W}_k Z_k p_Z$ με $\tilde{W}_k = \int_0^1 \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x_k + t p_Z, \lambda_{k+1}) dt$ εξασφαλίζεται να είναι θετικό κοντά στη λύση.

4.5 Συναρτήσεις αξίας.

Στη περίπτωση όπου ένας αλγόριθμος επίλυσης του μη γραμμικού προβλήματος παράγει ένα βήμα το οποίο μειώνει τη συνάρτηση κόστους αλλά διευρύνει τη παραβίαση των περιορισμών, οι συναρτήσεις αξίας (merit functions) αποτελούν μια διαδικασία για το αν το παραγόμενο βήμα θα πρέπει ή όχι να γίνει αποδεκτό. Σε έναν τυπικό αλγόριθμο βελτιστοποίησης με περιορισμούς ένα βήμα p θα γίνει αποδεκτό μόνο εάν οδηγεί σε ικανή μείωση της συνάρτησης αξίας.

Οι μέθοδοι SQP χρησιμοποιούν μια συνάρτηση αξίας προκειμένου να αποφανθούν αν και κατά πόσον ένα δοκιμαστικό βήμα θα πρέπει να γίνει αποδεκτό. Στις μεθοδολογίες αναζήτησης γραμμής η συνάρτηση αξίας ρυθμίζει το μέγεθος του βήματος, ενώ σε αυτές της περιοχής εμπιστοσύνης καθορίζει εάν το βήμα είναι ή όχι αποδεκτό ή απορριπτέο ή κατά πόσον η περιοχή εμπιστοσύνης θα πρέπει να προσαρμοστεί.

Σε προβλήματα βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς η αντικειμενική συνάρτηση αποτελεί τη συνηθισμένη επιλογή για τη συνάρτηση αξίας, όπως επίσης και σε μεθόδους βελτιστοποίησης προβλημάτων με περιορισμούς στις οποίες το αρχικό σημείο και όλες οι επόμενες επαναλήψεις ικανοποιούν όλους τους περιορισμούς του προβλήματος. Απ' την άλλη μεριά, σε αλγόριθμους οι οποίοι επιτρέπουν στις επαναλήψεις να παραβιάζουν τους περιορισμούς, η συνάρτηση αξίας στη περίπτωση αυτή συνδιάζει την αντικειμενική συνάρτηση με το μέτρο παραβίασης των περιορισμών.

4.5.1 Εισαγωγή.

Για το γενικό πρόβλημα βελτιστοποίησης με περιορισμούς:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \quad , \quad \begin{cases} c_i(x) = 0 & , \quad i \in \mathcal{E} = \{1, \dots, m_e\} \\ c_i(x) \geq 0 & , \quad i \in \mathcal{I} = \{m_e + 1, \dots, m\} \end{cases} \quad (4.44)$$

η συνάρτηση ποινής $\varphi(x)$ είναι μια συνάρτηση με την ιδιότητα ποινής $\varphi(x)=f(x)$ για όλα τα σημεία του επιτρεπτού συνόλου του προβλήματος και επίσης η $\varphi(x)$ είναι αρκετά μεγαλύτερη από την $f(x)$ όταν οι παραβιάσεις των περιορισμών είναι μεγάλες. Για τον προσδιορισμό του βαθμού παραβίασης των περιορισμών ορίζεται η συνάρτηση παραβίασης των περιορισμών $c^\#(x)=[c_1^\#(x), \dots, c_m^\#(x)]^T$ ως:

$$\begin{cases} c_i^\#(x) = c_i(x) & , i \in \mathcal{E} \\ c_i^\#(x) = \max\{-c_i(x), 0\} & , i \in \mathcal{I} \end{cases} \quad (4.45)$$

Προφανώς, για κάθε περιορισμό η συνάρτηση παραβίασης του περιορισμού είναι μη μηδενική όταν ο αντίστοιχος περιορισμός παραβιάζεται και μηδενική όταν ο αντίστοιχος περιορισμός ικανοποιείται.

Η συνάρτηση ποινής δίνεται ως το άθροισμα της αντικειμενικής συνάρτησης και ενός όρου ποινής:

$$\varphi(x) = f(x) + h(c^\#(x)) \quad (4.46)$$

όπου ο όρος ποινής $h(c^\#(x))$ είναι μια συνάρτηση στον R^m και ικανοποιεί τις ιδιότητες:

$$h(0) = 0 \quad , \quad \lim_{\|c\| \rightarrow \infty} h(c) = +\infty \quad (4.47)$$

Η πρώτη συνάρτηση ποινής είναι η τετραγωνική η συνάρτηση ποινής που ορίζεται ως:

$$\varphi(x, \mu) = f(x) + \mu \|c^\#(x)\|_2^2 \quad (4.48)$$

Η σταθερά $\mu > 0$ ονομάζεται παράμετρος ποινής και καθορίζει τη σημασία (το βάρος) με την οποία επιφορτίζεται η ικανοποίηση των περιορισμών σε σχέση με την ελαχιστοποίηση της συνάρτησης κόστους.

Είναι προφανές ότι η (4.48) είναι μια ειδική περίπτωση της (4.46) στην οποία $h(c) = \mu \|c^\#(x)\|_2^2$ και δεδομένου ότι για οποιαδήποτε νόρμα στον R^m και για κάθε $a > 0$ η συνάρτηση $h(c) = \mu \|c^\#(x)\|^a$ ικανοποιεί την (4.47), μπορεί να οριστεί μια κλάση συναρτήσεων ποινής ως εξής:

$$\varphi(x, \mu) = f(x) + \mu \|c^\#(x)\|^a \quad (4.49)$$

Τυπικά η (4.48) γράφεται συχνά και ως:

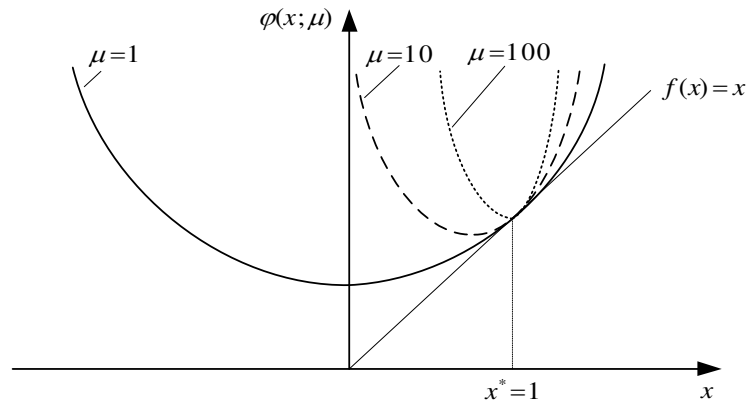
$$\varphi(x, \mu) = f(x) + \frac{1}{2} \mu \|c^\#(x)\|^2 = f(x) + \frac{1}{2} \mu [c^\#(x)]^T c^\#(x) = f(x) + \frac{1}{2} \mu \sum_{i=1}^{m_e} c_i^2(x) + \frac{1}{2} \mu \sum_{i=m_e+1}^m [c_i^\#(x)]^2 \quad (4.50)$$

Ορισμός 4.1

Μια συνάρτηση ποινής $\varphi(x, \mu)$ είναι ακριβής, αν υπάρχει θετική σταθερά μ^* τέτοια ώστε για κάθε $\mu > \mu^*$ κάθε τοπική λύση του μη γραμμικού προβλήματος (4.11) είναι τοπικό ελάχιστο της $\varphi(x, \mu)$.

Η παραπάνω ιδιότητα μιας συνάρτησης ποινής είναι μία επιθυμητή ιδιότητα επειδή καθιστά την εκτέλεση του αλγόριθμου λιγότερο εξαρτημένη από την τεχνική ανανέωσης της παραμέτρου ποινής. Η τετραγωνική συνάρτηση ποινής δεν είναι ακριβής μιας και το ελάχιστο αυτής δεν είναι γενικά το

ίδιο με τη λύση x^* του μη γραμμικού προβλήματος και επιχειρεί να δημιουργήσει ένα τοπικό ελάχιστο στο x^* καθώς $\mu \rightarrow \infty$. Ένα παράδειγμα δίνεται στο σχήμα 4.3 για το τετριμμένο πρόβλημα $\min_{x \in \mathbb{R}^n} x, x-1=0$ με λύση $x^*=1$, όπου διαφαίνονται κάποιες γραφικές παραστάσεις της συνάρτησης ποινής $\varphi(x, \mu) = x + \frac{1}{2} \mu (x-1)^2$ για το εν λόγω πρόβλημα. Παρατηρείται ότι το x^* είναι ένα οριακό σημείο της ακολουθίας των σημείων $\{x_k\}$ που ελαχιστοποιούν την $\varphi(x, \mu_k)$ καθώς $\mu_k \rightarrow \infty$.



Σχήμα 4.3 Η τετραγωνική συνάρτηση ποινής για το τετριμμένο πρόβλημα $\min_{x \in \mathbb{R}^n} x, x-1=0$.

Η παραπάνω ιδιότητα της τετραγωνικής συνάρτησης ποινής για ένα πρόβλημα με περιορισμούς μπορεί να αποδειχθεί, αλλά εξιδανικεύεται κατά το ότι υποθέτει μια ακριβή ελαχιστοποίηση της συνάρτησης ποινής ([2], Θεώρημα 17.1, σελ. 502). Ωστόσο, ανάλογα αποτελέσματα παράγονται και σε μια μη ακριβή (αλλά αυξημένης ακρίβειας) ελαχιστοποίηση της $\varphi(\cdot, \mu_k)$ σύμφωνα με το ακόλουθο θεώρημα για ένα πρόβλημα ισωτικών περιορισμών.

Θεώρημα 4.3 ([2], Θεώρημα 17.2, σελ. 503).

Έστω ότι $\forall k, \|\nabla_x \varphi(x, \mu_k)\| \leq \tau_k$ με $\tau_k \rightarrow 0$ και ότι $\mu_k \rightarrow \infty$ και το x_k λαμβάνεται αν ικανοποιείται η ανισότητα $\|\nabla_x \varphi(x, \mu_k)\| \leq \tau_k$. Τότε, αν ένα οριακό σημείο x^* της ακολουθίας $\{x_k\}$ ανήκει στο επιτρεπτό σύνολο και οι κλίσεις $\nabla c_i(x^*)$ των περιορισμών είναι γραμμικά ανεξάρτητες, το x^* είναι σημείο KKT του προβλήματος ισωτικών περιορισμών. Επιπρόσθετα για αυτά τα σημεία, για οποιαδήποτε υπακολουθία \mathcal{K} τέτοια ώστε $\lim_{k \in \mathcal{K}} x_k = x^*$ ισχύει: $\lim_{k \in \mathcal{K}} [-\mu_k c_i(x_k)] = \lambda_i^*, \forall i \in \mathcal{E}$, όπου λ_i^* είναι το διάνυσμα πολλαπλασιαστών που ικανοποιεί τις συνθήκες KKT για το πρόβλημα.

Απόδειξη

$$\varphi(x_k, \mu_k) = f(x_k) + \frac{\mu}{2} \sum_{i \in \mathcal{E}} c_i^2(x_k) \Rightarrow \nabla_x \varphi(x_k, \mu_k) = \nabla f(x_k) + \sum_{i \in \mathcal{E}} \mu_k c_i(x_k) \nabla c_i(x_k) \quad (4.51)$$

$$\begin{aligned} \|\nabla f(x_k) + \sum_{i \in \mathcal{E}} \mu_k c_i(x_k) \nabla c_i(x_k)\| \leq \tau_k &\Rightarrow \mu_k \|\sum_{i \in \mathcal{E}} c_i(x_k) \nabla c_i(x_k)\| - \|\nabla f(x_k)\| \leq \tau_k \Rightarrow \\ &\Rightarrow \|\sum_{i \in \mathcal{E}} c_i(x_k) \nabla c_i(x_k)\| \leq \frac{1}{\mu_k} [\tau_k + \|\nabla f(x_k)\|] \end{aligned} \quad (4.52)$$

Αφού το x^* είναι ένα οριακό σημείο της ακολουθίας $\{x_k\}$ υπάρχει υπακολουθία \mathcal{K} τέτοια ώστε $\lim_{k \in \mathcal{K}} x_k = x^*$. Παίρνοντας το όριο στην (4.52) για $k \rightarrow \infty$ με $k \in \mathcal{K}$ το δεξιό μέλος προσεγγίζει το μηδέν και άρα $\sum_{i \in \mathcal{E}} c_i(x^*) \nabla c_i(x^*) = 0$. Αφού τα $\nabla c_i(x^*)$ είναι γραμμικά ανεξάρτητα διανύσματα προκύπτει ότι $c_i(x^*) = 0, \forall i \in \mathcal{E}$. Συνεπώς το x^* είναι σημείο του επιτρεπτού συνόλου, γεγονός που αντιστοιχεί στην δεύτερη συνθήκη ΚΚΤ.

Έστω ότι $A(x)^T = [\nabla c_i(x)]_{i \in \mathcal{E}}$ και το λ_k συμβολίζει το διάνυσμα $-\mu_k c(x_k)$. Έπεται από την (4.51) ότι:

$$A(x_k)^T \lambda_k = \nabla f(x_k) - \nabla \varphi(x_k; \mu_k) \quad (4.53)$$

Για κάθε $k \in \mathcal{K}$ αρκετά μεγάλα ο πίνακας $A(x_k)$ είναι πλήρους βαθμού, άρα ο πίνακας $A(x_k)A(x_k)^T$ είναι αντιστρέψιμος και έπεται από την (4.53) ότι:

$$A(x_k)A(x_k)^T \lambda_k = A(x_k)[\nabla f(x_k) - \nabla \varphi(x_k; \mu_k)] \Rightarrow \lim_{k \in \mathcal{K}, k \rightarrow \infty} \lambda_k = \lambda^* = [A(x^*)A(x^*)^T]^{-1} A(x^*) \nabla f(x^*) \quad (4.54)$$

Από την ανισότητα $\|\nabla \varphi(x_k; \mu_k)\| \leq \tau_k$ και παίρνοντας το όριο για $k \rightarrow \infty$ συνεπάγεται ότι $\lim_{k \rightarrow \infty} \|\nabla f(x_k) - A(x_k)^T \lambda_k\| \leq 0 \Rightarrow \nabla f(x^*) - A(x^*)^T \lambda^* = 0$ και έτσι το λ^* που δίνεται μέσω της σχέσης (4.53) ικανοποιεί και την πρώτη συνθήκη ΚΚΤ. Άρα το x^* είναι ένα σημείο ΚΚΤ για το πρόβλημα με μοναδικό διάνυσμα πολλαπλασιαστών Lagrange το λ^* .

□

Ακριβώς τα ίδια συμπεράσματα με τα παραπάνω προκύπτουν και για το πρόβλημα ανισωτικών περιορισμών αντικαθιστώντας τα $c_i(x_k)$ με $\min\{c_i(x_k), 0\}$.

4.5.2 Ακριβείς μη διαφορίσιμες συναρτήσεις ποινής.

Μιας δημοφιλής επιλογή για τη συνάρτηση αξίας για το πρόβλημα μη γραμμικού προγραμματισμού (4.11) είναι η συνάρτηση ποινής l_1 η οποία ορίζεται ως εξής:

$$\varphi_1(x; \mu) = f(x) + \mu \|c^\#(x)\|_1 = f(x) + \mu \sum_{i \in \mathcal{E}} |c_i(x)| + \mu \sum_{i \in \mathcal{I}} [c_i(x)]^\# \quad (4.55)$$

Η συνάρτηση ποινής $\varphi_1(x; \mu)$ δεν είναι διαφορίσιμη λόγω της παρουσίας της απολύτου τιμής και των συναρτήσεων $[\cdot]^\#$, αλλά είναι ακριβής σύμφωνα με το παρακάτω θεώρημα.

Θεώρημα 4.4 ([2], Θεώρημα 17.3, σελ. 507).

Έστω ότι το x^* είναι ένα αυστηρό τοπικό ελάχιστο του προβλήματος (4.11) στο οποίο οι αναγκαίες συνθήκες πρώτης τάξης ικανοποιούνται με πολλαπλασιαστές Lagrange λ_i^* , $i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}$. Τότε το x^* είναι ένα τοπικό ελάχιστο της συνάρτησης ποινής $\varphi(x; \mu)$ για κάθε $\mu > \mu^*$, με $\mu^* = \|\lambda_i^*\|_\infty = \max_{i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}} |\lambda_i^*|$.

Αν επιπρόσθετα ικανοποιούνται οι ικανές συνθήκες δεύτερης τάξης τότε το x^* είναι αυστηρό τοπικό ελάχιστο της συνάρτησης ποινής $\varphi(x; \mu)$.

□

Ακριβείς μη διαφορίσιμες συναρτήσεις ποινής ορίζονται σε σχέση και με άλλες νόρμες εκτός της l_1 ως εξής:

$$\varphi(x; \mu) = f(x) + \mu \|c_{\mathcal{E}}(x)\|_x + \mu \| [c_{\mathcal{I}}(x)]^\# \|_x \quad (4.56)$$

όπου $\|\cdot\|_x$ είναι οποιαδήποτε διανυσματική νόρμα και όλοι οι ισωτικοί και ανισωτικοί περιορισμοί έχουν ομαδοποιηθεί στις διανυσματικές συναρτήσεις $c_{\mathcal{E}}$ και $c_{\mathcal{I}}$ αντίστοιχα. Οι πιο συνηθισμένες νόρμες που χρησιμοποιούνται στην πράξη είναι οι l_1 , l_∞ και η l_2 (μη υψωμένη στο τεράγωνο, δηλαδή η παράγωγός της δεν ορίζεται στο x με $c(x)=0$). Οι θεωρητικές ιδιότητες που περιγράφηκαν για τη συνάρτηση ποινής l_1 επεκτείνονται και στην γενική κατηγορία (4.56).

Οι προαναφερθέντες μέχρι στιγμής συναρτήσεις ποινής πρέπει να μην είναι διαφορίσιμες για να είναι ακριβείς. Για την απόδειξη αυτής της ιδιότητας, έστω για λόγους απλότητας υπάρχει μόνο ένας ισωτικός περιορισμός $c_i(x)=0$ και έστω η συνάρτηση ποινής της μορφής:

$$\varphi(x; \mu) = f(x) + \mu h(c_i(x))$$

Υποθέτουμε αντιθέτως ότι η h είναι συνεχώς διαφορίσιμη. Αφού η συνάρτηση $h: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ ικανοποιεί την ιδιότητα $h(0)=0$ δηλαδή έχει ένα σημείο ελαχίστου στο μηδέν, προκύπτει ότι $\nabla h(0)=0$. Αν το x^* είναι τοπικό ελάχιστο του προβλήματος (4.1) τότε $c_i(x^*)=0$ και επομένως $\nabla h(c_i(x^*))=0$. Αν το x^* είναι τοπικό ελάχιστο της συνάρτησης ποινής $\varphi(x; \mu)$ προκύπτει επομένως ότι:

$$0 = \nabla f(x^*; \mu) = \nabla f(x^*) + \mu \nabla c_i(x^*) \nabla h(c_i(x^*)) = \nabla f(x^*)$$

Ωστόσο, δεν είναι γενικά αληθές ότι η κλίση της f μηδενίζεται στη λύση ενός προβλήματος βελτιστοποίησης με περιορισμούς, και άρα η αρχική υπόθεση ότι η συνάρτηση h είναι συνεχώς διαφορίσιμη είναι εσφαλμένη και η συνάρτηση ποινής $\varphi(\cdot; \mu)$ δεν μπορεί να είναι διαφορίσιμη.

4.5.3 Ακριβείς διαφορίσιμες συναρτήσεις ποινής.

Ο τρόπος με τον οποίο η τετραγωνική συνάρτηση ποινής χρησιμοποιείται για την επίλυση ενός

προβλήματος βελτιστοποίησης με ισωτικούς περιορισμούς, μπορεί να θεωρηθεί σαν μια προσπάθεια να δημιουργηθεί ένα τοπικό ελάχιστο στο x^* καθώς $\mu_k \rightarrow \infty$. Πράγματι όπως υποδεικνύει το θεώρημα 4.4, τα προσεγγιστικά σημεία ελαχίστου της $\varphi(x; \mu_k)$ δεν είναι σημεία του επιτρεπτού συνόλου, δηλαδή δεν ικανοποιούν ακριβώς τη συνθήκη $c_i(x)=0, i \in \mathcal{E}$, αλλά αντιθέτως είναι διαταραγμένα έτσι που:

$$c_i(x_k) \approx -\lambda_i^* / \mu_k, \forall i \in \mathcal{E}$$

Ωστόσο το x^* μπορεί να επιλεγθεί έτσι ώστε να ελαχιστοποιεί τη συνάρτηση $\varphi(x; \mu)$ για πεπερασμένο μ μεταβάλλοντας το σημείο αναφοράς του όρου ποινής, κάτι που εισηγείται τη χρήση της επαυξημένης Λανγκρανζιανής συνάρτησης:

$$L_A(x, \theta, \mu) = f(x) + \frac{1}{2} \sum_{i \in \mathcal{E}} \mu_i (c_i(x) - \theta_i)^2 = f(x) + \frac{1}{2} (c(x) - \theta)^T S (c(x) - \theta) \quad (4.57)$$

όπου $\theta, \mu \in R^m$, $S = \text{diag } \mu_i$ και οι παράμετροι θ_i αντιστοιχούν σε μετατοπίσεις του αρχικού σημείου. Εισάγοντας διαφορετικές παραμέτρους $\lambda_i = \theta_i \mu_i$, $i \in \mathcal{E}$ και αγνοώντας τον όρο $\frac{1}{2} \sum_{i \in \mathcal{E}} \mu_i \theta_i^2$ ο οποίος είναι ανεξάρτητος του x προκύπτει ότι:

$$L_A(x, \lambda; \mu) = f(x) - \sum_{i \in \mathcal{E}} \lambda_i c_i(x) + \frac{\mu}{2} \sum_{i \in \mathcal{E}} c_i^2(x) \quad (4.58)$$

Για την επαυξημένη Λανγκρανζιανή συνάρτηση ποινής ισχύει το ακόλουθο θεώρημα.

Θεώρημα 4.5 ([2], Θεώρημα 17.5, σελ. 517).

Έστω x^* μια τοπική λύση του προβλήματος ισωτικών περιορισμών στο οποίο οι κλίσεις των ενεργών περιορισμών είναι γραμμικά ανεξάρτητες, (ισχύει δηλαδή η συνθήκη LICQ) καθώς επίσης και οι ικανές συνθήκες δεύτερης τάξης ικανοποιούνται για $\lambda = \lambda^*$. Τότε υπάρχει μια οριακή τιμή $\bar{\mu}$ τέτοια ώστε $\forall \mu \geq \bar{\mu}$, το x^* είναι αυστηρό τοπικό ελάχιστο της $L_A(x, \lambda^*; \mu)$.

□

Λόγω του ότι η συνάρτηση $L_A(x, \lambda; \mu)$ μπορεί να προκύψει από τη Λανγκρανζιανή συνάρτηση του προβλήματος ισωτικών περιορισμών με την προσθήκη ενός όρου ποινής, αναφέρεται ως επαυξημένη Λανγκρανζιανή συνάρτηση.

Για το γενικό πρόβλημα με περιορισμούς, μια κατάλληλη τροποποίηση της (4.57) είναι η εξής:

$$L_A(x; \theta; \mu) = f(x) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^m \mu_i \left\{ [(c_i(x) - \theta_i)^{\#}]^2 - \theta_i^2 \right\} \quad (4.59)$$

όπου $a^{\#} = \min(a, 0)$. Ακριβώς όπως με τη σχέση (4.57) η συνάρτηση διασκευάζεται χρησιμοποιώντας τις παραμέτρους $\lambda_i = \theta_i \mu_i$ και παραλείποντας τους όρους οι οποίοι είναι ανεξάρτητοι του x και

προκύπτει ότι:

$$L_A(x; \theta; \mu) = f(x) + \sum_{i=1}^{m_e} \left[-\lambda_i c_i(x) + \frac{1}{2} \mu_i (c_i(x))^2 \right] + \sum_{i=m_e+1}^m \begin{cases} -\lambda_i c_i(x) + \frac{1}{2} \mu_i (c_i(x))^2 & , c_i(x) < \frac{\lambda_i}{\mu_i} \\ -\frac{1}{2} \frac{\lambda_i^2}{\mu_i} & , c_i(x) \geq \frac{\lambda_i}{\mu_i} \end{cases} \quad (4.60)$$

Για το πρόβλημα ισωτικών περιορισμών ($m_e=m$) η επαυξημένη Λαγκρανζιανή του Fletcher δίνεται από τη σχέση:

$$\varphi_F(x; \nu) = f(x) - \lambda(x)^T c(x) + \frac{1}{2} \sum_{i \in \mathcal{E}} \nu_i c_i(x)^2 \quad (4.61)$$

όπου $\lambda(x) = [A(x)A(x)^T]^{-1} A(x) \nabla f(x)$ είναι η λύση ελάχιστης νόρμας του προβλήματος ελαχίστων τετραγώνων: $\min_{\lambda \in R^m} \|\nabla f(x) - \sum_{i=1}^m \lambda_i \nabla c_i(x)\|^2$ και ν_i είναι οι παράμετροι ποινής.

4.5.4 Συναρτήσεις αξίας και επαναληπτικός τετραγωνικός προγραμματισμός.

Μια μεγάλη ποικιλία συναρτήσεων αξίας έχει χρησιμοποιηθεί σε συνεργασία με τις μεθόδους SQP. Η πρώτη συνάρτηση αξίας που χρησιμοποιήθηκε ήταν η μη διαφορίσιμη l_1 συνάρτηση ποινής [19]. Μια εναλλακτική συνάρτηση είναι η ακριβής και διαφορίσιμη συνάρτηση ποινής προτεινόμενη από τον Fletcher [20].

Είναι ουσιώδες, το βήμα που παράγεται από έναν αλγόριθμο SQP να ορίζει μία κατεύθυνση καθόδου για τη συνάρτηση αξίας φ που χρησιμοποιείται, δηλαδή η κατά κατεύθυνση παράγωγος $D(\varphi(x_k; \mu_k); p_k)$ της φ στη κατεύθυνση p_k (βλέπε παράρτημα, Π.6), πρέπει να είναι σημαντικά αρνητική. Γενικά, ένα δοκιμαστικό βήμα $x_k + a_k p_k$ ή $(x_k + p_k)$ το οποίο παράγεται από έναν αλγόριθμο αναζήτησης γραμμής ή έναν αλγόριθμο περιοχής εμπιστοσύνης, θα γίνει αποδεκτό αν οδηγεί σε σημαντική μείωση της συνάρτησης αξίας φ που χρησιμοποιείται. Πιο συγκεκριμένα σε έναν αλγόριθμο αναζήτησης γραμμής, ένας τρόπος ορισμού αυτής της σκέψης είναι ανάλογος με τις συνθήκες Wolfe που εφαρμόζονται σε προβλήματα χωρίς περιορισμούς:

$$f(x_k + a_k p_k) \leq f(x_k) + c_1 a_k \nabla f_k^T p_k$$

όπου η κατεύθυνση έρευνας p_k αποτελεί μια κατεύθυνση μείωσης. Για τον λόγο αυτό, σε μια μέθοδο αναζήτησης γραμμής, η συνθήκη επαρκούς μείωσης απαιτεί το μήκος βήματος $a_k > 0$ να είναι αρκετά μικρό έτσι ώστε να ικανοποιείται η ανισότητα

$$\varphi(x_k + a_k p_k; \mu_k) \leq \varphi(x_k; \mu_k) + \eta a_k D(\varphi(x_k; \mu_k); p_k) \quad , \quad \eta \in (0,1) \quad (4.62)$$

υπό την προϋπόθεση ότι το p_k είναι μια κατεύθυνση καθόδου.

Οι μέθοδοι περιοχής εμπιστοσύνης κάνουν χρήση ενός τετραγωνικού μοντέλου $q(p)$ για την εκτίμηση της τιμής της συνάρτησης αξίας φ μετά από ένα βήμα p . Για τον λόγο αυτό, ένα παραγόμενο δοκιμαστικό βήμα $x_k + p_k$ θα γίνει αποδεκτό αν ικανοποιείται η ακόλουθη συνθήκη επαρκούς μείωσης, η οποία εκφράζεται σε σχέση με τη μείωση αυτού του μοντέλου:

$$\varphi(x_k + p_k; \mu_k) \leq \varphi(x_k; \mu_k) - \eta(q(0) - q(p_k)) \quad , \quad \eta \in (0,1) \quad (4.63)$$

Στη σχέση (4.63) ο όρος μέσα στις παρενθέσεις είναι θετικός δεδομένου ότι το βήμα υπολογίζεται έτσι ώστε να μειώνει την τιμή του μοντέλου q .

A. Η συνάρτηση αξίας l_1 .

Η συνάρτηση αξίας l_1 για το πρόβλημα ισωτικών περιορισμών ορίζεται ως εξής:

$$\varphi_l(x; \mu) = f(x) + \mu \|c(x)\|_1$$

η οποία δεν είναι διαφορίσιμη παντού (σε σημεία στα οποία μία ή περισσότερες συνιστώσες του διανύσματος $c(x)$ είναι μηδέν η κλίση δεν ορίζεται), ωστόσο έχει πάντα κατά κατεύθυνση παράγωγο.

Η συνθήκη μείωσης $D(\varphi_l(x_k; \mu_k); p_k) \leq 0$ εξασφαλίζεται όταν η παράμετρος ποινής μ επιλεγθεί αρκετά μεγάλη σύμφωνα με το ακόλουθο θεώρημα.

Θεώρημα 4.6 ([2], Θεώρημα 18.2, σελ. 541).

Εστω p_k και λ_{k+1} παράγονται από την επανάληψη SQP μέσω του συστήματος των εξισώσεων (4.8) για το πρόβλημα ισωτικών περιορισμών. Τότε:

$$D(\varphi_l(x_k; \mu_k); p_k) = \nabla f_k^T p_k - \mu \|c_k\|_1 \quad (4.64)$$

$$\text{Επιπλέον, } D(\varphi_l(x_k; \mu_k); p_k) \leq -p_k^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k^* p_k - (\mu - \|\lambda_{k+1}\|_\infty) \|c_k\|_1 \quad (4.65)$$

Απόδειξη

Εφαρμόζοντας το θεώρημα Taylor στις συναρτήσεις f και c_i , $i \in \mathcal{E}$ και χρησιμοποιώντας από το σύστημα εξισώσεων (4.8) τη σχέση $A_k p_k = -c_k$ ισχύει ότι:

$$\begin{aligned} \varphi_l(x_k + a p_k; \mu_k) - \varphi_l(x_k; \mu_k) &= f(x_k + a p_k) - f_k + \mu_k \|c(x_k + a p_k)\|_1 - \mu_k \|c_k\|_1 \\ &\leq a \nabla f_k^T p_k + b_1 a^2 \|p_k\|^2 + \mu_k \|c_k + a \nabla c_k p_k\|_1 - \mu_k \|c_k\|_1 \\ &= a \nabla f_k^T p_k + b_1 a^2 \|p_k\|^2 + \mu_k \|c_k + A_k p_k\|_1 - \mu_k \|c_k\|_1 \\ &\stackrel{A_k p_k = -c_k}{\leq} a \nabla f_k^T p_k + b_1 a^2 \|p_k\|^2 + \mu_k \|c_k + (1-a)\|_1 - \mu_k \|c_k\|_1 \end{aligned}$$

όπου η θετική σταθερά b_1 φράσει τους όρους δεύτερων παραγώγων των f και c_i .

Συνεπώς, θεωρώντας ότι $a \leq 1$ προκύπτει ότι:

$$\varphi_l(x_k + a p_k; \mu_k) - \varphi_l(x_k; \mu_k) \leq a [\nabla f_k^T p_k - \mu_k \|c_k\|_1] + a^2 b_1 \|p_k\|^2$$

Ομοίως λαμβάνεται και το κάτω φράγμα:

$$\varphi(x_k + ap_k; \mu_k) - \varphi(x_k; \mu_k) \geq a [\nabla f_k^T p_k - \mu_k \|c_k\|_1] - a^2 b_1 \|p_k\|^2$$

Παίρνοντας το όριο προκύπτει ότι:

$$D(\varphi(x_k; \mu_k); p_k) = \nabla f_k^T p_k - \mu_k \|c_k\|_1$$

Από την (4.8) ισχύει $\nabla f_k = -\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k p_k + A_k^T \lambda_{k+1}$ και άρα:

$$\begin{aligned} D(\varphi(x_k; \mu_k); p_k) &= -p_k^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k p_k + p_k^T A_k^T \lambda_{k+1} - \mu_k \|c_k\|_1 \\ &\stackrel{(4.8) A_k p_k = -c_k}{=} -p_k^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k p_k - c_k^T \lambda_{k+1} - \mu_k \|c_k\|_1 \end{aligned}$$

Ανακαλώντας το γεγονός ότι οι νόρμες l_1 και l_∞ είναι δυϊκές μεταξύ τους και άρα ισχύει η ανισότητα $-c_k^T \lambda_{k+1} \leq \|c_k\|_1 \|\lambda_{k+1}\|_\infty$ έπεται ότι:

$$D(\varphi(x_k; \mu_k); p_k) \leq -p_k^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k p_k - (\mu_k - \|\lambda_{k+1}\|_\infty) \|c_k\|_1.$$

□

Συνεπώς η κατεύθυνση έρευνας p_k θα αποτελεί μια κατεύθυνση καθόδου για τη συνάρτηση φ αν $p_k \neq 0$, ο πίνακας $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k$ είναι θετικά ορισμένος και επιπλέον ισχύει η συνθήκη $\mu_k > \|\lambda_{k+1}\|_\infty$.

Αν η ακολουθία $\{\lambda_{k+1}\}$ είναι φραγμένη, τότε υπάρχει μια ικανοποιητικά μεγάλη παράμετρος μ που ικανοποιεί την ανισότητα $\mu > \|\lambda_{k+1}\|_\infty \forall k$, ωστόσο η τιμή αυτή του μ δεν είναι από πριν γνωστή. Στην πράξη, αλλά και για τους σκοπούς της ανάλυσης, είναι επιθυμητό οι παράμετροι $\{\mu_k\}$ να επιλέγονται με τέτοιο τρόπο έτσι που να καθίστανται τελικά σταθερές καθώς οι επαναλήψεις συγκλίνουν στη λύση. Έτσι, γίνεται χρήση ενός κανόνα ανανέωσης ο οποίος αφήνει τη τρέχουσα τιμή του μ αμετάβλητη κάθε φορά που αυτή φαίνεται να είναι επαρκής, διαφορετικά την αυξάνει - αν είναι αναγκαίο - έτσι που να ικανοποιείται η ανισότητα $\mu_k > \|\lambda_{k+1}\|_\infty$ με κάποιο περιθώριο:

$$\mu_k = \begin{cases} \mu_{k-1} & , \text{ if } \mu_{k-1} \geq \|\lambda_{k+1}\|_\infty + \rho \\ \|\lambda_{k+1}\|_\infty + 2\rho & , \text{ διαφορετικά} \end{cases} \quad (4.66)$$

Μια εναλλακτική προσέγγιση η οποία δεν εξαρτάται από τους πολλαπλασιαστές Lagrange, απαιτεί η κατά κατεύθυνση παράγωγος να είναι αρνητική υπό την έννοια ότι:

$$D(\varphi(x_k; \mu_k); p_k) = \nabla f_k^T p_k - \mu_k \|c_k\|_1 \leq -\rho \mu_k \|c_k\|_1, \quad \rho \in (0,1)$$

Η ανισότητα αυτή διασφαλίζεται όταν:

$$\mu_k \geq \frac{\nabla f_k^T p_k}{(1-\rho) \|c_k\|_1} \quad (4.67)$$

Μια πιο δραστική στρατηγική, κατάλληλη τόσο για τις μεθόδους αναζήτησης γραμμής όσο και για τις μεθόδους περιοχής εμπιστοσύνης, λαμβάνει υπόψη την επίδραση του βήματος σε ένα μοντέλο μιας συνάρτησης αξίας. Ένα τετραγωνικό μοντέλο της συνάρτησης φ δίνεται ως εξής:

$$q_\mu(p_k) = f_k + \nabla f_k^T p_k + \frac{\sigma}{2} p_k^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k p_k + \mu_k m(p) \quad (4.68)$$

όπου σ είναι μια παράμετρος και $m(p) = \|c_k + A_k p_k\|_1$. Μετά τον υπολογισμό του βήματος p_k έτσι ώστε να οδηγήσει σε μείωση του μοντέλου της συνάρτησης αξίας, δηλαδή να ισχύει $q_\mu(0) - q_\mu(p_k) > 0$, η παράμετρος ποινής μ επιλέγεται αρκετά μεγάλη έτσι ώστε να ισχύει:

$$q_\mu(0) - q_\mu(p_k) \geq \rho \mu [m(0) - m(p_k)] \quad \text{για κάποιο } \rho \in (0, 1)$$

όπου $m(0) = \|c_k\|_1$ και $m(p_k) = \|c_k + A_k p_k\|_1 \stackrel{(4.8)}{=} 0$. Προκύπτει από την (4.68) και από τη σχέση $A_k p_k = -c_k$ ότι η παραπάνω ανισότητα ικανοποιείται για:

$$\mu \geq \frac{\nabla f_k^T p_k + \frac{\sigma}{2} p_k^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k p_k}{(1-\rho) \|c_k\|_1} \quad (4.69)$$

Αν η τιμή του μ από την προηγούμενη επανάληψη ικανοποιεί την ανισότητα (4.69) τότε παραμένει αμετάβλητη, διαφορετικά αυξάνεται έτσι ώστε να ικανοποιεί την ανισότητα με κάποιο περθώριο. Η σταθερά σ χρησιμοποιείται για τη διευθέτηση της περίπτωσης κατά την οποία η μήτρα $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k$ δεν είναι θετικά ορισμένη:

$$\sigma = \begin{cases} 1, & \text{if } p_k^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k p_k > 0 \\ 0, & \text{διαφορετικά} \end{cases}$$

Από τη σύγκριση της (4.67) με την (4.69) προκύπτει ότι η τελευταία στρατηγική επιλέγει μια μεγαλύτερη παράμετρο ποινής προσδίδοντας έτσι μεγαλύτερο βάρος στη μείωση των περιορισμών, το οποίο είναι επωφελές στη περίπτωση κατά την οποία η κατεύθυνση έρευνας p_k μειώνει τους περιορισμούς αλλά αυξάνει τη συνάρτηση κόστους.

Στη μέθοδο της απλοποιημένης μήτρας Hessian η κατεύθυνση έρευνας εκφράζεται ως $p_k = Z_k p_Z + Y_k p_Y = h_k + v_k$, όπου:

$$h_k = Z_k p_Z = -Z_k B_k^{-1} Z_k^T \nabla f_k \quad (4.70\alpha)$$

$$v_k = Y_k p_Y = -A_k [A_k^T A_k]^{-1} c_k \quad (4.70\beta)$$

Το διάνυσμα v_k είναι στον χώρο των στηλών $R(A)$ του πίνακα A_k και μπορεί να θεωρηθεί ως το βήμα ελάχιστης νόρμας στην εξίσωση $c(x) = 0$, ενώ το διάνυσμα h_k ανήκει στον μηδενικό χώρο του πίνακα A_k και αφήνει την τιμή του c αμετάβλητη. Η παραπάνω διάσπαση διαχωρίζει τη δράση στη συνάρτηση αξίας, των συνιστωσών του βήματος p_k .

Από την (4.70β) παίρνουμε ότι $\nabla f_k^T v_k = \hat{\lambda}_{k+1}^T c_k$ όπου $\hat{\lambda}_{k+1} = -[A_k^T A_k]^{-1} A_k^T \nabla f_k$ και δεδομένης της σχέσης $\nabla f_k^T p_k = \nabla f_k^T h_k + \nabla f_k^T v_k$ η κατά κατεύθυνση παράγωγος της $\varphi_1(x; \mu)$ είναι:

$$\begin{aligned} D(\varphi_1(x; \mu); p_k) &= \nabla f_k^T h_k - \mu \|c_k\|_1 + \nabla f_k^T v_k \\ &= \nabla f_k^T h_k - \mu \|c_k\|_1 + \hat{\lambda}_{k+1}^T c_k \end{aligned}$$

Από την (4.70α) προκύπτει ότι $\nabla f_k^T h_k = -\nabla f_k^T Z_k B_k^{-1} Z_k^T \nabla f_k$ και δεδομένου ότι οι πίνακες $\{B_k\}$ θα εξαναγκαστούν να είναι θετικά ορισμένοι, ο όρος αυτός είναι πάντα μικρότερος ή ίσος του μηδενός και άρα το p_k αποτελεί μια κατεύθυνση καθόδου για την $\varphi(x; \mu)$ αν και εφόσον $\mu_k > \|\hat{\lambda}_{k+1}\|_\infty$.

B. Η συνάρτηση αξίας του Fletcher.

Η συνάρτηση αξίας του Fletcher η οποία για το πρόβλημα ισωτικών περιορισμών έχει τη μορφή:

$$\varphi_F(x; \mu) = f(x) - \hat{\lambda}^T(x) c(x) + \frac{1}{2} \nu \|c(x)\|^2 \quad (4.71)$$

όπου $\|\cdot\|$ συμβολίζει την l_2 νόρμα και $\hat{\lambda}(x) = [A(x)^T A(x)]^{-1} A(x)^T \nabla f(x)$ είναι οι πολλαπλασιαστές Lagrange ελαχίστων τετραγώνων στο σημείο x , είναι διαφορίσιμη με κλίση:

$$\nabla \varphi_F(x_k; \nu_k) = \nabla f_k - A_k^T \hat{\lambda}_{k+1} - (\hat{\lambda}'_{k+1})^T c_k + \nu_k A_k^T c_k$$

Κάνοντας χρήση της σχέσης $A_k p_k = -c_k$ προκύπτει ότι:

$$\begin{aligned} \nabla \varphi_F(x_k; \nu_k) p_k &= \nabla f_k^T p_k + \hat{\lambda}_{k+1}^T c_k - c_k^T \hat{\lambda}'_{k+1} p_k - \nu_k \|c_k\|^2 \\ &\stackrel{Y_k = A_k^T}{=} \nabla f_k^T Z_k p_Z + \nabla f_k^T A_k^T p_Y + \hat{\lambda}_{k+1}^T c_k - c_k^T \hat{\lambda}'_{k+1} p_k - \nu_k \|c_k\|^2 \\ &= \nabla f_k^T Z_k p_Z - \hat{\lambda}_{k+1}^T c_k + \hat{\lambda}_{k+1}^T c_k - c_k^T \hat{\lambda}'_{k+1} p_k - \nu_k \|c_k\|^2 \\ &= \nabla f_k^T Z_k p_Z - c_k^T \hat{\lambda}'_{k+1} p_k - \nu_k \|c_k\|^2 \end{aligned}$$

Ομοίως, όπως και στη συνάρτηση αξίας l_1 , ο πρώτος όρος $\nabla f_k^T h_k = -\nabla f_k^T Z_k B_k^{-1} Z_k^T \nabla f_k$ είναι μη θετικός και είναι επίσης κατανοητό ότι για κάθε k το ν_k μπορεί να επιλεγθεί αρκετά μεγάλο έτσι που ο όρος $\nabla \varphi_F(x_k; \mu_k) p_k$ να είναι μικρότερος ή ίσος του μηδενός. Από την παραπάνω εξίσωση το p_k είναι μια κατεύθυνση καθόδου αν και μόνο αν:

$$\nu_k > \left[\frac{\nabla f_k^T Z_k p_Z - c_k^T \hat{\lambda}'_{k+1} p_k}{\|c_k\|^2} \right] + \rho \equiv \bar{\nu}_k + \rho \quad (4.72)$$

Λαμβάνοντας υπόψη από την (4.8) ότι $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k p_k = A_k^T \hat{\lambda}_{k+1} - \nabla f_k$ αλλά και ότι $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k p_k = \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k Z_k p_k + \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k Y_k p_Y$ και $A_k Z_k = 0$, η συνθήκη (4.72) μπορεί να γραφτεί ως εξής:

$$\nu_k > \left[\frac{-P_Z^T (Z_k^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k Z_k) p_Z - p_Y^T A_k \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k Z_k p_Z - c_k^T \hat{\lambda}'_{k+1} p_k}{\|c_k\|^2} \right] + \rho \equiv \bar{\nu}_k + \rho \quad (4.73)$$

Οι εξισώσεις (4.72) και (4.73) δίνουν μια υπολογίσιμη τιμή της παραμέτρου ν_k η οποία μπορεί να αυξηθεί αν είναι αναγκαίο σε κάθε επανάληψη. Για να καθίσταται εντέλει το ν_k σταθερό σε αναλογία με την (4.66) προτείνεται να επιλεγεται σε κάθε επανάληψη μέσω του κανόνα:

$$\nu_k = \begin{cases} \nu_{k-1} & , \text{ if } \nu_k \geq \bar{\nu}_k + \rho \\ \bar{\nu}_k + 2\rho & , \text{ διαφορετικά} \end{cases} \quad (4.74)$$

Γ. Πρόβλημα με ισωτικούς και ανισωτικούς περιορισμούς.

Για τη περίπτωση του γενικού προβλήματος με ισωτικούς και ανισωτικούς περιορισμούς οι αλγόριθμοι που απαιτούν τον υπολογισμό της παραγώγου $D(\varphi(x_k; \mu_k); p_k)$ συχνά χρησιμοποιούν ένα αρνητικό άνω φράγμα αυτής σύμφωνα με την πρόταση 4.8 που ακολουθεί και η απόδειξη της οποίας βασίζεται στο λήμμα 4.7 που επίσης ακολουθεί και το οποίο δηλώνει ότι η σύνθεση συναρτήσεων οι οποίες έχουν παράγωγο κατά κατεύθυνση, έχει επίσης παράγωγο κατά κατεύθυνση, υπό την προϋπόθεση ότι η δεύτερη συνάρτηση είναι Lipschitz συνεχής.

Λήμμα 4.7 ([6], Λήμμα 13.1, σελ. 198).

Έστω η συνάρτηση $\varphi: R^n \rightarrow R^m$ έχει κατά κατεύθυνση παράγωγο στο x στη κατεύθυνση $h \in R^n$ και ότι η συνάρτηση $\psi: R^m \rightarrow R^p$ είναι Lipschitz συνεχής σε μια περιοχή της $\varphi(x)$ και έχει παράγωγο κατά κατεύθυνση στο σημείο $\varphi(x)$ στην κατεύθυνση $D(\varphi(x); h)$. Τότε η σύνθεση $(\psi \circ \varphi)$ έχει παράγωγο κατά κατεύθυνση στο x στη κατεύθυνση h και ισχύει:

$$D((\psi \circ \varphi)(x); h) = D(\psi(\varphi(x)); D(\varphi(x); h)) \quad (4.75)$$

□

Πρόταση 4.8 ([6], Λήμμα 17.1, σελ. 293).

Αν το (p_k, λ_{k+1}) ικανοποιεί τις KKT συνθήκες βελτίστου του προβλήματος (4.12) τότε:

$$D(\varphi(x_k; \mu_k); p_k) \leq \nabla f_k^T p_k - \mu \|c_k^\#\|_1 = -p_k^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k p_k + \lambda_{k+1}^T c_k - \mu \|c_k^\#\|_1 = \Delta_k$$

Αν επιπρόσθετα $\mu \geq \|\lambda_{k+1}\|_\infty$, ισχύει ότι:

$$D(\varphi(x_k; \mu_k); p_k) \leq -p_k^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k p_k$$

Συνεπώς θα ισχύει ότι $D(\varphi(x_k; \mu_k); p_k) \leq 0$ αν $\mu \geq \|\lambda_{k+1}\|_\infty$ αν ο πίνακας $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k$ είναι θετικά ορισμένος και αν $p_k \neq 0$ δηλαδή το σημείο x_k δεν είναι στάσιμο σημείο του προβλήματος (4.11).

Απόδειξη

Δεδομένου ότι η νόρμα έχει παράγωγο κατά κατεύθυνση (όπως κάθε κυρτή συνάρτηση) η συνάρτηση $\|c_k^\#\|_1$ έχει παράγωγο κατά κατεύθυνση. Επομένως η κατά κατεύθυνση παράγωγος της $\varphi(x_k; \mu_k) = f_k + \mu \|c_k^\#\|_1$ δίνεται από τη σχέση:

$$D(\varphi(x_k; \mu_k); p_k) = D(f(x_k); p_k) + \mu D(\|\cdot\|_1 \circ c_k); p_k) \quad (4.76)$$

Από την (4.75) προκύπτει ότι:

$$\begin{aligned} D(\|\cdot\|_1 \circ c_k); p_k &= D(\|c(x_k)^\#\|_1; D(c(x_k); p_k)) \\ &= D(\|c(x_k)^\#\|_1; \nabla c(x_k)^T p_k) \\ &= \lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{t} (\|c_k\|_1 + t \nabla c_k^T p_k)^\# \|_1 - \|c_k^\#\|_1 \end{aligned} \quad (4.77)$$

Αλλά για $t \in (0,1]$:

$$\begin{aligned} \|(c_k + t \nabla c_k^T p_k)^\# \|_1 &= \|(1-t)c_k + t[c_k + \nabla c_k^T p_k]^\# \|_1 \\ &\leq (1-t)\|c_k^\# \|_1 + t\|[c_k + \nabla c_k^T p_k]^\# \|_1 \\ &= (1-t)\|c_k^\# \|_1 \end{aligned}$$

Από τις συνθήκες KKT του προβλήματος (4.12), οι περιορισμοί ικανοποιούνται αν $[c_k + \nabla c_k^T p_k]^\# = 0$.

Προκύπτει από την (4.77) ότι $D(\|\cdot\|^\# \circ c_k; p_k) \leq -\|c_k^\# \|_1$ και επομένως από την (4.76) έπεται ότι:

$$D(\varphi(x_k; \mu_k); p_k) \leq \nabla f_k^T p_k - \mu \|c_k^\# \|_1 \quad (4.78)$$

Όμως οι συνθήκες KKT του προβλήματος (4.12) είναι:

$$\nabla f_k + \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k p_k + \nabla c_k \lambda_{k+1} = 0 \quad (4.79\alpha)$$

$$c_i(x_k) + \nabla c_i(x_k)^T p_k = 0 \quad , \quad i \in \mathcal{E} \quad (4.79\beta)$$

$$c_i(x_k) + \nabla c_i(x_k)^T p_k \geq 0 \quad , \quad i \in \mathcal{I} \quad (4.79\gamma)$$

$$(\lambda_{k+1})_i \geq 0 \quad , \quad i \in \mathcal{I} \quad (4.79\delta)$$

$$(\lambda_{k+1})_i (c_i(x_k) + \nabla c_i(x_k)^T p_k) = 0 \quad , \quad i \in \mathcal{I} \quad (4.79\epsilon)$$

Συνεπώς από την (4.78) κάνοντας χρήση των (4.79α), (4.79β) και (4.79ε) συνεπάγεται ότι:

$$\begin{aligned} D(\varphi(x_k; \mu_k); p_k) &\leq \nabla f_k^T p_k - \mu \|c_k^\# \|_1 \\ &\stackrel{(4.79\alpha)}{=} -p_k^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k p_k - \lambda_{k+1}^T \nabla c_k^T p_k - \mu \|c_k^\# \|_1 \\ &\stackrel{(4.79\beta,\epsilon)}{=} -p_k^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k p_k + \lambda_{k+1}^T c_k - \mu \|c_k^\# \|_1 \stackrel{def}{=} \Delta_k \end{aligned} \quad (4.80)$$

Ισχύει επίσης ότι:

$$\lambda_{k+1}^T c_k - \mu \|c_k^\# \|_1 \leq \lambda_{k+1}^T c_k^\# - \mu \|c_k^\# \|_1 \quad (4.81)$$

Από τη γενικευμένη ανισότητα Cauchy – Schwarz: $\lambda_{k+1}^T c_k^\# \leq \|\lambda_{k+1}\|_\infty \|c_k^\# \|_1$ και η (4.81) γίνεται:

$$\lambda_{k+1}^T c_k - \mu \|c_k^\# \|_1 \leq (\|\lambda_{k+1}\|_\infty - \mu) \|c_k^\# \|_1$$

Επομένως αν $\mu \geq \|\lambda_{k+1}\|_\infty$ προκύπτει από την (4.80) ότι:

$$D(\varphi(x_k; \mu_k); p_k) \leq -p_k^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k p_k$$

Άρα, $D(\varphi(x_k; \mu_k); p_k) < 0$ αν $\mu \geq \|\lambda_{k+1}\|_\infty$ ο πίνακας $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k$ είναι θετικά ορισμένος και $p_k \neq 0$.

□

4.6 Επαναληπτικός τετραγωνικός προγραμματισμός με αναζήτηση γραμμής.

Σε προβλήματα με περιορισμούς μπορεί να συμβεί να μην υπάρχουν επιτρεπτά σημεία (feasible points) Στη περίπτωση αυτή οι περιορισμοί λέγονται ασύμβατοι (inconsistent constraints) και το πρόβλημα λέμε ότι είναι μη εφικτό (infeasible problem). Μια συνήθης δυσκολία στις μεθόδους

τετραγωνικού προγραμματισμού με αναζήτηση γραμμής είναι το γεγονός ότι η γραμμικοποίηση των μη γραμμικών περιορισμών μπορεί να προκαλέσει ένα μη εφικτό υποπρόβλημα, ακόμη και όταν το αρχικό μη γραμμικό πρόβλημα είναι εφικτό. Στη περίπτωση αυτή ο αλγόριθμος δεν θα πρέπει να σταματήσει και συνεπώς χρειάζεται να αναζητηθεί μια προσεγγιστική λύση του μη εφικτού υποπροβλήματος η οποία μπορεί να επιτευχθεί με κάποια τροποποίηση των υποπροβλημάτων.

Στη περίπτωση γραμμικών ισωτικών περιορισμών της μορφής $Ax=b$, $A \in R^{m \times n}$ υπάρχει πάντα μια επιτρεπτή περιοχή όταν $m \leq n$ και ο πίνακας A είναι πλήρους βαθμού και αν $m=n$ η επιτρεπτή αυτή περιοχή είναι το σημείο $A^{-1}b$. Αν απ' την άλλη μεριά ισχύει ότι $\text{rank}[A|b] > \text{rank}(A)$ δηλαδή υπάρχει ένα διάνυσμα y τέτοιο ώστε $A^T y = 0$ και $b^T y \neq 0$ τότε οι περιορισμοί είναι ασύμβατοι. Στη περίπτωση γραμμικών ανισωτικών περιορισμών της μορφής $Ax \geq b$ υπάρχει πάντα μια επιτρεπτή περιοχή όταν $\text{rank}(A) = m \leq n$, ενώ οι περιορισμοί είναι ασύμβατοι αν και μόνο αν υπάρχει ένα διάνυσμα $y \geq 0$ τέτοιο ώστε $A^T y = 0$ και $b^T y > 0$.

Στη περίπτωση τώρα μη γραμμικών περιορισμών δεν υπάρχει κάποια απλή ιδιότητα που να πληροφορεί κατά πόσο υπάρχει ένα επιτρεπτό σημείο, ωστόσο στους αλγόριθμους επαναληπτικού τετραγωνικού προγραμματισμού η γραμμική περίπτωση είναι εκείνη με την μεγαλύτερη σημασία δεδομένου ότι στους αλγόριθμους αυτούς οι περιορισμοί γραμμικοποιούνται.

4.6.1 Αντιμετώπιση ασύμβατων περιορισμών – l_1 ελαστική διαδικασία

Η προτεινόμενη στρατηγική συνδιάζει μια μέθοδο συνάρτησης ποινής και συμπεριλαμβάνει κάποιες επιπρόσθετες μεταβλητές (αποκαλούμενες ελαστικές) επιτρέποντας στους αρχικούς περιορισμούς να παραβιάζονται. Για το σκοπό αυτό το αρχικό πρόβλημα τροποποιείται έτσι που:

- Ένα επιτρεπτό σημείο υπάρχει πάντα.
- Αν το αρχικό πρόβλημα έχει μη κενό επιτρεπτό σύνολο προκύπτει η ίδια λύση.
- Το τροποποιημένο πρόβλημα δεν επιλύεται πιο δύσκολα από το αρχικό.

Αναφορικά με την εισαγωγή των ελαστικών μεταβλητών, μία έγνοια είναι ο αριθμός των περιορισμών και των μεταβλητών να κρατηθεί μικρός προς αποφυγήν περιττής εργασίας. Αν το μη γραμμικό πρόβλημα είναι της μορφής:

$$\min f(x), \quad c(x) \geq 0 \quad (4.82)$$

δηλαδή περιλαμβάνει μόνο ανισωτικούς περιορισμούς, ο προφανής τρόπος να επιτραπούν παραβιάσεις των περιορισμών είναι μέσω της αντικατάστασης:

$$c(x) \geq 0 \rightarrow c(x) + t \geq 0, \quad t \geq 0$$

όπου εισάγεται μία νέα μεταβλητή για κάθε περιορισμό.

Μετά την προσθήκη των μεταβλητών t στο πρόβλημα, θα ήταν ιδανικό οι μεταβλητές t να καταστούν μηδενικές και με αυτό τον τρόπο να παράσχουν μια λύση στο αρχικό πρόβλημα. Για την επίτευξη της παραπάνω ιδιότητας πρέπει να προστεθεί στην συνάρτηση κόστους ένας όρος ποινής. Δεδομένου ότι η συνάρτηση ποινής l_i είναι ακριβής, δηλαδή το σημείο που την ελαχιστοποιεί αποτελεί σημείο ελαχίστου και για το μη γραμμικό πρόβλημα με περιορισμούς για πεπερασμένη τιμή της παραμέτρου ποινής μ , για την αποφυγή της δυσκολίας που σχετίζεται με τους ασύμβατους περιορισμούς το μη γραμμικό πρόβλημα επαναδιατυπώνεται για μια θετική επιλογή της παραμέτρου μ ως το ακόλουθο l_i πρόβλημα ποινής:

$$\min_{x,t} f(x) + \mu \sum_{i \in \mathcal{I}} t_i = f(x) + \mu e^T t, \quad c_i(x) + t_i \geq 0, i \in \mathcal{I}, \quad t_i \geq 0 \quad (4.83)$$

Για το τροποποιημένο πρόβλημα (4.83) μπορεί πάντα να βρεθεί ένα επιτρεπτό σημείο για κάθε δεδομένο x μεταβάλλοντας τα στοιχεία του t έως ότου γίνουν αρκετά μεγάλα. Οι μεταβλητές t καλούνται ελαστικές εξαιτίας του ότι επιτρέπουν στους περιορισμούς να υπερβαίνουν τα όρια.

Λήμμα 4.9 ([21], Λήμμα 1, σελ. 20).

Έστω ότι το πρόβλημα (4.82) έχει μη κενό επιτρεπτό σύνολο. Αν (x^*, λ^*) είναι ένα σημείο KKT του προβλήματος (4.82), τότε το $(x^*, 0, \hat{\lambda}^*)$ είναι ένα σημείο KKT του προβλήματος (4.83) αν $\mu > \max \lambda_i^*$.

Απόδειξη

Οι συνθήκες βελτίστου πρώτης τάξης για το πρόβλημα (4.83) είναι:

$$\begin{pmatrix} \nabla c(x^*) & 0 \\ I & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda^* \\ \hat{\lambda}^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \nabla f(x^*) \\ \mu e \end{pmatrix}, \quad \hat{\lambda}^* \geq 0, \quad \lambda^* \geq 0$$

όπου οι πολλαπλασιαστές Lagrange λ^* αντιστοιχούν στους μη γραμμικούς περιορισμούς και οι πολλαπλασιαστές $\hat{\lambda}^*$ αντιστοιχούν στις μεταβλητές t . Προκύπτουν επομένως οι εξισώσεις:

$$\nabla c(x^*) \lambda^* = \nabla f(x^*) \quad (4.84\alpha)$$

$$\lambda^* + \hat{\lambda}^* = \mu e \quad (4.84\beta)$$

και τα λ^* , $\hat{\lambda}^*$ προσδιορίζονται μοναδικά όταν ο πίνακας $\nabla c(x^*)$ είναι πλήρους βαθμού. Οι πολλαπλασιαστές λ^* είναι ίσοι με τους βέλτιστους πολλαπλασιαστές του προβλήματος (4.82) μιας και η (4.84α) είναι η συνθήκη βελτίστου πρώτης τάξης για το πρόβλημα (4.82). Από την (4.84β) προκύπτει ότι $\hat{\lambda}^* = \mu e - \lambda^*$ και $\hat{\lambda}^* \geq 0$ όταν $\mu \geq \lambda_{\max}^*$. Αν όλα τα $\hat{\lambda}^*$ είναι θετικά όλοι οι περιορισμοί του t πρέπει να είναι ενεργοί και συνεπώς $t^* = 0$.

□

Πόρισμα 4.10 ([21], Πόρισμα 2, σελ. 20).

Έστω ότι το πρόβλημα (4.82) είναι κυρτό και έχει μη κενό επιτρεπτό σύνολο. Αν το x^* είναι σημείο

ελαχίστου του προβλήματος (4.82), τότε το $(x^*, 0)$ είναι σημείο ελαχίστου του προβλήματος (4.83) όταν $\mu \geq \max_i \lambda_i^*$, όπου λ^* είναι οι πολλαπλασιαστές Lagrange του προβλήματος (4.82) στο x^* .

Απόδειξη

Προκύπτει άμεσα από το Λήμμα 4.9 και το γεγονός ότι για μια κυρτή συνάρτηση κάθε σημείο KKT είναι σημείο ελαχίστου. □

Στη περίπτωση ισωτικών περιορισμών υπάρχουν δύο βασικές στρατηγικές τροποποίησης των περιορισμών έτσι που να επιτρέπουν ελαστικότητα. Η προφανής ελαστική εκδοχή του περιορισμού $c(x)=0$ είναι $c(x)+w=0$ όπου το w μπορεί να έχει είτε θετικά είτε αρνητικά στοιχεία. Το λήμμα 4.9 γενικεύεται ευθέως για τη περίπτωση προβλημάτων με ισωτικούς περιορισμούς.

Μια αδυναμία αυτής της διατύπωσης είναι το γεγονός ότι η αλλαγή προσίμου στο w προκαλεί ασυνεχείς παραγώγου στη συνάρτηση ποινής l_1 η οποία είναι μη διαφορίσιμη (οι παράγωγοι δεν υπάρχουν όταν $c_i(x)=0$). Η δυσκολία αυτή μπορεί να αποφευχθεί με τη χρήση δύο μεταβλητών αντί μιας ως εξής:

$$\begin{cases} c_i(x) + w_i - v_i = 0, & i \in \mathcal{E} \\ v, w \geq 0 \end{cases}$$

Το γενικό μη γραμμικό πρόβλημα με ισωτικούς και ανισωτικούς περιορισμούς επαναδιατυπώνεται ως εξής:

$$\begin{aligned} \min_{x,w,v,t} f(x) + \mu \sum_{i \in \mathcal{E}} (v_i + w_i) + \mu \sum_{i \in \mathcal{I}} t_i &= f(x) + \mu e^T (v + w) + \mu e^T t \\ \begin{cases} c_i(x) = v_i - w_i = 0, & i \in \mathcal{E} \\ c_i(x) \geq -t_i, & i \in \mathcal{I} \\ v, w, t \geq 0 \end{cases} \end{aligned} \quad (4.85)$$

Το τετραγωνικό πρόβλημα που σχετίζεται με το πρόβλημα (4.85) έχει τη μορφή:

$$\begin{aligned} \min_{x,w,v,t} f(x) + \nabla f(x)^T p + \frac{1}{2} p^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L} p + \mu \sum_{i \in \mathcal{E}} (v_i + w_i) + \mu \sum_{i \in \mathcal{I}} t_i \\ \begin{cases} c_i(x) + \nabla c_i(x)^T p = v_i - w_i, & i \in \mathcal{E} \\ c_i(x) + \nabla c_i(x)^T p \geq -t_i, & i \in \mathcal{I} \\ v, w, t \geq 0 \end{cases} \end{aligned} \quad (4.86)$$

Μια προφανής λύση του προβλήματος (4.86) είναι:

$$p=0, t=0, w_i = \max\{0, c_i(x)\}, v_i = \max\{0, -c_i(x)\}$$

συνεπώς, το πρόβλημα (4.86) είναι πάντα συμβατό.

Αν το γενικό μη γραμμικό πρόβλημα:

$$\min f(x), \begin{cases} c_i(x) = 0, & i \in \mathcal{E} \\ c_i(x) \geq 0, & i \in \mathcal{I} \end{cases}$$

έχει μια λύση x^* στο οποίο οι κλίσεις των ενεργών περιορισμών είναι γραμμικά ανεξάρτητα διανύσματα και αν η παράμετρος ποινής μ είναι ικανοποιητικά μεγάλη, τότε το x^* (μαζί με $v_i^* = w_i^* = 0, i \in \mathcal{E}$ και $t_i^* = 0, i \in \mathcal{I}$) είναι μια λύση του προβλήματος ποινής (4.85).

Ένας άλλος σημαντικός παράγοντας που πρέπει να ληφθεί υπόψη κατά τον σχεδιασμό των τροποποιήσεων του προβλήματος είναι ότι η νέα κατεύθυνση p που προκύπτει από το τροποποιημένο υποπρόβλημα τετραγωνικού προγραμματισμού, θα πρέπει να είναι μια κατεύθυνση καθόδου μιας ακριβούς συνάρτησης ποινής του μη γραμμικού προβλήματος. Η ιδιότητα αυτή της κατεύθυνσης p αποδεικνύεται με το ακόλουθο θεώρημα για την συνάρτηση ποινής:

$$\varphi(x; \mu) = f(x) + \sum_{i \in \mathcal{E}} \mu_i |c_i(x)| - \sum_{i \in \mathcal{I}} \mu_i [c_i(x)]^\#, \quad c_i(x)^\# = \min\{0, c_i(x)\} \quad (4.87)$$

Θεώρημα 4.11 ([14], Θεώρημα 4.1, σελ. 151).

Έστω f και c_i ($i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}$) είναι συνεχώς διαφορίσιμες στο x και B μια θετικά ορισμένη προσέγγιση της μήτρας Hessian της Λανγκρανζιανής. Αν το (p, v, w, t) είναι μια λύση ΚΚΤ του προβλήματος (4.86) με $p \neq 0$, τότε το p είναι μια κατεύθυνση καθόδου της $\varphi(x; \mu)$ στο x .

Απόδειξη

Έστω $\lambda_{\mathcal{E}}$ και $\lambda_{\mathcal{I}}$ οι πολλαπλασιαστές Lagrange που αντιστοιχούν στους ισωτικούς και ανισωτικούς περιορισμούς αντίστοιχα. Εξ' ορισμού, η κατά κατεύθυνση παράγωγος μιας συνάρτησης $f(x)$ δίνεται από τη σχέση:

$$D(f(x); p) \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{f(x + \varepsilon p) - f(x)}{\varepsilon} \quad (4.88)$$

και όταν η f είναι συνεχώς διαφορίσιμη σε μια περιοχή του x τότε:

$$D(f(x); p) = \nabla f(x)^T p \quad (4.89)$$

Η συνάρτηση αξίας l_1 η οποία δίνεται από τη σχέση (4.87) γράφεται ως εξής:

$$\varphi(x; \mu) = f(x) + \sum_{i \in \mathcal{E}_1} \mu_i |c_i(x)| + \sum_{i \in \mathcal{E}_2} \mu_i |c_i(x)| + \sum_{i \in \mathcal{E}_3} \mu_i |c_i(x)| + \sum_{i \in \mathcal{I}_1} \mu_{2i} c_i(x)^\# + \sum_{i \in \mathcal{I}_2} \mu_{2i} c_i(x)^\# + \sum_{i \in \mathcal{I}_3} \mu_{2i} c_i(x)^\#$$

όπου:

$$\mathcal{E}_1 \text{ (or } \mathcal{I}_1) = \{i : i \in \mathcal{E} \text{ (or } \mathcal{I}), c_i(x) > 0\}$$

$$\mathcal{E}_2 \text{ (or } \mathcal{I}_2) = \{i : i \in \mathcal{E} \text{ (or } \mathcal{I}), c_i(x) = 0\}$$

$$\mathcal{E}_3 \text{ (or } \mathcal{I}_3) = \{i : i \in \mathcal{E} \text{ (or } \mathcal{I}), c_i(x) < 0\}$$

Για ε αρκετά μικρό παίρνουμε:

$$\text{If } i \in \mathcal{E}_1 \Rightarrow c_i(x) > 0 \Rightarrow |c_i(x + \varepsilon p)| = |c_i(x) + \varepsilon p^T \nabla c_i(x + \varepsilon p)| = |c_i(x)| + \varepsilon p^T \nabla c_i(x + \varepsilon p)$$

$$\text{If } i \in \mathcal{E}_2 \Rightarrow c_i(x) = 0 \Rightarrow |c_i(x + \varepsilon p)| = \varepsilon |p^T \nabla c_i(x + \varepsilon p)|$$

$$\text{If } i \in \mathcal{E}_3 \Rightarrow c_i(x) < 0 \Rightarrow |c_i(x + \varepsilon p)| = |c_i(x) + \varepsilon p^T \nabla c_i(x + \varepsilon p)| = |c_i(x)| - \varepsilon p^T \nabla c_i(x + \varepsilon p)$$

$$\text{If } i \in \mathcal{I}_1 \Rightarrow c_i(x) > 0 \Rightarrow c_i(x)^\# = \min\{0, c_i(x)\} = 0$$

$$\text{If } i \in \mathcal{I}_2 \Rightarrow c_i(x) = 0 \Rightarrow c_i(x)^\# = \min\{0, c_i(x)\}$$

$$\text{If } i \in \mathcal{I}_3 \Rightarrow c_i(x) < 0 \Rightarrow c_i(x)^\# = \min\{0, c_i(x)\} = c_i(x)$$

Συνεπώς:

$$\begin{aligned} D(\varphi_1(x, \mu); p) = & \nabla f(x)^T p + \\ & \sum_{i \in \mathcal{E}_1} \mu_{i1} \nabla c_i(x)^T p + \sum_{i \in \mathcal{E}_2} \mu_{i1} |\nabla c_i(x)^T p| - \sum_{i \in \mathcal{E}_3} \mu_{i1} \nabla c_i(x)^T p + \\ & \sum_{i \in \mathcal{I}_2} \mu_{2i} \min\{0, \nabla c_i(x)^T p\} - \sum_{i \in \mathcal{I}_3} \mu_{2i} \nabla c_i(x)^T p \end{aligned} \quad (4.90)$$

Οι KKT συνθήκες βελτίστου για το πρόβλημα (4.86) είναι:

$$\nabla f(x) + Bp - \sum_{i \in \mathcal{E}} \lambda_{\varepsilon i} \nabla c_i(x) - \sum_{i \in \mathcal{I}} \lambda_{\mathcal{I}i} \nabla c_i(x) = 0$$

$$\mu_{i1} + \lambda_{\varepsilon i} = 0, \mu_{i1} - \lambda_{\varepsilon i} = 0, \mu_{2i} - \lambda_{\mathcal{I}i} = 0$$

$$\lambda_{\mathcal{I}i} \geq 0, \quad i \in \mathcal{I}$$

$$\lambda_{\mathcal{I}i} (c_i(x) + \nabla c_i(x)^T p + t_i) = 0, \quad i \in \mathcal{I}$$

$$\lambda_{\varepsilon i} (c_i(x) + \nabla c_i(x)^T p + w_i - v_i) = 0, \quad i \in \mathcal{E}$$

όπου οι πολλαπλασιαστές Lagrange που αντιστοιχούν στους ισωτικούς και στους ανισωτικούς περιορισμούς συμβολίζονται με λ_{ε} και $\lambda_{\mathcal{I}}$ αντίστοιχα. Επομένως η (4.90) γράφεται ως:

$$\begin{aligned} D(\varphi_1(x, \mu); p) = & -p^T Bp + \sum_{i \in \mathcal{E}} \lambda_{\varepsilon i} \nabla c_i(x)^T p + \sum_{i \in \mathcal{I}} \lambda_{\mathcal{I}i} \nabla c_i(x)^T p \\ & + \sum_{i \in \mathcal{E}_1} \mu_{i1} \nabla c_i(x)^T p + \sum_{i \in \mathcal{E}_2} \mu_{i1} |\nabla c_i(x)^T p| - \sum_{i \in \mathcal{E}_3} \mu_{i1} \nabla c_i(x)^T p \\ & + \sum_{i \in \mathcal{I}_2} \mu_{2i} \min\{0, \nabla c_i(x)^T p\} - \sum_{i \in \mathcal{I}_3} \mu_{2i} \nabla c_i(x)^T p \\ = & -p^T Bp + \sum_{i \in \mathcal{E}_1} (\lambda_{\varepsilon i} + \mu_{i1}) \nabla c_i(x)^T p + \sum_{i \in \mathcal{E}_2} \{\lambda_{\varepsilon i} \nabla c_i(x)^T p + \mu_{i1} |\nabla c_i(x)^T p|\} \\ & + \sum_{i \in \mathcal{E}_3} (\lambda_{\varepsilon i} - \mu_{i1}) \nabla c_i(x)^T p + \sum_{i \in \mathcal{I}_1} \lambda_{\mathcal{I}i} \nabla c_i(x)^T p + \\ & + \sum_{i \in \mathcal{I}_2} \{\lambda_{\mathcal{I}i} \nabla c_i(x)^T p + \mu_{2i} \min\{0, \nabla c_i(x)^T p\}\} + \sum_{i \in \mathcal{I}_3} (\lambda_{\mathcal{I}i} - \mu_{2i}) \nabla c_i(x)^T p \end{aligned}$$

- Αν $i \in \mathcal{I}_1$ και $\nabla c_i(x)^T p > 0$: Στην περίπτωση αυτή $c_i(x) > 0$

Προκύπτει ότι $t_i \geq -c_i(x) - \nabla c_i(x)^T p$. Όμως $t_i \geq 0$ και μιας και το t_i θα πρέπει να καταστεί όσο γίνεται μικρότερο $t_i = 0$. Επίσης από τη σχέση $\lambda_{\mathcal{I}i} (c_i(x) + \nabla c_i(x)^T p + t_i) = 0$ προκύπτει ότι $\lambda_{\mathcal{I}i} = 0$.

- Αν $i \in \mathcal{I}_2$ και $\nabla c_i(x)^T p > 0$: Στην περίπτωση αυτή $c_i(x) = 0$
Ακριβώς με τον ίδιο τρόπο προκύπτει ότι $t_i = 0$ και $\lambda_{\mathcal{I}_i} = 0$.

Συνεπώς, αν $i \in \mathcal{I}_1 \cup \mathcal{I}_2$ και $\nabla c_i(x)^T p > 0$, προκύπτει ότι $t_i = 0$ και $\lambda_{\mathcal{I}_i} = 0$.

- Αν $i \in \mathcal{I}_3$ και $\nabla c_i(x)^T p < 0$: Στην περίπτωση αυτή $c_i(x) < 0$.

Προκύπτει ότι $t_i \geq -c_i(x) - \nabla c_i(x)^T p$. Όμως $t_i \geq 0$ και μιας και το t_i θα πρέπει να καταστεί όσο γίνεται μικρότερο $t_i = -c_i(x) - \nabla c_i(x)^T p$. Επίσης από τις σχέσεις $\lambda_{\mathcal{I}_i}(c_i(x) + \nabla c_i(x)^T p + t_i) = 0$ και $\mu_{2i} - \lambda_{\mathcal{I}_i} = 0$ προκύπτει ότι $\lambda_{\mathcal{I}_i} = \mu_{2i}$.

- If $i \in \mathcal{I}_2$ and $\nabla c_i(x)^T p < 0$: Στην περίπτωση αυτή $c_i(x) = 0$.

Ακριβώς με τον ίδιο τρόπο προκύπτει ότι $t_i = -c_i(x) - \nabla c_i(x)^T p$ και $\lambda_{\mathcal{I}_i} = \mu_{2i}$.

Συνεπώς, αν $i \in \mathcal{I}_3 \cup \mathcal{I}_2$ και $\nabla c_i(x)^T p > 0$ προκύπτει ότι $t_i = -c_i(x) - \nabla c_i(x)^T p$ και $\lambda_{\mathcal{I}_i} = \mu_{2i}$.

- Αν $i \in \mathcal{E}_1$ και $\nabla c_i(x)^T p > 0$: Στην περίπτωση αυτή $c_i(x) > 0$.

Προκύπτει ότι η εξίσωση $c_i(x) + \nabla c_i(x)^T p = v_i - w_i$ ικανοποιείται για $v_i = c_i(x) + \nabla c_i(x)^T p \geq 0$ και $w_i = 0$ λαμβάνοντας υπόψη ότι το $v_i + w_i$ θα πρέπει να καταστεί όσο γίνεται μικρότερο.

Επίσης από τις σχέσεις $\lambda_{\mathcal{E}_i}(c_i(x) + \nabla c_i(x)^T p - v_i + w_i) = 0$ και $\mu_{1i} + \lambda_{\mathcal{E}_i} = 0$ προκύπτει ότι $\lambda_{\mathcal{E}_i} = -\mu_{1i}$.

- Αν $i \in \mathcal{E}_2$ και $\nabla c_i(x)^T p > 0$: Στην περίπτωση αυτή $c_i(x) = 0$.

Ακριβώς με τον ίδιο τρόπο προκύπτει ότι $v_i = c_i(x) + \nabla c_i(x)^T p$, $w_i = 0$ και $\lambda_{\mathcal{E}_i} = -\mu_{1i}$.

Συνεπώς, αν $i \in \mathcal{E}_1 \cup \mathcal{E}_2$ και $\nabla c_i(x)^T p > 0$ προκύπτει ότι $v_i = c_i(x) + \nabla c_i(x)^T p$, $w_i = 0$ και $\lambda_{\mathcal{E}_i} = -\mu_{1i}$.

- Αν $i \in \mathcal{E}_3$ και $\nabla c_i(x)^T p < 0$: Στην περίπτωση αυτή $c_i(x) < 0$.

Προκύπτει ότι η εξίσωση $c_i(x) + \nabla c_i(x)^T p = v_i - w_i$ ικανοποιείται για $w_i = -c_i(x) - \nabla c_i(x)^T p \geq 0$ και $v_i = 0$, λαμβάνοντας υπόψη ότι το $v_i + w_i$ θα πρέπει να καταστεί όσο γίνεται μικρότερο.

Επίσης από τις σχέσεις $\lambda_{\mathcal{E}_i}(c_i(x) + \nabla c_i(x)^T p - v_i + w_i) = 0$ και $\mu_{1i} - \lambda_{\mathcal{E}_i} = 0$ προκύπτει ότι $\lambda_{\mathcal{E}_i} = \mu_{1i}$.

- Αν $i \in \mathcal{E}_2$ και $\nabla c_i(x)^T p < 0$: Στην περίπτωση αυτή $c_i(x) = 0$.

Ακριβώς με τον ίδιο τρόπο προκύπτει ότι $w_i = -c_i(x) - \nabla c_i(x)^T p$, $v_i = 0$ και $\lambda_{\mathcal{E}_i} = \mu_{1i}$.

Συνεπώς, αν $i \in \mathcal{E}_3 \cup \mathcal{E}_2$ και $\nabla c_i(x)^T p < 0$ προκύπτει ότι $w_i = -c_i(x) - \nabla c_i(x)^T p$, $v_i = 0$ και $\lambda_{\mathcal{E}_i} = \mu_{1i}$.

Από τις παραπάνω σχέσεις συνεπάγεται ότι:

$$D(\varphi(x; \mu); p) \leq -p^T B p + \sum_{i \in \mathcal{E}^-} (\lambda_{\mathcal{E}_i} + \mu_{1i}) \nabla c_i(x)^T p + \sum_{i \in \mathcal{E}_3^+} (\lambda_{\mathcal{E}_i} - \mu_{1i}) \nabla c_i(x)^T p + \sum_{i \in \mathcal{I}_3^+} (\lambda_{\mathcal{I}_i} - \mu_{2i}) \nabla c_i(x)^T p$$

όπου \mathcal{E}^+ (or \mathcal{I}^+) και \mathcal{E}^- (or \mathcal{I}^-) συμβολίζουν αντίστοιχα τα σύνολα

$$\{i: i \in \mathcal{E} \text{ (or } \mathcal{I}), \nabla c_i(x)^T p > 0\} \text{ και } \{i: i \in \mathcal{E} \text{ (or } \mathcal{I}), \nabla c_i(x)^T p < 0\}$$

Από τις συνθήκες βελτίστου $\mu_{i_i} \geq |\lambda_{i_i}|$ και $\mu_{2i} \geq \lambda_{2i}$, $i \in \mathcal{I}$ προκύπτει ότι

$$D(\varphi(x; \mu); p) \leq -p^T B p < 0$$

□

4.6.2 Πρακτικός αλγόριθμος επαναληπτικού τετραγωνικού προγραμματισμού πλήρους μήτρας Hessian με αναζήτηση γραμμής.

Από όλα τα παραπάνω γίνεται αντιληπτό ότι υπάρχει μια μεγάλη ποικιλία μεθόδων επαναληπτικού τετραγωνικού προγραμματισμού με αναζήτηση γραμμής οι οποίες διαφέρουν στο τρόπο με τον οποίο υπολογίζεται η προσέγγιση της μήτρας Hessian, στην επιλογή της συνάρτησης αξίας, και στη διαδικασία προσδιορισμού της κατεύθυνσης έρευνα.

Ένας πρακτικός Quasi-Newton αλγόριθμος επαναληπτικού τετραγωνικού προγραμματισμού για την επίλυση του γενικού προβλήματος μη γραμμικού προγραμματισμού (4.11), ο οποίος συμπεριλαμβάνει τις μέχρι τώρα προαναφερόμενες ιδέες, περιγράφεται παρακάτω ([2], Αλγόριθμος 18.3, σελ. 545).

Για να διατηρηθεί η περιγραφή απλή θεωρείται ότι το υποπρόβλημα τετραγωνικού προγραμματισμού (4.12) έχει πάντα λύση στη πράξη. Τέλος υποθέτουμε ότι το πρόβλημα (4.12) είναι κυρτό έτσι που να μπορεί να λυθεί μέσω της μεθόδου ενεργού συνόλου για προβλήματα τετραγωνικού προγραμματισμού.

Αλγόριθμος 4.3 (Αλγόριθμος Πλήρους Μήτρας Hessian)

Choose $\eta \in (0, 1/2)$, $\tau \in (0, 1)$ and an initial pair (x_0, λ_0) .

Choose a symmetric positive definite Hessian approximation B_0 (or compute $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_0$)

Evaluate $f_0, \nabla f_0, c_0, \nabla c_0$.

For $k=0, 1, 2, \dots$

 Until a convergence test is satisfied:

 Compute p_k by solving (4.12) and let $\hat{\lambda}$ the corresponding multiplier

 Set $p_\lambda = \hat{\lambda} - \lambda_k$

 Choose μ_k to satisfy (4.69) with $\sigma=1$

 Set $a_k=1$

 While $\varphi(x_k + a_k p_k; \mu_k) > \varphi(x_k; \mu_k) + \eta a_k D(\varphi(x_k; \mu_k); p_k)$

 Reset $a_k = \tau_a a_k$ for some $\tau_a \in (0, \tau]$

 End (while)

 Set $x_{k+1} = x_k + a_k p_k$, $\lambda_{k+1} = \lambda_k + a_k p_\lambda$

 Evaluate $f_{k+1}, \nabla f_{k+1}, c_{k+1}, \nabla c_{k+1}$

 Set $s_k = a_k p_k$ and $y_k = \nabla_x \mathcal{L}(x_{k+1}, \lambda_{k+1}) - \nabla_x \mathcal{L}(x_k, \lambda_{k+1})$ and obtain B_{k+1} by updating B_k (or evaluate $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_{k+1}$)

End (for)

4.6.3 Πρακτικός αλγόριθμος επαναληπτικού τετραγωνικού προγραμματισμού απλοποιημένης μήτρας Hessian με αναζήτηση γραμμής.

Οι μέθοδοι της απλοποιημένης μήτρας Hessian παράγουν στο σημείο x_k μια κατεύθυνση έρευνας μέσω της επίλυσης του τετραγωνικού προβλήματος:

$$\min_p \nabla f_k^T p + \frac{1}{2} p^T Z_k M_k Z_k^T p, \quad c_k + A_k p = 0 \quad (4.91)$$

όπου M_k είναι ένας πίνακας που προσεγγίζει τον απλοποιημένο πίνακα Hessian της Λαγκρανζιανής συνάρτησης $Z_k^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x_k, \lambda_k) Z_k$ και ο οποίος ανανεώνεται μέσω του τύπου BFGS. Το γενικό πλαίσιο αυτού του είδους μεθόδων για τη περίπτωση προβλημάτων ισωτικών περιορισμών περιγράφεται με τον αλγόριθμο που ακολουθεί ([5], Αλγόριθμος 18.5, σελ. 550).

Αλγόριθμος 4.4 (Αλγόριθμος Απλοποιημένης Μήτρας Hessian–Πρόβλημα Ισωτικών Περιορισμών)

Choose $\eta \in (0, 1/2)$, $\tau \in (0, 1)$

Choose an initial pair (x_0, λ_0) and a symmetric positive definite matrix M_0

Compute Y_0 and Z_0 that span the range space of A_0^T and the null space A_0 of respectively

For $k=0, 1, 2, \dots$

Until a termination step is satisfied

Compute by solving the quadratic program (4.91), i.e.

Compute p_Y and p_Z by solving $(A_k Y_k) p_Y = -c_k$, $M_k p_Z = -Z_k^T \nabla f_k$

And set $p_k = Y_k p_Y + Z_k p_Z$

Choose μ_k to satisfy (4.66) if the l_1 merit function is used or ν_k to satisfy (4.74) if the Fletcher's merit function is used.

Set $a_k = 1$

While $\varphi(x_k + a_k p_k; \mu_k) > \varphi(x_k; \mu_k) + \eta a_k D(\varphi(x_k; \mu_k); p_k)$

Set $a_k = \tau_a a_k$ for some $\tau_a \in (0, \tau)$

End (while)

Set $x_{k+1} = x_k + a_k p_k$

Evaluate f_{k+1} , ∇f_{k+1} , c_{k+1} , A_{k+1}

Compute Y_{k+1} and Z_{k+1} that span the range space of A_{k+1}^T and the null space A_{k+1} of respectively

Compute $\lambda_{k+1} = -[Y_{k+1}^T A_{k+1}^T]^{-1} Y_{k+1}^T \nabla f_{k+1}$

Set $s_k = a_k p_Z$, $y_k = Z_k^T [\nabla_x \mathcal{L}(x_k + a_k p_k, \lambda_{k+1}) - \nabla_x \mathcal{L}(x_k, \lambda_{k+1})]$

If the update criterion is satisfied

Update M_k and obtain M_{k+1}

Else $M_{k+1} = M_k$

End (if)

End (for)

4.7 Θεωρία Σύγκλισης.

Για την εύρεση των συνθηκών που εγγυώνται την τοπική σύγκλιση των μεθόδων επαναληπτικού τετραγωνικού προγραμματισμού, καθώς επίσης και των συνθηκών που εξασφαλίζουν υπεργραμμική τάξη σύγκλισης, η συζήτηση περιορίζεται σε προβλήματα βελτιστοποίησης ισωτικών περιορισμών αλλά τα αποτελέσματα που παράγονται μπορούν να εφαρμοστούν σε αλγόριθμους προβλημάτων με ανισωτικούς περιορισμούς από τη στιγμή όπου το ενεργό σύνολο έχει καθοριστεί στην τελική βέλτιστη τιμή του. Για τους σκοπούς της ανάλυσης γίνονται οι παρακάτω υποθέσεις:

Υποθέσεις 4.2

Το σημείο x^* είναι τοπική λύση του προβλήματος ισωτικών περιορισμών:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x), c(x)=0 \quad (4.92)$$

στο οποίο ισχύουν οι ακόλουθες συνθήκες:

- Οι συναρτήσεις f , c είναι δύο φορές διαφορίσιμες σε μια γειτονιά του x^* με Lipschitz συνεχείς δεύτερες παραγώγους.
- Στο σημείο x^* ισχύει η συνθήκη LICQ, δηλαδή τα διανύσματα των κλίσεων των ενεργών περιορισμών του προβλήματος είναι γραμμικά ανεξάρτητα, συνεπώς ικανοποιούνται οι συνθήκες KKT του προβλήματος για κάποιο διάνυσμα πολλαπλασιαστών λ^* .
- Στο σημείο (x^*, λ^*) ισχύουν οι ικανές συνθήκες δεύτερης τάξης, δηλαδή:

$$p^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) p > 0, \forall p \neq 0 \text{ τέτοιο ώστε } A(x^*) p = 0$$

4.7.1 Αλγόριθμος με ακριβείς δεύτερες παραγώγους.

Για τη μέθοδο του επαναληπτικού τετραγωνικού προγραμματισμού η οποία χρησιμοποιεί ακριβείς δεύτερες παραγώγους, αποδεικνύεται τετραγωνική σύγκλιση της ακολουθίας $\{(x_k, \lambda_k)\}$ με την βοήθεια των παρακάτω αποτελεσμάτων.

Λήμμα 4.12 ([4], Λήμμα 2.3.3, σελ. 58).

Έστω M ένας $n \times n$ πίνακας με $\|M\| < 1$. Τότε ο $(I - M)^{-1}$ υπάρχει και $\|(I - M)^{-1}\| \leq \frac{1}{1 - \|M\|}$.

Απόδειξη

Αποδεικνύεται αρχικά ότι ο $(I - M)^{-1}$ υπάρχει και ότι $\|(I - M)^{-1}\| = \lim_{k \rightarrow \infty} \sum_{i=0}^k \|M^i\|$.

Έστω ότι ο $(I - M)$ είναι ιδιάζων. Τότε $\exists x \in \mathbb{R}^n, x \neq 0$ τέτοιο ώστε:

$$(I - M)x = 0 \Rightarrow x = Mx \Rightarrow \|x\| \leq \|M\| \|x\|$$

και δεδομένου ότι $\|M\| < 1$ συνεπάγεται ότι $\|x\| < \|x\|$ το οποίο αποτελεί αντίφαση. Συνεπώς, ο $(I-M)^{-1}$ υπάρχει.

Ισχύει επίσης ότι:

$$\left(\sum_{i=0}^k M^i\right)(I-M) = (I+M+\dots+M^k)(I-M) = I-M^{k+1}.$$

Επομένως:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \sum_{i=0}^k M^i = I - \lim_{k \rightarrow \infty} (M^{k+1}).$$

Παίρνοντας τις νόρμες και λαμβάνοντας υπόψη ότι $\|M^k\| < \|M\|^k$ και $\|M\| < 1$ δηλαδή

$\lim_{k \rightarrow \infty} \|M\|^k = 0$ προκύπτει ότι:

$$\begin{aligned} \|(I-M)^{-1}\| &\leq \lim_{k \rightarrow \infty} \sum_{i=0}^k \|M^i\| \leq \lim_{k \rightarrow \infty} \sum_{i=0}^k \|M\|^i \\ &= \lim_{k \rightarrow \infty} \sum_{i=0}^k \|M\|^0 \frac{1-\|M\|^{k+1}}{1-\|M\|} \\ &= \frac{1}{1-\|M\|} \end{aligned}$$

□

Λήμμα 4.13 ([12], Θεώρημα 3.1.4, σελ. 45).

Αν ο πίνακας A είναι αντιστρέψιμος και $\|A^{-1}(B-A)\| < 1$ τότε ο πίνακας B είναι αντιστρέψιμος και

$$\|B^{-1}\| \leq \frac{\|A^{-1}\|}{1-\|A^{-1}(B-A)\|}$$

Απόδειξη

Παίρνοντας, $M = I - A^{-1}B$ συνεπάγεται ότι $I - M = I - (I - A^{-1}B) = A^{-1}B$ και σύμφωνα με το λήμμα (4.12) ο πίνακας $I - M$ είναι αντιστρέψιμος και άρα ο $A^{-1}B$ είναι αντιστρέψιμος, δηλαδή ο πίνακας B είναι αντιστρέψιμος.

□

Το παρακάτω Λήμμα προσδιορίζει ένα φράγμα του σφάλματος του γραμμικού μοντέλου $\nabla F(x) + \nabla^2 F(x)p$ σαν μια προσέγγιση του $\nabla F(x+p)$.

Λήμμα 4.14 ([12], Λήμμα 4.1.12, σελ. 75).

Έστω $\nabla F: R^n \rightarrow R^m$ είναι συνεχώς διαφορίσιμη σε ένα ανοικτό κυρτό σύνολο $D \subset R^n$. Έστω $\nabla^2 F(x)$ είναι Lipschitz συνεχής στο $x \in D$. Τότε για κάθε $x+p \in D$ ισχύει ότι:

$$\|\nabla F(x+p) - \nabla F(x) - \nabla^2 F(x)p\| \leq \frac{L}{2} \|p\|^2$$

όπου L είναι η σταθερά Lipschitz της $\nabla^2 F$.

Απόδειξη

Μέσω του θεωρήματος Taylor $\nabla F(x+p) - \nabla F(x) = \int_0^1 \nabla^2 F(x+tp) p dt$ και συνεπάγεται ότι:

$$\begin{aligned} \|\nabla F(x+p) - \nabla F(x) - \nabla^2 F(x)p\| &= \left\| \int_0^1 [\nabla^2 F(x+tp) - \nabla^2 F(x)] p dt \right\| \\ &\leq \int_0^1 \|\nabla^2 F(x+tp) - \nabla^2 F(x)\| \|p\| dt \\ &\leq \int_0^1 L \|tp\| \|p\| dt \\ &\leq L \|p\|^2 \int_0^1 t dt \\ &\leq \frac{L}{2} \|p\|^2 \end{aligned}$$

□

Θεώρημα 4.15 ([12], Θεώρημα 5.2.1, σελ. 90).

Έστω η $F: R^n \rightarrow R^n$ είναι κλάσης C^2 και η μήτρα Hessian $\nabla^2 F(x)$ είναι Lipschitz συνεχής σε μια γειτονιά $N(x^*, r)$ του αυστηρού τοπικού ελαχίστου x^* της F . Τότε υπάρχει $\varepsilon > 0$ τέτοιο ώστε για κάθε $x_0 \in N(x^*, \varepsilon)$ η ακολουθία x_1, x_2, \dots παραγόμενη μέσω της επαναληπτικής διαδικασίας:

$$x_{k+1} = x_k - \nabla^2 F(x_k)^{-1} \nabla F(x_k), \quad k=0,1,\dots \quad (4.93)$$

- i). είναι καλά ορισμένη και συγκλίνει στο x^* τετραγωνικά.
- ii). Η ακολουθία των νορμών των κλίσεων $\{\|\nabla F_k\|\}$ συγκλίνει τετραγωνικά στο μηδέν.

Απόδειξη

i) Επιλέγουμε ένα ε έτσι που ο πίνακας $\nabla^2 F(x_k)$ να είναι αντιστρέψιμος για κάθε $x_k \in N(x^*, \varepsilon)$ και στη συνέχεια αποδεικνύεται ότι η σύγκλιση είναι τετραγωνική.

Έστω $\|\nabla^2 F(x^*)^{-1}\| \leq \beta$ και αν L είναι η σταθερά Lipschitz της $\nabla^2 F$ έστω

$$\varepsilon = \min \left\{ \tau, \frac{1}{2\beta L} \right\} \quad (4.94)$$

Αποδεικνύεται επαγωγικά ότι σε κάθε βήμα ισχύει:

$$\|x_{k+1} - x^*\| \leq \frac{1}{2} \|x_k - x^*\| \quad (4.95)$$

και συνεπώς $x_{k+1} \in N(x^*, \varepsilon)$.

Από την ανισότητα $\|x_0 - x^*\| \leq \varepsilon$ και την Lipschitz συνέχεια της $\nabla^2 F(x)$ στο x^* συνεπάγεται ότι:

$$\begin{aligned} \|\nabla^2 F(x^*)^{-1} [\nabla^2 F(x_0) - \nabla^2 F(x^*)]\| &\leq \|\nabla^2 F(x^*)^{-1}\| \|\nabla^2 F(x_0) - \nabla^2 F(x^*)\| \\ &\leq \beta \gamma \|x_0 - x^*\| \\ &\leq \beta \gamma \varepsilon \\ &\leq \frac{1}{2} \end{aligned} \quad (4.96)$$

Από το λήμμα 4.13 προκύπτει ότι:

$$\|\nabla^2 F(x_0)^{-1}\| \leq \frac{\|\nabla^2 F(x^*)^{-1}\|}{1 - \|\nabla^2 F(x^*)^{-1} [\nabla^2 F(x_0) - \nabla^2 F(x^*)]\|} \stackrel{(4.96)}{\leq} 2 \|\nabla^2 F(x^*)\| \leq 2\beta \quad (4.97)$$

Γι' αυτό τον λόγο το $x_1 = x_0 - \nabla^2 F(x_0)^{-1} \nabla F(x_0)$ είναι καλά ορισμένο.

Επιπλέον, αφού το x^* είναι αυστηρό τοπικό ελάχιστο της F προκύπτει ότι $\nabla F(x^*) = 0$ και

$$\begin{aligned} x_1 - x^* &= x_0 - x^* - \nabla^2 F(x_0)^{-1} \nabla F(x_0) \\ &= x_0 - x^* - \nabla^2 F(x_0)^{-1} [\nabla F(x_0) - \nabla F(x^*)] \\ &= \nabla^2 F(x_0)^{-1} [\nabla F(x^*) - \nabla F(x_0) - \nabla^2 F(x_0)(x^* - x_0)] \end{aligned}$$

Συνεπώς:

$$\begin{aligned} \|x_1 - x^*\| &\leq \|\nabla^2 F(x_0)^{-1}\| \|\nabla F(x^*) - \nabla F(x_0) - \nabla^2 F(x_0)(x^* - x_0)\| \\ &\stackrel{(4.97)}{\leq} 2\beta \|\nabla F(x^*) - \nabla F(x_0) - \nabla^2 F(x_0)(x^* - x_0)\| \end{aligned} \quad (4.98)$$

Χρησιμοποιώντας το λήμμα 4.14 προκύπτει ότι:

$$\begin{aligned} \|x_1 - x^*\| &\leq 2\beta \frac{L}{2} \|x_0 - x^*\|^2 \\ &= \beta L \|x_0 - x^*\|^2 \\ &\leq \beta L \varepsilon \|x_0 - x^*\| \\ &\stackrel{(4.94)}{\leq} \beta L \frac{1}{2\beta L} \|x_0 - x^*\| \\ &= \frac{1}{2} \|x_0 - x^*\| \end{aligned}$$

και $x_1 \in N(x^*, \varepsilon)$ το οποίο ολοκληρώνει την περίπτωση για $k=0$. Η απόδειξη του επαγωγικού βήματος απορρέει με όμοιο τρόπο και συμπεραίνεται ότι η σύγκλιση είναι τετραγωνική.

ii) Κάνοντας χρήση των σχέσεων $x_{k+1} - x_k = p_k^N$ και $\nabla F_k + \nabla^2 F_k p_k^N = 0$ λαμβάνεται ότι:

$$\begin{aligned} \|\nabla F_{k+1}\| &= \|\nabla F_{k+1} - (\nabla F_k + \nabla^2 F_k p_k^N)\| \\ &\leq \left\| \int_0^1 \nabla^2 F(x_k + tp_k^N) p_k^N dt - \nabla^2 F_k p_k^N \right\| \\ &\leq \int_0^1 \|\nabla^2 F(x_k + tp_k^N) - \nabla^2 F_k\| \|p_k^N\| dt \\ &\leq L \|p_k^N\|^2 \int_0^1 dt \\ &= \frac{1}{2} L \|p_k^N\|^2 \\ &\leq \frac{1}{2} L \|\nabla^2 F_k^{-1}\|^2 \|\nabla F_k\|^2 \\ &\stackrel{(4.97)}{\leq} L \|\nabla^2 F(x^*)^{-1}\|^2 \|\nabla F_k\|^2 \end{aligned}$$

Αποδεικνύοντας ότι οι νόρμες των κλίσεων συγκλίνουν στο μηδέν τετραγωνικά.

□

Θεώρημα 4.16 *Σύγκλιση της μεθόδου SQP* ([6], Θεώρημα 5.2.1, σελ. 90).

Έστω ότι ισχύουν οι υποθέσεις 4.2. Τότε υπάρχει μια γειτονιά V του (x^*, λ^*) τέτοια ώστε αν η πρώτη επανάληψη $(x_0, \lambda_0) \in V$, ο αλγόριθμος SQP είναι καλά ορισμένως και παράγει μια ακολουθία $\{(x_k, \lambda_k)\}$ που συγκλίνει τετραγωνικά στο (x^*, λ^*) .

Απόδειξη

Η απόδειξη πραγματοποιείται εφαρμόζοντας το θεώρημα 4.15 μιας και ο αλγόριθμος SQP είναι ισοδύναμος με τον αλγόριθμο του Newton εφαρμοσμένο στο μη γραμικό σύστημα $F(x, \lambda) = 0$ όπου

$$F(x, \lambda) = \begin{pmatrix} \nabla F(x) - A(x)^T \lambda \\ c(x) \end{pmatrix}$$

Θέτοντας $z = (x, \lambda)$ η συνάρτηση F είναι κλάσης C^1 σε μια γειτονιά του $z^* = (x^*, \lambda^*)$ και ο πίνακας $F'(z^*) = F'(x^*, \lambda^*)$ είναι αντιστρέψιμος από τις υποθέσεις 4.2. Επομένως προκύπτει η τετραγωνική σύγκλιση του $\{(x_k, \lambda_k)\}$.

□

Τα μέχρι στιγμής αποτελέσματα μπορούν να εφαρμοσθούν σε αλγόριθμους προβλημάτων με ανισωτικούς περιορισμούς από τη στιγμή που το ενεργό σύνολο έχει καθοριστεί στην τελική τιμή του. Για το σκοπό αυτό οι ενεργοί περιορισμοί του τετραγωνικού προβλήματος (4.12) σε μία επανάληψη πρέπει να είναι οι ίδιοι και στην επόμενη επανάληψη κάτι το οποίο σημαίνει ότι τουλάχιστον ασυμπτωτικά ο αλγόριθμος SQP θα συμπεριφέρεται σαν τη μέθοδο Newton για προβλήματα με ισωτικούς περιορισμούς και συνεπώς θα συγκλίνει γρήγορα. Οι συνθήκες κάτω από τις οποίες λαμβάνει χώρα αυτή η επιθυμητή συμπεριφορά δίνονται από το θεώρημα 4.18, κάνοντας χρήση του θεωρήματος 4.17 που ακολουθεί.

Θεώρημα 4.17

Όταν ισχύει η συνθήκη LICQ, δηλαδή τα διανύσματα των κλίσεων των ενεργών περιορισμών είναι γραμμικά ανεξάρτητα, το βέλτιστο διάνυσμα των πολλαπλασιαστών Lagrange λ^* είναι μοναδικό.

Απόδειξη

Έστω $\lambda_{\mathcal{E}}^*$ και $\lambda_{\mathcal{I}}^*$ είναι αντίστοιχα οι πολλαπλασιαστές Lagrange που αντιστοιχούν στους ισωτικούς $c_{\mathcal{E}}$ και στους ανισωτικούς περιορισμούς $c_{\mathcal{I}}$ αντίστοιχα. Για να είναι το σημείο $(x^*, \lambda_{\mathcal{E}}^*, \lambda_{\mathcal{I}}^*)$ ένα σημείο KKT, πρέπει να ικανοποιεί τη σχέση:

$$\nabla f(x^*) + \sum_{i \in \mathcal{E}} \lambda_{\mathcal{E}i}^* \nabla c_{\mathcal{E}i}(x^*) + \sum_{i \in \mathcal{I}} \lambda_{\mathcal{I}i}^* \nabla c_{\mathcal{I}i}(x^*)$$

Η παραπάνω συνθήκη γράφεται ως εξής:

$$\nabla f(x^*) + \sum_{i \in \mathcal{E}} \lambda_{\mathcal{E}i}^* \nabla c_{\mathcal{E}i}(x^*) + \sum_{i \in \mathcal{A}(x^*)} \tilde{\lambda}_{\mathcal{I}i}^* \nabla \tilde{c}_{\mathcal{I}i}(x^*)$$

όπου $\tilde{\lambda}_{\mathcal{I}}^* = \{\lambda_{\mathcal{I}i}^*\}$, $i \in \mathcal{A}(x^*)$ και $\tilde{c}_{\mathcal{I}}(x^*) = \{c_{\mathcal{I}i}(x^*)\}$, $i \in \mathcal{A}(x^*)$.

Η παραπάνω εξίσωση επαναδιατυπώνεται ως εξής:

$$-\nabla f(x^*) = (\lambda_\varepsilon^* \quad \tilde{\lambda}_I^*)^T \begin{pmatrix} \nabla c_\varepsilon(x^*) \\ \nabla \tilde{c}_I(x^*) \end{pmatrix}$$

Αφού τα $[\nabla c_\varepsilon(x^*) \quad \nabla \tilde{c}_I(x^*)]^T$ είναι γραμμικά ανεξάρτητα (δεδομένης της συνθήκης LICQ), προκύπτει ότι τα $(\lambda_\varepsilon^* \quad \tilde{\lambda}_I^*)$ ορίζονται μοναδικά.

□

Θεώρημα 4.18 ([6], Θεώρημα 15.2, σελ. 259).

Έστω ότι οι συναρτήσεις f και c είναι κλάσης C^2 σε μια γειτονιά μιας τοπικής λύσης x^* του γενικού μη γραμμικού προβλήματος ελαχιστοποίησης (4.11) με αντίστοιχους πολλαπλασιαστές λ^* και το σημείο x^* ικανοποιεί τις υποθέσεις 4.1. Έστω επίσης ότι ισχύει η συνθήκη αυστηρής συμπληρωματικότητας και ότι το $(x^*, \lambda_{\mathcal{A}(x^*)}^*)$ είναι τοπική λύση του προβλήματος ισωτικών περιορισμών:

$$\min_{x \in R^n} f(x) \quad , \quad c_i(x) = 0, i \in \mathcal{A}(x^*) \quad (4.99)$$

Αν το p_k είναι τοπική λύση του τετραγωνικού προγραμματισμού (4.12), τότε υπάρχει μια γειτονιά V του (x^*, λ^*) τέτοια ώστε αν η πρώτη επανάληψη $(x_o, \lambda_o) \in V$ τότε :

- i. Ο αλγόριθμος SQP είναι καλά ορισμένος και παράγει μια ακολουθία $\{(x_k, \lambda_k)\}$ η οποία συγκλίνει τετραγωνικά στο (x^*, λ^*) .
- ii. Οι ενεργοί περιορισμοί του προβλήματος τετραγωνικού προγραμματισμού (4.12) είναι εκείνοι του προβλήματος (4.11).

Απόδειξη

Η βασική ιδέα είναι να αποδειχθεί ότι κοντά στο (x^*, λ^*) η τοπική λύση p_k του (4.12) και το βήμα για το πρόβλημα (4.99) είναι όμοια. Η υπόλοιπη απόδειξη προκύπτει από το θεώρημα 4.16.

Έστω ότι το (x_k, λ_k) είναι κοντά στο (x^*, λ^*) . Αφού το $(x^*, \lambda_{\mathcal{A}(x^*)}^*)$ είναι τοπική λύση του προβλήματος (4.99), τότε το τετραγωνικό πρόβλημα:

$$\min_{\tilde{p}} \nabla f(x_k)^T \tilde{p} + \frac{1}{2} \tilde{p}^T \mathcal{L}(x_k, \lambda_k) \tilde{p} \quad , \quad c_i(x_k) + c_i'(x_k) \tilde{p} = 0 \quad , \quad i \in \mathcal{A}(x^*) \quad (4.100)$$

έχει μοναδική λύση $(\tilde{p}_k, \tilde{\lambda}_{\mathcal{A}(x^*)})$. Θέτοντας $\tilde{\lambda}_i = 0$ για $i \in \mathcal{I} \setminus \{\mathcal{I} \cap \mathcal{A}(x^*)\}$ καταρτίζεται μαζί με το $\tilde{\lambda}_{\mathcal{A}(x^*)}$ το διάνυσμα $\tilde{\lambda}_{k+1} \in R^m$.

Αποδεικνύεται ότι αν το (x_k, λ_k) είναι σε μια γειτονιά του (x^*, λ^*) , το ζεύγος $(\tilde{p}_k, \tilde{\lambda}_{k+1})$ είναι λύση του προβλήματος τετραγωνικού προγραμματισμού (4.12), ως εξής:

Αποδεικνύεται αρχικά ότι το $(\tilde{p}_k, \tilde{\lambda}_{k+1})$ είναι τοπική λύση του (4.12). Για το σκοπό αυτό αρκεί να

δειχθεί ότι:

$$\begin{aligned} c_i(x_k) + c'_i(x_k)\tilde{p}_k &\geq 0, \quad i \in \mathcal{I} \setminus \{\mathcal{I} \cap \mathcal{A}(x^*)\} \\ \tilde{\lambda}_{k+1} &\geq 0, \quad i \in \{\mathcal{I} \cap \mathcal{A}(x^*)\} \end{aligned}$$

Από το θεώρημα (4.16), όταν το (x_k, λ_k) είναι κοντά στο (x^*, λ^*) τότε το $(x_k + \tilde{p}_k, \tilde{\lambda}_{k+1})$ είναι κοντά στο (x^*, λ^*) . Για τον λόγο αυτό, για $i \in \{\mathcal{I} \cap \mathcal{A}(x^*)\}$ προκύπτει ότι $\tilde{\lambda}_{k+1} \geq 0$ αφού λόγω της συνθήκης αυστηρής συμπληρωματικότητας $\lambda^* > 0$. Από την άλλη μεριά το \tilde{p}_k είναι μικρό έτσι που για $i \in \mathcal{I} \setminus \{\mathcal{I} \cap \mathcal{A}(x^*)\}$, $c_i(x_k) + c'_i(x_k)\tilde{p}_k \geq 0$. Συνεπώς το $(\tilde{p}_k, \tilde{\lambda}_{k+1})$ είναι τοπική λύση του (4.12).

Στη συνέχεια αποδεικνύεται ότι η λύση p_k του (4.12) και οι σχετιζόμενοι με αυτή πολλαπλασιαστές λ_{k+1} είναι πράγματι \tilde{p}_k και $\tilde{\lambda}_{k+1}$ αντίστοιχα, αν το (x_k, λ_k) είναι σε μια γειτονιά του (x^*, λ^*) ως εξής:

Για (x_k, λ_k) κοντά στο (x^*, λ^*) και $i \in \mathcal{I} \setminus \{\mathcal{I} \cap \mathcal{A}(x^*)\}$, $c_i(x_k) + c'_i(x_k)p_k > 0$, και επομένως προκύπτει ότι $\lambda_{k+1} = 0 = \tilde{\lambda}_{k+1}$.

Εξαιτίας της μοναδικότητας της τοπικής λύσης του προβλήματος (4.100), μένει να δειχθεί ότι:

$$c_i(x_k) + c'_i(x_k)p_k = 0, \quad \forall i \in \{\mathcal{I} \cap \mathcal{A}(x^*)\}$$

Αν η παραπάνω σχέση δεν ίσχυε θα υπήρχε ένας δείκτης $j \in \{\mathcal{I} \cap \mathcal{A}(x^*)\}$ και μια ακολουθία $(x_k, \lambda_k) \rightarrow (x^*, \lambda^*)$ τέτοια ώστε:

$$c_j(x_k) + c'_j(x_k)p_k > 0, \quad \lambda_{k+1_j} = 0$$

Από τις συνθήκες KKT προκύπτει ότι:

$$\nabla f_k + \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k p_k - \sum_{i \in \{\mathcal{A}(x^*)\} \setminus \{j\}} \lambda_{k+1_i} \nabla c_i(x_k) = 0$$

Αφού $p_k \rightarrow 0$ συνεπάγεται ότι $\nabla f_k + \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k p_k \rightarrow \nabla f(x^*)$ και οι πολλαπλασιαστές λ_{k+1_i} , $i \in \{\mathcal{A}(x^*)\} \setminus \{j\}$ θα σύγκλιναν σε κάποιο όριο $\bar{\lambda}_i$. Επομένως, η παραπάνω εξίσωση γίνεται:

$$\nabla f(x^*) - \sum_{i \in \{\mathcal{A}(x^*)\} \setminus \{j\}} \bar{\lambda}_i \nabla c_i(x^*) = 0$$

Προκύπτει τελικά, ότι υπάρχουν δύο διαφορετικοί πολλαπλασιαστές, λ^* και $\bar{\lambda}$, με $\bar{\lambda}_i = 0$ για $i \notin \{\mathcal{A}(x^*)\} \setminus \{j\}$. Για τους πολλαπλασιαστές αυτούς έχουμε ότι $\bar{\lambda} \neq \lambda^*$ μιας και $\bar{\lambda}_j = 0$ και $\lambda_j^* > 0$ (λόγω της συνθήκης αυστηρής συμπληρωματικότητας), το οποίο αποτελεί αντίφαση δεδομένης της μοναδικότητας των πολλαπλασιαστών Lagrange (θεώρημα 4.17).

□

4.7.2 Η εκδοχή Quasi – Newton του αλγόριθμου

Στη περίπτωση αυτή η μήτρα Hessian $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x_k, \lambda_k)$ της Λαγκρανζιανής συνάρτησης αντικαθίσταται με μια προσέγγιση Quasi-Newton B_k . Παίρνοντας τον $n \times (n-m)$ πίνακα Z_k οι στήλες του οποίου παράγουν τον μηδενικό χώρο του πίνακα A_k έτσι ώστε να έχει ορθοκανονικές στήλες και πολλαπλασιάζοντας την πρώτη γραμμή του συστήματος KKT (4.5) με Z_k προκύπτει:

$$Z_k^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k p_k = -Z_k^T \nabla f_k \quad (4.101)$$

Η εξίσωση αυτή μαζί με τη δεύτερη γραμμή $A_k p_k = -c_k$ του συστήματος (4.5) είναι ικανές να προσδιορίσουν πλήρως την τιμή του p_k όταν τα x_k και λ_k δεν είναι πολύ μακριά από τις βέλτιστες τιμές τους.

Στην συνέχεια, γίνεται χρήση του πίνακα προβολής P_k που ορίζεται για κάθε επανάληψη ως εξής:

$$P_k = I - A_k^T [A_k A_k^T]^{-1} A_k = Z_k Z_k^T$$

Ο πίνακας αυτός προβάλλει κάθε διάνυσμα στον R^n στον μηδενικό χώρο των κλίσεων των περιορισμών A_k . Πολλαπλασιάζοντας την σχέση (4.101) με Z_k επαναδιατυπώνεται ως εξής:

$$P_k \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k p_k = -P_k \nabla f_k \quad (4.102)$$

Η εξίσωση αυτή αναδεικνύει ότι η κατεύθυνση έρευνας προσδιορίζεται πλήρως από τη μονόπλευρη προβολή της μήτρας $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k$. Υποδηλώνει επίσης (θεώρημα 4.16), ότι η μέθοδος Quasi-Newton θα συγκλίνει τοπικά αν ο πίνακας B_k είναι επιλεγμένος έτσι ώστε ο πίνακας $P_k B_k$ να είναι μια λογική προσέγγιση του $P_k \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k$ και η σύγκλιση θα είναι υπεργραμμική αν η προσέγγιση είναι ακριβής.

Ακριβολογώντας, αναφορικά με το δεύτερο ισχυρισμό, το επόμενο θεώρημα ποσοτικοποιεί τη ποιότητα αυτής της προσέγγισης στη περίπτωση ενός προβλήματος ισωτικών περιορισμών.

Θεώρημα 4.19 ([7], Θεώρημα 3.1, σελ. 167).

Έστω ότι η ισχύει η υπόθεση (4.2α) και η ακολουθία $\{(x_k, \lambda_k)\}$ που παράγεται από τον αλγόριθμο SQP με τη Hessian μήτρα της Λαγκρανζιανής συνάρτησης $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k$ να έχει αντικατασταθεί από μια συμμετρική μήτρα B_k , συγκλίνει στο (x^*, λ^*) . Τότε το x_k συγκλίνει υπεργραμμικά αν και μόνο αν η προσέγγιση B_k της μήτρας Hessian ικανοποιεί την ιδιότητα:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|P_k (B_k - \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x_k, \lambda_k)) p_k\|}{\|p_k\|} = 0 \quad (4.103)$$

□

4.7.3 Γενική Σύγκλιση

Η μέχρι τώρα εμπειρία έχει δείξει ότι οι μέθοδοι SQP συχνά συγκλίνουν σε μια λύση από απομακρυσμένα αρχικά σημεία και επομένως έχει υπάρξει αξιοσημείωτο ενδιαφέρον στη κατανόηση του τι οδηγεί τις επαναλήψεις αυτές προς την λύση αλλά και τι μπορεί να οδηγήσει τον αλγόριθμο στο να αποτύχει.

Το επόμενο θεώρημα αναλύει τη γενική σύγκλιση του αλγόριθμου SQP με αναζήτηση γραμμής χρησιμοποιώντας τη συνάρτηση αξίας l_1 , όπου το μ_k προσαρμόζεται σύμφωνα με τον κανόνα (4.66) και το μήκος βήματος a_k προσδιορίζεται μέσω ενός αλγόριθμου αναζήτησης γραμμής. Επίσης, γίνονται και οι κάτωθι υποθέσεις.

Υποθέσεις 4.3

- α. Οι πίνακες B_k που αντικαθιστούν τη μήτρα Hessian $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k$ διατηρούνται θετικά ορισμένοι.
- β. Οι ακολουθίες $\{B_k\}$ και $\{B_k^{-1}\}$ είναι φραγμένες.

Η υπόθεση (4.3β) είναι μια ισχυρή υπόθεση δεδομένου ότι δεν είναι γνωστό κατα πόσον ικανοποιείται στην εκδοχή Quasi-Newton της μεθόδου SQP. Επιπλέον δεν είναι εγγυημένο ότι οι πίνακες B_k διατηρούνται θετικά ορισμένοι.

Θεώρημα 4.20 ([6], Θεώρημα 17.2, σελ. 296).

Έστω ότι ο αλγόριθμος SQP όπως περιγράφηκε πιο πάνω εφαρμόζεται στο μη γραμμικό πρόβλημα (4.11). Υποθέτουμε επίσης ότι οι συναρτήσεις f και c είναι συνεχώς διαφορίσιμες σε μια ανοικτή περιοχή $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ με Lipschitz συνεχή παραγώγους και ότι οι υποθέσεις 4.3 ικανοποιούνται. Τότε, ξεκινώντας ο αλγόριθμος από ένα σημείο $x \in \Omega$, και αν υποθέσουμε ότι οι ακολουθίες $\{x_k\}$ και $\{x_{k+1}\}$ ανήκουν στην περιοχή Ω , λαμβάνει χώρα μία από τις επόμενες καταστάσεις:

- 1). Η ακολουθία $\{\mu_k\}$ δεν είναι φραγμένη και στη περίπτωση αυτή η $\{\lambda_{k+1}\}$ επίσης δεν είναι φραγμένη.
- 2). Υπάρχει ένας δείκτης k_1 τέτοιος ώστε για $k \geq k_1$, $\mu_k = \mu$ και τουλάχιστον μία από τις ακόλουθες καταστάσεις λαμβάνει χώρα:
 - α. $\varphi(x_k; \mu_k) \rightarrow -\infty$
 - β. Κάθε οριακό σημείο της ακολουθίας $\{x_k, \lambda_{k+1}\}$ ικανοποιεί τις συνθήκες βελτίστου KKT για το πρόβλημα (4.11).

Απόδειξη

- 1). Αν η $\{\mu_k\}$ δεν είναι φραγμένη, από τον κανόνα ενημέρωσης (4.66) προκύπτει ότι και η $\{\lambda_{k+1}\}$

δεν είναι επίσης φραγμένη.

2). Αν η $\{\mu_k\}$ είναι φραγμένη, προκύπτει πάλι από τον κανόνα ανανέωσης ότι υπάρχει ένας δείκτης k_1 τέτοιος ώστε $\mu_k = \mu \quad \forall k \geq k_1$. Για να αποδειχθεί τώρα ότι μια από τις καταστάσεις (2α) ή (2β) λαμβάνει χώρα, υποθέτουμε ότι η (2α) δεν ισχύει και δείχνουμε την (2β).

Κάθε επανάληψη μετά με $k > k_1$ επιβάλλει τη μείωση στην ίδια συνάρτηση αξίας $\varphi(x_k; \mu_k)$ και μιας και από την (2α) $\varphi(x_k; \mu_k) \geq c > -\infty$, η συνθήκη επαρκούς μείωσης:

$$\varphi(x_k + a_k p_k; \mu_k) \leq \varphi(x_k; \mu_k) + \eta a_k \Delta_k, \quad \eta \in (0,1) \quad (4.104)$$

συνεπάγεται ότι $a_k \Delta_k \rightarrow 0$. Αν $a_k \geq \bar{a} > 0$ προκύπτει ότι $\Delta_k \rightarrow 0$ και η (2β) ικανοποιείται όπως αποδεικνύεται παρακάτω:

Οι ΚΚΤ συνθήκες βελτίστου για το υποπρόβλημα τετραγωνικού προγραμματισμού (4.12) με τον πίνακα B_k στην θέση του $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k$ είναι οι ακόλουθες:

$$\nabla f_k + B_k p_k + \nabla c_k \lambda_{k+1} = 0 \quad (4.105\alpha)$$

$$c_i(x_k) + \nabla c_i(x_k)^T p_k = 0, \quad i \in \mathcal{E} \quad (4.105\beta)$$

$$c_i(x_k) + \nabla c_i(x_k)^T p_k \geq 0, \quad i \in \mathcal{I} \quad (4.105\gamma)$$

$$(\lambda_{k+1})_i \geq 0, \quad i \in \mathcal{I} \quad (4.105\delta)$$

$$(\lambda_{k+1})_i (c_i(x_k) + \nabla c_i(x_k)^T p_k) = 0, \quad i \in \mathcal{I} \quad (4.105\epsilon)$$

Για την κατά κατεύθυνση παράγωγο της $\varphi(x_k; \mu_k)$ έχουμε από την (4.65) ότι:

$$D(\varphi(x_k; \mu_k); p_k) \leq \nabla f_k^T p_k - \mu_k \|c_k^\# \|_1 = -p_k^T B_k p_k + \lambda_{k+1}^T c_k - \mu_k \|c_k^\# \|_1 = \Delta_k \quad (4.106)$$

Απ' την άλλη μεριά από τον κανόνα ανανέωσης του μ_k ισχύει ότι:

$$\mu_k = \|\lambda_{k+1}\|_\infty + 2\rho \geq \|\lambda_{k+1}\|_\infty + \rho \quad (4.107)$$

Επομένως, από το γεγονός ότι $\Delta_k \rightarrow 0$ και από τις σχέσεις (4.106) και (4.107) προκύπτει ότι:

$$p_k^T B_k p_k \rightarrow 0 \quad (4.108)$$

$$c_k^\# \rightarrow 0 \quad (4.109)$$

Από την (4.109) συμπεραίνεται ότι:

$$c_i(x_k) \rightarrow 0, \quad i \in \mathcal{E} \quad (4.110)$$

$$\min\{c_i(x_k), 0\} \rightarrow 0, \quad i \in \mathcal{I} \Rightarrow c_i(x_k) \geq 0, \quad i \in \mathcal{I} \quad (4.111)$$

Από την (4.108), εξαιτίας του ότι ο πίνακας B_k είναι θετικά ορισμένος και έχει φραγμένο αντίστροφο, προκύπτει ότι:

$$d_k \rightarrow 0 \quad (4.112)$$

Από την (4.105α) και το φράσιμο του B_k προκύπτει χρησιμοποιώντας την (4.112) ότι:

$$\nabla_x \mathcal{L}(x_k, \lambda_{k+1}) \rightarrow 0 \quad (4.113)$$

Επίσης από την (4.105δ) έχουμε ότι:

$$(\lambda_{k+1})_i \geq 0, \quad i \in \mathcal{I} \quad (4.114)$$

Τέλος, από την (4.106) συνεπάγεται ότι $\nabla_k = \nabla f_k^T p_k - \mu_k \|c_k^\# \|_1 \rightarrow 0$ και χρησιμοποιώντας την (4.109) έχουμε $\nabla f_k^T p_k \rightarrow 0$. Επομένως από την (4.105α) έπεται ότι:

$$\lambda_{k+1}^T \nabla c_k^T p_k \rightarrow 0 \quad (4.115)$$

Η εξίσωση (4.115) υποδηλώνει ότι:

$$\sum_{i \in \mathcal{E}} (\lambda_{k+1})_i \nabla c_i(x_k)^T p_k + \sum_{i \in \mathcal{I}} (\lambda_{k+1})_i \nabla c_i(x_k)^T p_k \rightarrow 0$$

το οποίο μπορεί να γραφτεί ως:

$$\sum_{i \in \mathcal{E}} (\lambda_{k+1})_i \nabla c_i(x_k)^T p_k + \sum_{i \in \mathcal{I}} (\lambda_{k+1})_i \nabla c_i(x_k)^T p_k = o(1) \quad (4.116)$$

Όμως από την (4.105ε):

$$\begin{aligned} \sum_{i \in \mathcal{I}} (\lambda_{k+1})_i c_i(x_k) &= \sum_{i \in \mathcal{I}} (\lambda_{k+1})_i \nabla c_i(x_k)^T p_k \\ &\stackrel{(4.116)}{=} \sum_{i \in \mathcal{E}} (\lambda_{k+1})_i \nabla c_i(x_k)^T p_k + o(1) \\ &\stackrel{(4.105b)}{=} - \sum_{i \in \mathcal{E}} (\lambda_{k+1})_i c_i(x_k) + o(1) \\ &= o(1) \end{aligned}$$

Αφού η ακολουθία $\{\lambda_{k+1}\}$ είναι φραγμένη και επειδή από την (4.110) $c_i(x_k) \rightarrow 0, i \in \mathcal{E}$ έπεται ότι:

$$(\lambda_{k+1})_i c_i(x_k) \rightarrow 0, \quad i \in \mathcal{I} \quad (4.117)$$

Οι σχέσεις (4.110), (4.111), (4.114), (4.117) και (4.113) αποδεικνύουν το (2β) δηλαδή, κάθε οριακό σημείο της ακολουθίας $\{x_k, \lambda_{k+1}\}$ ικανοποιεί τις ΚΚΤ συνθήκες βελτίστου.

Μένει να δειχθεί ότι $a_k \geq \bar{a} > 0 \quad \forall k \geq k_1$ για κάποια σταθερά \bar{a} . Το μήκος βήματος a_k προσδιορίζεται με την διαδικασία backtracking θέτοντας $a_k = p \tilde{a}_k$, όπου η σταθερά \tilde{a}_k δεν ικανοποιεί τη συνθήκη επαρκούς μειώσεως, δηλαδή:

$$\varphi(x_k + \tilde{a}_k p_k; \mu_k) > \varphi(x_k; \mu_k) + \eta \tilde{a}_k \Delta_k \quad (4.118)$$

Έχουμε ότι:

$$\varphi(x_k + \tilde{a}_k p_k) = f(x_k + \tilde{a}_k p_k) + \mu_k \|c(x_k + \tilde{a}_k p_k)^\# \| \quad (4.119)$$

Για f και $c \in C^1$ έχουμε:

$$\begin{aligned} f(x_k + \tilde{a}_k p_k) &= f_k + \tilde{a}_k \nabla f_k^T p_k + O(\tilde{a}_k^2 \|p_k\|^2) \\ c(x_k + \tilde{a}_k p_k) &= c_k + \tilde{a}_k \nabla c_k^T p_k + O(\tilde{a}_k^2 \|p_k\|^2) \\ &= (1 - \tilde{a}_k) c_k + \tilde{a}_k (c_k + \nabla c_k^T p_k) + O(\tilde{a}_k^2 \|p_k\|^2) \end{aligned}$$

Έπεται ότι:

$$\begin{aligned} \|c(x_k + \tilde{a}_k p_k)^\# \|_1 &= \|(1 - \tilde{a}_k) c_k^\# + \tilde{a}_k [c_k + \nabla c_k^T p_k]^\# + O(\tilde{a}_k^2 \|p_k\|^2) \\ &\leq (1 - \tilde{a}_k) \|c_k^\# \|_1 + \tilde{a}_k \|c_k + \nabla c_k^T p_k\|_1 + O(\tilde{a}_k^2 \|p_k\|^2) \end{aligned}$$

Από τις ΚΚΤ συνθήκες βελτίστου (4.105β) και (4.105γ) παίρνουμε:

$$[c_k + \nabla c_k^T p_k]^\# = 0$$

Άρα:

$$\| [c(x_k + \tilde{a}_k p_k)^\# \|_1 \leq (1 - \tilde{a}_k) \|c_k^\# \|_1 + O(\tilde{a}_k^2 \|p_k\|^2)$$

Προκύπτει από την (4.119) ότι:

$$\begin{aligned} \varphi_1(x_k + \tilde{a}_k p_k; \mu_k) &\leq f_k + \tilde{a}_k \nabla f_k^T p_k + \mu_k (1 - \tilde{a}_k) \|c_k^\# \|_1 + O(\tilde{a}_k^2 \|p_k\|^2) \\ &= f_k + \mu_k \|c_k^\# \|_1 + \tilde{a}_k \nabla f_k^T p_k - \mu_k \tilde{a}_k \|c_k^\# \|_1 + O(\tilde{a}_k^2 \|p_k\|^2) \\ &\leq \varphi_1(x_k; \mu_k) + \tilde{a}_k \nabla f_k^T p_k - \mu_k \tilde{a}_k \|c_k^\# \|_1 + C_1 \tilde{a}_k^2 \|p_k\|^2 \\ &\stackrel{(4.105a)}{=} \varphi_1(x_k; \mu_k) + \tilde{a}_k p_k^T B_k p_k - \tilde{a}_k \lambda_{k+1}^T \nabla c_k^T p_k - \mu_k \tilde{a}_k \|c_k^\# \|_1 + C_1 \tilde{a}_k^2 \|p_k\|^2 \\ &\stackrel{(4.105b)}{=} \varphi_1(x_k; \mu_k) - \tilde{a}_k p_k^T B_k p_k + \tilde{a}_k \lambda_{k+1}^T c_k - \mu_k \tilde{a}_k \|c_k^\# \|_1 + C_1 \tilde{a}_k^2 \|p_k\|^2 \\ &\stackrel{(4.106)}{=} \varphi_1(x_k; \mu_k) + \tilde{a}_k \Delta_k + C_1 \tilde{a}_k^2 \|p_k\|^2 \end{aligned}$$

Από την παραπάνω ανισότητα και την ανισότητα (4.118) συνεπάγεται ότι:

$$-(1 - \eta) \Delta_k \leq C_1 \tilde{a}_k \|p_k\|^2 \quad (4.120)$$

Όμως, λόγω του ότι η ακολουθία $\{B_k^{-1}\}$ είναι φραγμένη:

$$\Delta_k = -p_k^T B_k p_k + \lambda_{k+1}^T c_k - \mu_k \|c_k^\# \|_1 \leq -p_k^T B_k p_k \leq -C_2 \|p_k\|^2$$

Συνεπώς από την (4.120) και το γεγονός ότι $\eta \in (0,1)$:

$$\tilde{a}_k \geq \frac{C_2}{C_1} (1 - \eta) > 0$$

Άρα μπορούμε να επιλέξουμε $a_k \geq \bar{a} > 0$ με $\bar{a} = \rho \tilde{a}_k = \rho \frac{C_2}{C_1} (1 - \eta)$ με $\rho \in (0,1)$.

□

4.7.4 Υπεργραμμική Σύγκλιση

Οι υποθέσεις ότι η μήτρα $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*)$ είναι θετικά ορισμένη, ότι οι συναρτήσεις $f, c \in C^2$ και τέλος ότι οι μήτρες Hessian αυτών είναι Lipschitz συνεχής κοντά στο x^* , υποδηλώνουν ότι για όλα τα (x, λ) αρκετά κοντά στα (x^*, λ^*) και για όλα τα $w \neq 0$:

$$m \|w\|^2 \leq w^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x, \lambda) w \leq M \|w\|^2 \quad (4.121)$$

Λόγω της (4.121) ο ορισμός του y_k από την (4.35) εξασφαλίζει ότι κοντά στη λύση και για κάθε x στο ευθύγραμμο τμήμα που ενώνει τα x_k και $x_k + s_k$, η μέθοδος BFGS για προβλήματα χωρίς περιορισμούς έχει ισχυρές ιδιότητες σύγκλισης, μιας και οι ακόλουθες συνθήκες ικανοποιούνται:

$$\frac{y_k^T s_k}{\|s_k\|^2} \geq m \quad (4.122\alpha)$$

$$\frac{\|y_k\|^2}{y_k^T s_k} \leq M \quad (4.122\beta)$$

Επιπλέον αυτές οι υποθέσεις θέτουν ως υποψήφιους για χρησιμοποίηση τους τύπους ανανέωσης οι οποίοι διατηρούν τους πίνακες θετικά ορισμένους (DFP ή BFGS) και το θεώρημα (4.22) δείχνει ότι επιτυγχάνεται υπεργραμμική σύγκλιση σε αυτές τις περιπτώσεις, δηλαδή η (4.103) ικανοποιείται. Λαμβάνοντας υπόψη ότι οι πίνακες προβολής P_k είναι φραγμένοι είναι αρκετό να αποδεχθεί ότι:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\| [B_k - \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*)](x_{k+1} - x_k) \|}{\|x_{k+1} - x_k\|} = 0 \quad (4.123)$$

Η απόδειξη κάνει χρήση της θεμελιώδους ανισότητας των Broyden, Dennis και More για την περίπτωση προβλημάτων χωρίς περιορισμούς, η οποία δίνεται με το ακόλουθο λήμμα.

Λήμμα 4.21 ([9], Λήμμα 3.2, σελ. 555).

Έστω: $F: R^n \rightarrow R^n$ διαφορίσιμη σε μια ανοικτή κυρτή γειτονιά D ενός σημείου x^* για το οποίο η μήτρα $\nabla F(x^*)$ είναι συμμετρική και θετικά ορισμένη και η ∇F είναι Lipschitz σε μια γειτονιά του x^* . Αν για κάποια ακολουθία $\{x_k\} \subset D$ με $x_{k+1} = x_k - B_k^{-1} F(x_k)$ η οποία συγκλίνει στο x^* τα s_k και y_k δίνονται από τις σχέσεις:

$$s_k = x_{k+1} - x_k, \quad y_k = F(x_{k+1}) - F(x_k)$$

τότε υπάρχει ένα k_0 τέτοιο ώστε για $k \geq k_0$, $y_k^T s_k > 0$. Επιπλέον υπάρχουν θετικές σταθερές c, a_1 και a_2 με $c \in (0, 1]$ τέτοιες ώστε:

$$\|B_{k+1} - \nabla F(x^*)\|_M \leq [(1 - c\theta_k^2)^{1/2} + a_1 \hat{\sigma}_k] \|B_k - \nabla F(x^*)\|_M + a_2 \hat{\sigma}_k \quad (4.124)$$

$$\text{όπου } \begin{cases} \hat{\sigma}_k = \max\{\|x_{k+1} - x^*\|, \|x_k - x^*\|\} \\ \theta_k = \frac{\|M(B_k - \nabla F(x^*))s_k\|}{\|B_k - \nabla F(x^*)\|_M \|M^{-1}s_k\|} \text{ για } B_k \neq \nabla F(x^*) \text{ και } \theta_k = 0 \text{ διαφορετικά.} \\ M = \nabla F(x^*)^{-1/2} \end{cases}$$

και η νόρμα πίνακα $\|\cdot\|_M$ ορίζεται ως $\|Q\|_M = \|MQM\|_F$ και $\|\cdot\|_F$ είναι η Frobenious νόρμα.

□

Θεώρημα 4.22 ([7], Λήμμα 4, σελ. 168).

Έστω ότι η μήτρα $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*)$ είναι θετικά ορισμένη. Αν η ακολουθία $\{B_k\}$ λαμβάνεται μέσω είτε του DFP είτε του BFGS τύπου με το y_k να δίνεται από τη σχέση:

$$\tilde{y}_k = \nabla_x \mathcal{L}(x_{k+1}, \lambda_{k+1}) - \nabla_x \mathcal{L}(x_k, \lambda_{k+1}) \quad (4.125)$$

και αν η $\{x_k\}$ συγκλίνει στο x^* γραμμικά, τότε η σύγκλιση είναι υπεργραμμική.

Απόδειξη

Αφού από τις υποθέσεις το x^* είναι ένα ελάχιστο για το πρόβλημα χωρίς περιορισμούς, της $\mathcal{L}(x, \lambda^*)$, το Λήμμα 4.21 μπορεί να εφαρμοστεί για την περίπτωση όπου ο πίνακας \tilde{B}_{k+1} παράγεται από τον B_k χρησιμοποιώντας τον ίδιο τύπο ανανέωσης όπως και για το B_{k+1} αλλά με το y_k να έχει αντικατασταθεί με:

$$\tilde{y}_k = \nabla_x \mathcal{L}(x_{k+1}, \lambda^*) - \nabla_x \mathcal{L}(x_k, \lambda^*) \quad (4.126)$$

Επομένως προκύπτει η ακόλουθη θεμελιώδης ανισότητα:

$$\|\tilde{B}_{k+1} - \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*)\|_M \leq [(1 - c\theta_k^2)^{1/2} + a_1 \hat{\sigma}_k] \|B_k - \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*)\|_M + a_2 \hat{\sigma}_k \quad (4.127)$$

όπου, $\hat{\sigma}_k, \theta_k$ όπως πιο πάνω και $M = \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*)^{-1/2}$.

Χρησιμοποιώντας την τριγωνική ανισότητα η (4.127) γίνεται:

$$\begin{aligned} \|B_{k+1} - \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*)\|_M &\leq \|\tilde{B}_{k+1} - \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*)\|_M + \|B_{k+1} - \tilde{B}_{k+1}\|_M \\ &\leq [(1 - c\theta_k^2)^{1/2} + a_1 \hat{\sigma}_k] \|B_k - \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*)\|_M + a_2 \hat{\sigma}_k + \|B_{k+1} - \tilde{B}_{k+1}\|_M \end{aligned} \quad (4.128)$$

Για την ανανέωση BFGS (η απόδειξη για την DFP ανανέωση είναι όμοια) έπεται ότι:

$$B_{k+1} - \tilde{B}_{k+1} = \frac{\tilde{y}_k^T s_k y_k y_k^T - y_k^T s_k \tilde{y}_k \tilde{y}_k^T}{(\tilde{y}_k^T s_k)(y_k^T s_k)} \quad (4.129)$$

$$\text{επομένως } \|B_{k+1} - \tilde{B}_{k+1}\| \leq \frac{3\|y_k\| \|\tilde{y}_k\| \|s_k\| \|y_k - \tilde{y}_k\|}{\|\tilde{y}_k^T s_k\| \|y_k^T s_k\|} \quad (4.130)$$

Από τους ορισμούς των y_k και \tilde{y}_k και την υπόθεση ότι η c είναι Lipschitz συνεχής κοντά στο x^* προκύπτει ότι:

$$\|y_k - \tilde{y}_k\| = \|\nabla c(x_{k+1}) - \nabla c(x_k)\| (\lambda_{k+1} - \lambda^*) \leq \beta_1 \|x_{k+1} - x_k\| \|\lambda_{k+1} - \lambda^*\| \quad (4.131)$$

Επιπλέον από την (4.122α,β) έχουμε:

$$y_k^T s_k \geq m \|s_k\|^2, \quad \tilde{y}_k^T s_k \geq m \|s_k\|^2 \quad (4.132a)$$

$$\|y_k\| \leq M \|s_k\|, \quad \|\tilde{y}_k\| \leq M \|s_k\| \quad (4.132b)$$

Χρησιμοποιώντας τις (4.131) και (4.132α,β) προκύπτει από την (4.130) ότι:

$$\|B_{k+1} - \tilde{B}_{k+1}\| \leq 3\beta_1 \left(\frac{m}{M}\right)^2 \|\lambda_{k+1} - \lambda^*\| \quad (4.133)$$

Η ανισότητα (4.133) μπορεί να γραφτεί στη μορφή:

$$\|B_{k+1} - \tilde{B}_{k+1}\| \leq a \sigma_k \quad (4.134)$$

όπου a είναι μια σταθερά ανεξάρτητη του k και $\sigma_k = \max\{\|(x_i, \lambda_i) - (x^*, \lambda^*)\| : i = k, k+1\}$.

Επί πλέον:

$$\begin{aligned}
\|B_{k+1} - \tilde{B}_{k+1}\|_M &= \|\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*)^{-1/2} (B_{k+1} - \tilde{B}_{k+1}) \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*)^{-1/2}\|_F \\
&\leq \sqrt{n} \|\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*)^{-1/2} (B_{k+1} - \tilde{B}_{k+1}) \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*)^{-1/2}\| \\
&\leq \sqrt{n} \|\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*)^{-1/2}\|^2 \|B_{k+1} - \tilde{B}_{k+1}\| \\
&\stackrel{(4.134)}{\leq} a_4 \sigma_k
\end{aligned}$$

Χρησιμοποιώντας την παραπάνω ανισότητα η (4.128) γίνεται:

$$\|B_{k+1} - \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*)\|_M \leq [(1 - c\theta_k^2)^{1/2} + a_5 \sigma_k] \|B_k - \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*)\|_M + a_6 \sigma_k \quad (4.135)$$

Αφού $(1 - c\theta_k^2)^{1/2} \leq 1 - \left(\frac{a}{2}\right)\theta_k^2$ η (4.135) γράφεται ως:

$$\begin{aligned}
c \frac{\theta_k^2}{2} \|B_k - \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*)\|_M &\leq \\
&\leq \|B_k - \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*)\|_M - \|B_{k+1} - \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*)\|_M + \sigma_k [a_5 \|B_k - \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*)\|_M + a_6]
\end{aligned} \quad (4.136)$$

Από τη γραμμική σύγκλιση της ακολουθίας $\{x_k\}$ στο x^* (και άρα τη σύγκλιση της ακολουθίας $\{\lambda_k\}$ στο λ^*) έπεται ότι:

$$\sum_{k=1}^{\infty} \sigma_k < +\infty$$

Επομένως, προσθέτοντας και τα δύο μέρη της (4.136) έπεται ότι:

$$\left(\frac{c}{2}\right) \sum_{k=1}^{\infty} \theta_k^2 \|B_k - \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*)\|_M < +\infty \quad (4.137)$$

Αν τώρα η ακολουθία $\{\|B_k - \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*)\|_M\}$ έχει κάποιο οριακό σημείο, τότε αν κάποια υπακολουθία της $\{\|B_k - \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*)\|_M\}$ συγκλίνει στο μηδέν, αφού η ακολουθία έχει οριακό σημείο αυτό υποδηλώνει ότι ολόκληρη η ακολουθία συγκλίνει στο μηδέν και επομένως η (4.123) ικανοποιείται. Αν απ' την άλλη μεριά το όριο δεν είναι μηδέν, τότε η (4.137) υποδηλώνει ότι η ακολουθία $\{\theta_k\}$ συγκλίνει στο μηδέν και πάλι η (4.123) ικανοποιείται. Επομένως, είτε στη μία είτε στην άλλη περίπτωση η σχέση (4.123) ικανοποιείται και το θεώρημα έχει αποδειχθεί.

Για να αποδειχθεί ότι η ακολουθία $\{\|B_k - \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*)\|_M\}$ έχει ένα όριο αρκεί να αποδειχθεί ότι είναι άνω φραγμένη. Για τον σκοπό αυτό, έστω οι ακολουθίες θετικών αριθμών $\{\varphi_k\}$ και $\{\delta_k\}$ τέτοιες ώστε:

$$\varphi_{k+1} \leq (1 + \delta_k) \varphi_k + \delta_k \quad (4.138\alpha)$$

$$\sum_{k=1}^{\infty} \delta_k < +\infty \quad (4.138\beta)$$

Έστω το μ_k δίνεται από: $\mu_k = \prod_{i=1}^{k-1} (1 + \delta_i)$. Τότε, $\mu_k \geq 1$ και η (4.138β) υποδηλώνει ότι $\mu_k \leq \mu$ για κάποια σταθερά μ . Από την (4.138α) έπεται ότι:

$$\frac{\varphi_{k+1}}{\mu_{k+1}} \leq \frac{1 + \delta_k}{\mu_{k+1}} \varphi_k + \frac{\delta_k}{\mu_{k+1}} = \frac{1 + \delta_k}{\mu_k (1 + \delta_k)} \varphi_k + \frac{\delta_k}{\mu_{k+1}} \leq \frac{\varphi_k}{\mu_k} + \delta_k$$

επομένως:

$$\frac{\varphi_{m+1}}{\mu_{m+1}} \leq \frac{\varphi_1}{\mu_1} + \sum_{k=1}^{\infty} \delta_k$$

και λόγω της (4.138β) και το ότι η ακολουθία $\{\mu_k\}$ είναι φραγμένη προκύπτει ότι η ακολουθία $\{\varphi_k\}$ είναι φραγμένη.

Άρα από την (4.135) η οποία είναι της μορφής (4.138α) και με την υπόθεση ότι η $\{x_k\}$ συγκλίνει στο x^* γραμμικά, δηλαδή ισχύει:

$$\sum_{k=1}^{\infty} \|x_{k+1} - x^*\| < +\infty$$

προκύπτει ότι η ακολουθία $\|B_k - \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*)\|_M$ είναι άνω φραγμένη.

□

Στο προηγούμενο θεώρημα αξιώνεται η γραμμική σύγκλιση της $\{x_k\}$ ωστόσο αν ισχύει η ανισότητα (4.135), το οποίο συμβαίνει στην περίπτωση που η μήτρα $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*)$ είναι θετικά ορισμένη τότε, γραμμική σύγκλιση μπορεί να επιτευχθεί απαιτώντας τα $\|x_0 - x^*\|$ και $\|B_0 - \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*)\|$ να είναι αρκετά μικρά σύμφωνα με το θεώρημα που ακολουθεί.

Θεώρημα 4.23 ([3], Θεώρημα 5.4.9, σελ. 250).

Αν ισχύει:

$$\|B_{k+1} - \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*)\|_M \leq [1 + a_1 \hat{\sigma}_k] \|B_k - \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*)\|_M + a_2 \hat{\sigma}_k \quad (4.139)$$

όπου $\hat{\sigma}_k = \max\{\|x_{k+1} - x^*\|, \|x_k - x^*\|\}$, τότε υπάρχουν σταθερές ε και δ , τέτοιες ώστε για $\|x_0 - x^*\| < \varepsilon$ και $\|B_0 - \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*)\| < \delta$ η ακολουθία $\{x_k\}$ συγκλίνει γραμμικά στο x^* , δηλαδή υπάρχει μια σταθερά $\tau \in (0, 1)$ με $\|x_{k+1} - x^*\| \leq \tau \|x_k - x^*\|$.

Απόδειξη

Για να αποδειχθεί η τοπική και γραμμική σύγκλιση αποδεικνύεται επαγωγικά ότι:

$$\|B_k - \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*)\| \leq 2\delta \quad (4.140\alpha)$$

$$\|x_{k+1} - x^*\| \leq \tau \|x_k - x^*\| \quad (4.140\beta)$$

Για τον σκοπό αυτό έστω $\|\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*)^{-1}\| \leq \beta$ και $\tau \in (0, 1)$. Έστω επίσης, ε , δ τέτοια ώστε:

$$(2a_1\delta + a_2) \frac{\varepsilon}{1-\tau} \leq \delta \quad (4.141\alpha)$$

$$\beta(1+\tau)(L\varepsilon + 2\delta) \leq \tau \quad (4.141\beta)$$

όπου L είναι η σταθερά Lipschitz της $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}$ στο x^* . Προφανώς για $k=0$ το συμπέρασμα ισχύει. Έστω ότι το συμπέρασμα ισχύει για $k=0, 1, \dots, i-1$. Από τις (4.140α,β) έπεται ότι:

$$\|B_{k+1} - \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*)\| - \|B_k - \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*)\| \leq 2a_1 \delta \varepsilon \tau^k + a_2 \varepsilon \tau^k$$

Αθροίζοντας για $k=0$ μέχρι $i-1$ αποφέρει:

$$\|B_i - \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*)\| \leq \|B_0 - \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*)\| + (2a_1 \delta + a_2) \frac{\varepsilon}{1-\tau}$$

Επομένως από αυτή την ανισότητα, την (4.141α) και $\|B_0 - \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*)\| < \delta$ έχουμε

$$\|B_i - \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*)\| \leq 2\delta \quad (4.142)$$

Για την απόδειξη τώρα της (4.140β) έχουμε:

$$x_{i+1} = x_i - B_i^{-1} \nabla_x \mathcal{L}(x_i, \lambda^*) \Rightarrow x_{i+1} - x^* = x_i - x^* - B_i^{-1} \nabla_x \mathcal{L}(x_i, \lambda^*)$$

Συνεπώς:

$$\begin{aligned} B_i(x_{i+1} - x^*) &= B_i(x_i - x^*) - \nabla_x \mathcal{L}(x_i, \lambda^*) \\ &= B_i(x_i - x^*) - \nabla_x \mathcal{L}(x_i, \lambda^*) + \nabla_x \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) \\ &= -\nabla_x \mathcal{L}(x_i, \lambda^*) + \nabla_x \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) + \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*)(x_i - x^*) + [B_i - \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*)](x_i - x^*) \end{aligned}$$

Προκύπτει επομένως ότι:

$$\|x_{i+1} - x^*\| \leq \|B_i^{-1}\| \left[\|\nabla_x \mathcal{L}(x_i, \lambda^*) - \nabla_x \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) - \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*)(x_i - x^*)\| + \|B_i - \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*)\| \|x_i - x^*\| \right]$$

Από το λήμμα 4.14 παίρνουμε:

$$\|\nabla_x \mathcal{L}(x_i, \lambda^*) - \nabla_x \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) - \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*)(x_i - x^*)\| \leq \frac{L}{2} \|x_i - x^*\|^2$$

συνεπώς η παραπάνω ανισότητα γίνεται:

$$\begin{aligned} \|x_{i+1} - x^*\| &\leq \|B_i^{-1}\| \left[\|B_i - \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*)\| + \frac{L}{2} \|x_i - x^*\| \right] \|x_i - x^*\| \\ &\leq \|B_i^{-1}\| \left[2\delta + \frac{1}{2} \varepsilon \right] \|x_i - x^*\| \\ &\leq \|B_i^{-1}\| [2\delta + L\varepsilon] \|x_i - x^*\| \end{aligned} \quad (4.143)$$

Ένα φράγμα για το $\|B_i^{-1}\|$ υπολογίζεται από το λήμμα 4.12 και είναι:

$$\|B_i^{-1}\| \leq \frac{\|\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*)^{-1}\|}{1 - \|\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*)^{-1}(B_i - \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*))\|} \leq \frac{\beta}{1 - 2\beta\delta}$$

Από την (4.141β) προκύπτει:

$$2\beta\delta \leq \frac{\tau}{1+\tau} - \beta L\varepsilon \leq \frac{\tau}{1+\tau}$$

και συνεπώς έπεται ότι:

$$1 - 2\beta\delta \geq \frac{1}{1+\tau}$$

και άρα ότι $\|B_i^{-1}\| \leq \beta(1+\tau)$.

Τέλος, από την (4.143) προκύπτει ότι $\|x_{i+1} - x^*\| \leq \beta(1+\tau)(2\delta + L\varepsilon)\|x_i - x^*\|$ και χρησιμοποιώντας την (4.141β) συμπεραίνεται ότι $\|x_{i+1} - x^*\| \leq \tau\|x_i - x^*\|$.

□

4.8 Επαναληπτικός τετραγωνικός προγραμματισμός με τη μέθοδο περιοχής εμπιστοσύνης.

Η μέθοδος επαναληπτικού τετραγωνικού προγραμματισμού με την τεχνική της περιοχής εμπιστοσύνης παρουσιάζει τη σημαντική ιδιότητα του να μην απαιτείται η μήτρα Hessian $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k$ να είναι θετικά ορισμένη και ελέγχει την ποιότητα των βημάτων ακόμη και αν η μήτρα $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k$ είναι μη αντιστρέψιμη.

Ο απλούστερος τρόπος για τη μορφοποίηση της μεθόδου είναι η προσθήκη ενός περιορισμού περιοχής εμπιστοσύνης στο τετραγωνικό υποπρόβλημα ως εξής:

$$\min_p f_k + \nabla f_k^T p + \frac{1}{2} p^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k p \quad (4.144\alpha)$$

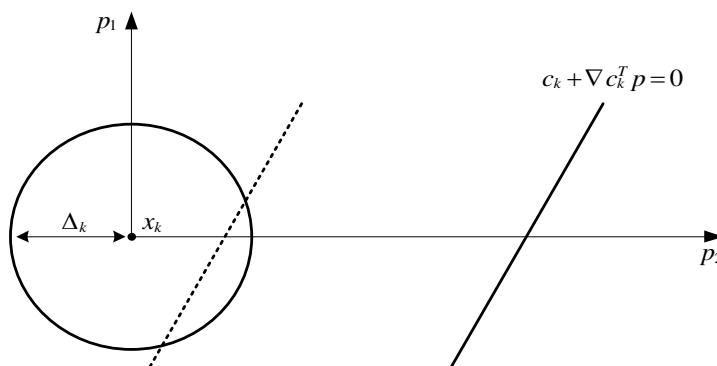
$$\nabla c_i(x_k)^T p + c_i(x_k) = 0, \quad i \in \mathcal{E} \quad (4.144\beta)$$

$$\nabla c_i(x_k)^T p + c_i(x_k) \geq 0, \quad i \in \mathcal{I} \quad (4.144\gamma)$$

$$\|p\| \leq \Delta_k \quad (4.144\delta)$$

Η ακτίνα Δ_k της περιοχής εμπιστοσύνης θα ανανεώνεται ανάλογα με τη σύγκριση της προβλεπόμενης μείωσης της συνάρτησης αξίας που χρησιμοποιείται και της πραγματικής μείωσης αυτής. Αν υπάρχει σημαντική συμφωνία μεταξύ των δύο τιμών η ακτίνα Δ_k μένει αμετάβλητη ή αυξάνεται ενώ αντίθετα αν η συμφωνία είναι ανεπαρκής μειώνεται.

Παρ' όλα αυτά το πρόβλημα μπορεί να μην έχει πάντα λύση εξαιτίας του περιορισμού της περιοχής εμπιστοσύνης. Το γεγονός αυτό απεικονίζεται στο σχήμα 4.4 για ένα πρόβλημα με έναν ισοτικό περιορισμό.



Σχήμα 4.4 Μη συμβατοί περιορισμοί.

Στο παραπάνω σχήμα, ένα οποιοδήποτε βήμα που ικανοποιεί τον περιορισμό θα ανήκει έξω από την περιοχή εμπιστοσύνης. Στη περίπτωση αυτή η αύξηση της ακτίνας της περιοχής εμπιστοσύνης για την επίλυση αυτής της ασυμβατότητας, θα ακύρωνε το σκοπό της χρήσης της περιοχής

εμπιστοσύνης μέσα στην οποία το μοντέλο απεικονίζει επακριβώς τη συμπεριφορά της αντικειμενικής συνάρτησης και των συναρτήσεων των περιορισμών και θα έβλαπτε τις ιδιότητες σύγκλισης του αλγόριθμου. Μια καταλληλότερη προσέγγιση εκφράζεται από το γεγονός ότι οι γραμμικοποιημένοι περιορισμοί δεν είναι αναγκαίο να ικανοποιούνται σε κάθε βήμα αλλά μόνο εάν ο περιορισμός της περιοχής εμπιστοσύνης το επιτρέπει. Αυτό μπορεί να επιτευχθεί σύμφωνα με την ακόλουθη τεχνική επαναδιατύπωσης ενός προβλήματος ισωτικών περιορισμών.

4.8.1 Τεχνική μετατόπισης των περιορισμών.

Θεωρούμε ένα πρόβλημα ισωτικών περιορισμών με το τετραγωνικό υποπρόβλημα:

$$\min_p f_k + \nabla f_k^T p + \frac{1}{2} p^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k p \quad (4.145\alpha)$$

$$A_k p + c_k = 0 \quad (4.145\beta)$$

$$\|p\| \leq \Delta_k \quad (4.145\gamma)$$

Στη τεχνική αυτή ο περιορισμός (4.145β) αντικαθίσταται από τον μετατοπισμένο περιορισμό:

$$A_k p + \theta c_k = 0, \quad \theta \in (0, 1] \quad (4.146)$$

έτσι που το σύνολο των περιορισμών να είναι επιτρεπτό σύνολο.

Η παράμετρος θ έχει σαν επίπτωση τη μετατόπιση της γραμμής που αντιστοιχεί στον γραμμικοποιημένο περιορισμό σε μια παράλληλη γραμμή (σχήμα 4.4 - διακεκομμένη γραμμή) η οποία τέμνει την περιοχή εμπιστοσύνης. Αν και είναι εύκολο να βρεθεί μια τιμή της παραμέτρου θ_k η οποία μετατρέπει το σύνολο των περιορισμών σε ένα επιτρεπτό σύνολο, δεν είναι απλό να επιλεγεί έτσι ώστε να εξασφαλίζεται καλή απόδοση του αλγορίθμου στην πράξη, μιας και η παράμετρος αυτή ρυθμίζει το αν και κατά πόσο το υπολογισμένο βήμα p τείνει περισσότερο στο να ικανοποιεί την επιτευξιμότητα των περιορισμών ή στο να ελαχιστοποιήσει τη συνάρτηση κόστους. Δεδομένου ότι η μέγιστη επιτρεπτή τιμή της παραμέτρου θ_k είναι αυτή για την οποία η μετατοπισμένη γραμμή του περιορισμού περνάει σχεδόν από τη τρέχουσα επανάληψη x_k , επιλέγοντας το θ_k να είναι αρκετά μικρότερο, το υπολογισμένο βήμα θα υπηρετεί λιγότερο τη βελτίωση της επιτευξιμότητας του περιορισμού $c(x)=0$ αλλά αντιθέτως θα εστιάζει στη μείωση της συνάρτησης κόστους f . Για το λόγο αυτό το βήμα υπολογίζεται σε δύο στάδια ως ακολούθως:

Στο πρώτο στάδιο διερευνάται το κατά πόσο κοντά στο να ικανοποιηθεί ο περιορισμός (4.145β) μπορούμε να φτάσουμε παραμένοντας μέσα στην περιοχή εμπιστοσύνης, επιλύοντας το ακόλουθο υποπρόβλημα η λύση v_k του οποίου καλείται το κάθετο βήμα:

$$\min_v \|A_k v + c_k\|_2 \quad (4.147\alpha)$$

$$\|v\|_2 \leq \zeta \Delta_k, \quad \zeta \in (0, 1) \quad (4.147\beta)$$

Στο επόμενο στάδιο απαιτείται το συνολικό βήμα p_k της μεθόδου να δώσει τέτοια μείωση ως προς την ικανοποίηση των περιορισμών όσο το κάθετο βήμα. Αυτό επιτυγχάνεται αντικαθιστώντας τον όρο θc_k με τον όρο $-A_k v_k$ στην (4.146) δίνοντας κατ' αυτόν τον τρόπο το νέο υποπρόβλημα:

$$\min_p f_k + \nabla f_k^T p + \frac{1}{2} p^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k p \quad (4.148\alpha)$$

$$A_k p_k = A_k v_k \quad (4.148\beta)$$

$$\|p\|_2 \leq \Delta_k \quad (4.148\gamma)$$

Είναι εμφανές ότι οι περιορισμοί (4.148β) και (4.148γ) είναι συμβατοί μιας και η επιλογή $p = v_k$ ικανοποιεί και τους δύο περιορισμούς. Το παραπάνω υποπρόβλημα διαφέρει από τα υποπροβλήματα περιοχής εμπιστοσύνης για προβλήματα χωρίς περιορισμούς, λόγω της ύπαρξης των ισωτικών περιορισμών (4.148β). Ωστόσο οι περιορισμοί αυτοί μπορούν να εξαλειφθούν και να προκύψει έτσι ένα υποπρόβλημα το οποίο να μπορεί να επιλυθεί με τις τεχνικές του κεφαλαίου 1. Το υποπρόβλημα (4.147) επιλύεται με τη μέθοδο Dogleg ως εξής:

Η μέθοδος Dogleg απαιτεί ένα βήμα Cauchy p^v το οποίο είναι το σημείο ελαχίστου της (4.147α) κατά μήκος της κατεύθυνσης αρνητικής κλίσης $-A_k^T c_k$ της (4.147α) στο σημείο $v=0$ και ένα βήμα Newton p^B το οποίο είναι το σημείο ελαχίστου της (4.147α) χωρίς περιορισμούς και το οποίο μπορεί να επιλεγεί να είναι το διάνυσμα της ελάχιστης ευκλείδειας νόρμας που ικανοποιεί τη σχέση $A_k v + c_k = 0$:

$$p^B = -A_k^T [A_k A_k^T]^{-1} c_k$$

Το κάθετο βήμα v_k υπολογίζεται ως το σημείο ελαχίστου της (4.147α) κατά μήκος της διαδρομής που ορίζεται από τα p^v και p^B (κεφάλαιο 1).

Για την επίλυση του βασικού υποπροβλήματος (4.148) χρησιμοποιείται η μέθοδος του μηδενικού χώρου. Το συνολικό βήμα p_k εκφράζεται ως:

$$p_k = Y_k p_Y + Z_k p_Z = v_k + Z_k p_Z$$

όπου $v_k = Y_k p_Y$ είναι μια συγκεκριμένη λύση της εξίσωσης $A_k p_k = -c_k$ και $Z_k p_Z$ είναι μια μετατόπιση κατά μήκος του μηδενικού χώρου των περιορισμών. Αντικαθιστώντας το p_k στο πρόβλημα (4.148) προκύπτει το ακόλουθο υποπρόβλημα της μειωμένης μεταβλητής p_Z :

$$\min_p m_k(p_Z) = (\nabla f_k + \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k v_k) Z_k p_Z + \frac{1}{2} p_Z^T Z_k^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k Z_k p_Z \quad (4.149\alpha)$$

$$\|Z_k p_Z\|_2 \leq \sqrt{\Delta_k^2 - \|v_k\|_2^2} \quad (4.149\beta)$$

όπου οι όροι στην αντικειμενική συνάρτηση οι οποίοι είναι ανεξάρτητοι του p_Z έχουν απαλειφθεί.

4.9 Το Φαινόμενο του Μαράτου.

Οι μέθοδοι αναζήτησης γραμμής και περιοχής εμπιστοσύνης εφαρμοσμένες σε προβλήματα βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς θα μπορούσαν να σχεδιαστούν έτσι ώστε κοντά στη λύση να γίνονται αποδεκτά πλήρη βήματα ($a_k=1$), προσφέροντας κατ' αυτόν τον τρόπο γρήγορη τοπική σύγκλιση. Ωστόσο για προβλήματα με περιορισμούς κάποιοι αλγόριθμοι που βασίζονται σε συναρτήσεις αξίας (ασχέτως αν πρόκειται για μεθόδους αναζήτησης γραμμής ή περιοχής εμπιστοσύνης), δεν εγγυόνται την αποδοχή πλήρη βημάτων και άρα η γρήγορη σύγκλιση μπορεί να αποτύχει λόγω του ότι απορρίπτουν βήματα τα οποία κάνουν καλή πρόοδο προς τη λύση. Αυτό το ανεπιθύμητο φαινόμενο του να μην επιτρέπεται να ληφθούν πλήρη βήματα κοντά στη λύση καλείται φαινόμενο του Μαράτου (Maratos effect) και αποικονίζεται στο σχήμα 4.5 για το εξής πρόβλημα:

$$\min f(x_1, x_2) = \tau(x_1^2 + x_2^2 - 1) - x_1, \quad x_1^2 + x_2^2 - 1 = 0 \text{ με } \tau > 1.$$

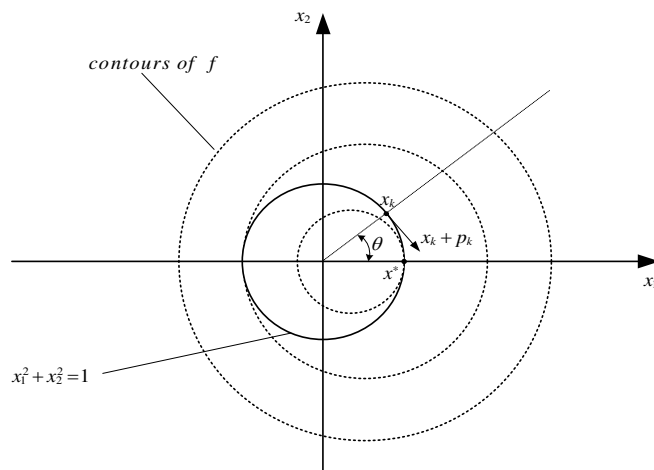
η βέλτιστη λύση του οποίου είναι $x^* = (1, 0)^T$, ο αντίστοιχος πολλαπλασιαστής Lagrange είναι $\lambda^* = \frac{1}{2} - \tau$ και $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) = I$. Έστω το επιτρεπτό σημείο της μορφής $x_k = (\cos \theta, \sin \theta)^T$ το οποίο είναι κοντά στη λύση, δηλαδή το θ είναι αρκετά μικρό. Το υποπρόβλημα ισωτικών περιορισμών υπολογίζει το βήμα $p_k = (\sin^2 \theta, -\sin \theta \cos \theta)$ το οποίο αποφέρει το δοκιμαστικό σημείο:

$$x_k + p_k = (\cos \theta + \sin^2 \theta, \sin \theta (1 - \cos \theta))^T$$

Υπολογίζεται ότι: $\frac{\|x_k + p_k - x^*\|_2}{\|x_k - x^*\|_2} = \frac{1}{2}$ και άρα το p_k συγκλίνει τετραγωνικά, ωστόσο:

$$f(x_k + p_k) = (\tau - 1)\sin^2 \theta - \cos \theta > -\cos \theta = f(x_k) \text{ και } c(x_k + p_k) = \sin^2 \theta > c(x_k) = 0$$

δηλαδή τόσο η αντικειμενική συνάρτηση όσο και η παραβίαση των περιορισμών αυξάνεται στη διάρκεια αυτού του βήματος. Στη περίπτωση αυτή, κάθε αλγόριθμος ο οποίος απαιτεί μείωση μιας συνάρτησης αξίας θα απορρίψει το πλήρες βήμα και συνεπώς οι μέθοδοι αναζήτησης γραμμής ή περιοχής εμπιστοσύνης θα εκτελούν μικρά βήματα με αποτέλεσμα την αργή σύγκλιση.



Σχήμα. 4.5 Το Φαινόμενο του Μαράτου

Υπάρχουν κυρίως δύο στρατηγικές που ξεπερνούν το φαινόμενο του Μαράτου.

- Η χρήση ενός βήματος αντιστάθμισης (ή διόρθωσης) δεύτερης τάξης \hat{p}_k το οποίο προστίθεται στο p_k και μειώνει τις παραβιάσεις των περιορισμών.
- Η χρήση μιας μη-μονότονης στρατηγικής (στρατηγική Watchdog) η οποία επιτρέπει να αυξάνεται η συνάρτηση αξίας σε συγκεκριμένες επαναλήψεις

4.9.1 Βήμα Αντιστάθμισης Δεύτερης Τάξης.

Το φαινόμενο του Μαράτου παρουσιάζεται εξαιτίας του ότι η γραμμικοποίηση των περιορισμών αποτυγχάνει να λάβει επαρκώς υπόψη τη μη-γραμμική συμπεριφορά τους, συγκεκριμένα ισχύει:

$$c(x_k + p_k) = O(\|p_k\|^2) \quad (4.150)$$

Οι δυσκολίες που σχετίζονται με το φαινόμενο του Μαράτου μπορούν να ξεπεραστούν μέσω ενός βήματος αντιστάθμισης (διόρθωσης) δεύτερης τάξης (*Second Order Correction* step) το οποίο αποτελεί ένα επιπλέον βήμα \hat{p}_k υπολογισμένο από το σημείο $x_k + p_k$ και το οποίο εξασφαλίζει επαρκή μείωση στους περιορισμούς, δηλαδή ισχύει:

$$c(x_k + p_k + \hat{p}_k) = o(\|p_k\|^2) \quad (4.151)$$

Όσον αφορά το βήμα αντιστάθμισης και για να εξασφαλιστεί η δυναμική της γρήγορης σύγκλισης, επιμένουμε η αντιστάθμιση να είναι μικρή συγκριτικά με το βήμα SQP και επομένως ότι:

$$\hat{p}_k = o(\|p_k\|) \quad (4.152)$$

Μια πιθανή εκτέλεση αυτής της τεχνικής είναι η εξής:

Έστω ότι η μέθοδος SQP έχει υπολογίσει ένα βήμα p_k μέσω του υποπρογράμματος τετραγωνικού προγραμματισμού (4.12):

$$\min_p f_k + \nabla f_k^T p + \frac{1}{2} p^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k p, \quad \begin{cases} \nabla c_i(x_k)^T p + c_i(x_k) = 0, & i \in \mathcal{E} \\ \nabla c_i(x_k)^T p + c_i(x_k) \geq 0, & i \in \mathcal{I} \end{cases}$$

Αν το βήμα αποφέρει αύξηση στη χρησιμοποιούμενη συνάρτηση αξίας, μια πιθανή αιτία είναι η ανεπαρκής προσέγγιση πρώτης τάξης των περιορισμών. Για να ξεπεραστεί αυτή η ατέλεια είναι προτιμότερο να αντικατασταθεί το p_k με s_k , τη λύση δηλαδή του κάτωθι προβλήματος (4.153), στο οποίο χρησιμοποιείται μια τετραγωνική προσέγγιση των περιορισμών:

$$\min_s \nabla f_k^T s + \frac{1}{2} s^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k s, \quad \begin{cases} c_i(x_k) + \nabla c_i(x_k)^T s + \frac{1}{2} s^T \nabla^2 c_i(x_k) s = 0, & i \in \mathcal{E} \\ c_i(x_k) + \nabla c_i(x_k)^T s + \frac{1}{2} s^T \nabla^2 c_i(x_k) s \geq 0, & i \in \mathcal{I} \end{cases} \quad (4.153)$$

Παρ' όλα αυτά, ακόμη και αν η μήτρα Hessian των περιορισμών είναι διαθέσιμη το παραπάνω υποπρόβλημα είναι αρκετά δύσκολο να επιλυθεί. Αντ' αυτού, οι περιορισμοί αποτιμούνται στο

νέο σημείο $x_k + p_k$ και γίνεται χρήση της ακόλουθης προσέγγισης:

Αγνοώντας τους όρους τρίτης τάξης προκύπτει από το θεώρημα Taylor:

$$c_i(x_k + p_k) = c_i(x_k) + \nabla c_i(x_k)^T p_k + \frac{1}{2} p_k^T \nabla^2 c_i(x_k) p_k \quad (4.154)$$

και υποθέτοντας ότι κοντά στο x_k το βήμα s_k δεν θα είναι πολύ διαφορετικό από το p_k δηλαδή θα ισχύει $p_k^T \nabla^2 c_i(x_k) p_k \approx s^T \nabla^2 c_i(x_k) s$ τότε η (4.154) γίνεται:

$$\frac{1}{2} s^T \nabla^2 c_i(x_k) s \approx c_i(x_k + p_k) - c_i(x_k) - \nabla c_i(x_k)^T p_k \quad (4.155)$$

Από τις (4.153) και (4.155) έπεται ότι:

$$\begin{aligned} c_i(x_k) + \nabla c_i(x_k)^T s + \frac{1}{2} s^T \nabla^2 c_i(x_k) s &\approx c_i(x_k) + \nabla c_i(x_k)^T s + [c_i(x_k + p_k) - c_i(x_k) - \nabla c_i(x_k)^T p_k] \\ &= [c_i(x_k + p_k) - \nabla c_i(x_k)^T p_k] + \nabla c_i(x_k)^T s \end{aligned} \quad (4.156)$$

Μέσω της (4.156) το πρόβλημα (4.153) επαναδιατυπώνεται ως εξής:

$$\min_s \nabla f_k^T s + \frac{1}{2} s^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k s, \quad \begin{cases} [c_i(x_k + p_k) - \nabla c_i(x_k)^T p_k] + \nabla c_i(x_k)^T s = 0, & i \in \mathcal{E} \\ [c_i(x_k + p_k) - \nabla c_i(x_k)^T p_k] + \nabla c_i(x_k)^T s \geq 0, & i \in \mathcal{I} \end{cases} \quad (4.157)$$

Έστω s_k η λύση του (4.157). Παίρνοντας $s_k = p_k + \hat{p}_k$ και χρησιμοποιώντας το μέσα στο πρόβλημα (4.157) λαμβάνουμε ότι το \hat{p}_k είναι η λύση του προβλήματος:

$$\min_{\hat{p}} \nabla f_k^T (p_k + \hat{p}) + \frac{1}{2} (p_k + \hat{p})^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k (p_k + \hat{p}), \quad \begin{cases} c_i(x_k + p_k) + \nabla c_i(x_k)^T \hat{p} = 0 \\ c_i(x_k + p_k) + \nabla c_i(x_k)^T \hat{p} \geq 0 \end{cases} \quad (4.158)$$

Το πρόβλημα (4.158) μπορεί επίσης να γραφτεί και ως εξής:

$$\min_{\hat{p}} \nabla f_k^T \hat{p} + \frac{1}{2} \hat{p}^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k \hat{p}, \quad \begin{cases} c_i(x_k + p_k) + \nabla c_i(x_k)^T \hat{p} = 0, & i \in \mathcal{E} \\ c_i(x_k + p_k) + \nabla c_i(x_k)^T \hat{p} \geq 0, & i \in \mathcal{I} \end{cases} \quad (4.159)$$

το οποίο είναι όμοιο με το αρχικό πρόβλημα με τους σταθερούς όρους των περιορισμών αποτιμημένους στο $x_k + p_k$, αντί για το x_k .

Το βήμα SQP δεν απαιτεί εντατική υπολογιστική προσπάθεια παρ'όλα αυτά είναι προτιμώτερο να μην εφαρμόζεται κάθε φορά που η συνάρτηση αξίας αυξάνεται. Μια στρατηγική είναι το βήμα αυτό να χρησιμοποιείται μόνο όταν η αύξηση της συνάρτησης αξίας συνοδεύεται από την αύξηση της νόρμας των περιορισμών. Υπάρχουν διάφοροι τρόποι υπολογισμού μιας αντιστάθμισης δεύτερης τάξης. Για λόγους απλότητας θεωρείται ένα πρόβλημα ισοτικών περιορισμών. Η απλοποίηση αυτή ισοδυναμεί με την υπόθεση ότι οι ενεργοί περιορισμοί προσδιορίζονται μετά από πεπερασμένο αριθμό πολλών επαναλήψεων, περίπτωση κατά την οποία το γενικό πρόβλημα ανάγεται τοπικά σε ένα πρόβλημα ισοτικών περιορισμών:

$$\min_p \nabla f_k^T p + \frac{1}{2} p^T B_k p, \quad c_i(x_k) + \nabla c_i(x_k)^T p = 0, \quad i \in \mathcal{E} \cup \{\mathcal{A}(x^*) \cap \mathcal{I}\} \quad (4.160)$$

όπου B_k είναι μια προσέγγιση της μήτρας Hessian της Λανγκρανζιανής συνάρτησης.

Ένα γενικό βήμα αντιστάθμισης δεύτερης τάξης \hat{p}_k είναι η λύση του συστήματος:

$$\begin{pmatrix} B_k^c & (-A_k^c)^T \\ A_k^c & o \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{p}_k \\ \lambda_{k+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\nabla f_k^c \\ -c(x_k + p_k) \end{pmatrix} \quad (4.161)$$

για κάποιες κατάλληλες τιμές των B_k^c , A_k^c και ∇f_k^c .

Ένας τρόπος υπολογισμού του \hat{p}_k είναι να κινηθούμε προς τα πίσω όσο το δυνατόν γρηγορότερα προς τους περιορισμούς. Αυτό υποδεικνύει τον υπολογισμό μιας λύσης ελάχιστης νόρμας της εξίσωσης $c(x_k + p_k) + \nabla c(x_k + p_k)\hat{p}_k = 0$ το οποίο αντιστοιχεί στην επιλογή $A_k^c = \nabla c(x_k + p_k)$. Αυτό όμως προϋποθέτει τον επαναπροσδιορισμό των περιορισμών και της Ιακωβιανής μήτρας αυτών στο $x_k + p_k$ και άρα μια άλλη επιλογή είναι η εύρεση μιας λύσης ελάχιστης νόρμας της εξίσωσης $c(x_k + p_k) + \nabla c(x_k)\hat{p}_k = 0$ το οποίο αντιστοιχεί στην επιλογή $A_k^c = \nabla c(x_k)$. Η επιλογή αυτή του A_k^c μαζί με τις επιλογές $B_k^c = B_k$, $\nabla f_k^c = \nabla f_k = \nabla f(x_k)$ παρέχει την παραδοσιακή αντιστάθμιση δεύτερης τάξης των Mayne και Polak [22], Coleman και Conn [8] και Fletcher [23].

Προσθέτοντας ένα βήμα αντιστάθμισης το οποίο είναι κάθετο στους περιορισμούς και το οποίο μειώνει την παραβίασή τους, η επανάληψη SQP υπερνικά τις δυσκολίες που σχετίζονται με το φαινόμενο του Μαράτου.

Λόγω του ότι το \hat{p}_k υπολογίζεται αποτιμώντας το διάνυσμα των περιορισμών c σε ένα σημείο διαφορετικό από το x_k , δεν είναι δυνατόν να εγγραφεί ότι το $p_k + \hat{p}_k$ αποτελεί μια κατεύθυνση καθόδου της χρησιμοποιούμενης συνάρτησης αξίας φ_{μ_k} στο x_k και επομένως μια αναζήτηση γραμμής κατά μήκος αυτής της κατεύθυνσης ίσως είναι αδύνατη.

Ο αλγόριθμος 4.5 πιο κάτω ([2], Αλγόριθμος 15.2, σελ. 443), χρησιμοποιεί μια συνάρτηση αξίας μαζί με μια στρατηγική αναζήτησης γραμμής και ένα βήμα αντιστάθμισης 2^{ης} τάξης, με την υπόθεση ότι η κατεύθυνση έρευνας p_k και η παράμετρος ποινής μ_k η οποία διατηρείται αμετάβλητη μέχρι να προσδιοριστεί ένα επιτυχημένο βήμα, υπολογίζονται έτσι ώστε το p_k να είναι μια κατεύθυνση καθόδου για τη συνάρτηση αξίας. Στον αλγόριθμο αυτό εάν το πλήρες βήμα $\alpha_k = 1$ δεν οδηγεί σε επαρκή μείωση της συνάρτησης αξίας δοκιμάζεται το βήμα αντιστάθμισης πριν τη διαδικασία backtracking κατά μήκος του p_k .

Μετά από έναν πεπερασμένο αριθμό επαναλήψεων του αλγόριθμου, η τιμή $\alpha_k = 1$ παράγει πάντα μια νέα επανάληψη x_{k+1} η οποία έχει είτε την μορφή $x_{k+1} = x_k + p_k$ είτε την μορφή $x_{k+1} = x_k + p_k + \hat{p}_k$ και επομένως η συνάρτηση αξίας δεν παρεμβαίνει στην επανάληψη, επιτυγχάνοντας με αυτόν τον τρόπο υπεργραμμική σύγκλιση όπως και για τον τοπικό αλγόριθμο.

Αλγόριθμος 4.5 (Αλγόριθμος με βήμα αντιστάθμισης 2^{ης} τάξης)

Choose parameters $\eta \in (0, 1/2)$ and τ_1, τ_2 with $0 < \tau_1 < \tau_2 < 1$

Choose initial point x_0 and approximate Hessian B_0

For $k = 0, 1, 2, \dots$

Repeat until a convergence test is satisfied

 Compute a search direction p_k

 Set $\alpha_k = 1$

 Set newpoint=false

 While newpoint=false

 If $\varphi(x_k + \alpha_k p_k; \mu) \leq \varphi(x_k; \mu) + \eta D(\varphi(x_k; \mu); p_k)$

 Set $x_{k+1} = x_k + p_k$

 Set newpoint=true

 Else if $\alpha_k = 1$

 Compute \hat{p}_k

 If $\varphi(x_k + p_k + \hat{p}_k; \mu) \leq \varphi(x_k; \mu) + \eta D(\varphi(x_k; \mu); p_k)$

 Set $x_{k+1} = x_k + p_k$

 Set newpoint=true

 Else

 Choose new α_k in $[\tau_1 \alpha_k, \tau_2 \alpha_k]$

 End

 Else

 Choose new α_k in $[\tau_1 \alpha_k, \tau_2 \alpha_k]$

 End

 End (while)

End (repeat)

- **Τοπική Σύγκλιση**

Έστω το πρόβλημα ισωτικών περιορισμών

$$\min f(x), \quad c(x) = 0 \quad (4.162)$$

Για να αποδειχθεί ότι το μοναδιαίο μήκος βήματος $\alpha_k = 1$ γίνεται αποδεκτό όταν το x_k είναι κοντά σε μια ισχυρή λύση του προβλήματος (4.162), γίνονται οι ακόλουθες υποθέσεις:

Υποθέσεις 4.3

Τ σημείο x^* είναι τοπικό ελάχιστο του προβλήματος (4.162) στο οποίο ικανοποιούνται οι ακόλουθες συνθήκες:

α. Οι συναρτήσεις f και c είναι δύο φορές συνεχώς διαφορίσιμες σε μια γειτονιά του x^* .

β. Ο πίνακας $A(x^*)$ είναι πλήρους βαθμού δηλαδή το x^* είναι ένα σημείο KKT του (4.162), δηλαδή υπάρχει ένα διάνυσμα λ^* τέτοιο ώστε: $\nabla_x \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) = \nabla f(x^*) - A(x^*)^T \lambda^* = 0$.

γ. Ο πίνακας $B_k^c = B_k$ είναι θετικά ορισμένος στον μηδενικό χώρο του πίνακα A_k για όλα τα (x_k, λ_k) κοντά στα (x^*, λ^*) , δηλαδή $p^T B_k p \geq m \|p\|^2, \forall p$ τέτοιο ώστε $A(x_k)p = 0, \forall k$.

Κάτω από αυτές τις υποθέσεις το βήμα αντιστάθμισης εγγυάται τη μείωση της συνάρτησης αξίας κοντά στο (x^*, λ^*) σύμφωνα με την ακόλουθη πρόταση.

Πρόταση 4.24 ([6], Πρόταση 17.7, σελ. 311).

Έστω οι υποθέσεις 4.3 ικανοποιούνται, $\{x_k\}$ είναι μία ακολουθία η οποία συγκλίνει στο x^* και το p_k ικανοποιεί τις συνθήκες βελτίστου πρώτης τάξης του προβλήματος (4.160). Έστω επίσης το \hat{p}_k ορίζεται ως η λύση ελάχιστης νόρμας της εξίσωσης $c(x_k + p_k) + \nabla c(x_k)^T \hat{p}_k$ και η οποία δίνεται ως:

$$\hat{p}_k = -A_k^T (A_k A_k^T)^{-1} c(x_k + p_k) \quad (4.163)$$

Τότε για $\eta \in (0, 1/2)$ και k αρκετά μεγάλο ισχύει: $\varphi(x_k + p_k + \hat{p}_k; \mu) \leq \varphi(x_k; \mu) + \eta D(\varphi(x_k; \mu); p_k)$

Απόδειξη

Λόγω της υπόθεσης ομαλότητας των συναρτήσεων f και c , του περιορισμού $c(x_k) + A_k p_k = 0$, του ορισμού του \hat{p}_k αλλά και του ότι το (x^*, λ^*) είναι οι βέλτιστες τιμές, λαμβάνεται ένα ανάπτυγμα της $\varphi(x_k + p_k + \hat{p}_k; \mu)$ με ακρίβεια της τάξεως $o(\|d_k\|^2)$ ως ακολούθως:

Αρχικά, οι υποθέσεις 4.3α και 4.3β υποδηλώνουν ότι υπάρχει μια σταθερά γ_0 τέτοια ώστε για όλα τα x κοντά στο x^* :

$$\|A(x)[A(x)^T A(x)]^{-1}\| \leq \gamma_0 \quad (4.164)$$

Προκύπτουν επαναληπτικά:

$$c(x_k + p_k) = c(x_k) + A_k p_k + \frac{1}{2} c''(x_k) p_k^2 + o(\|p_k\|^2) = c(x_k) + A_k p_k + \frac{1}{2} c''(x^*) p_k^2 + o(\|p_k\|^2) = \frac{1}{2} c''(x^*) p_k^2 + o(\|p_k\|^2)$$

$$\hat{p}_k = -A_k^T (A_k A_k^T)^{-1} c(x_k + p_k) \leq \gamma_0 \left[\frac{1}{2} c''(x^*) p_k^2 + o(\|p_k\|^2) \right] = O(\|p_k\|^2)$$

$$c(x_k + p_k + \hat{p}_k) = c(x_k + p_k) + A(x_k + p_k) \hat{p}_k + o(\|\hat{p}_k\|) = o(\|\hat{p}_k\|) = o(\|p_k\|^2)$$

$$-A_k^T (A_k A_k^T)^{-1} \nabla f_k = \lambda^* - A_k^T (A_k A_k^T)^{-1} (\nabla f_k + A_k^T \lambda^*) = \lambda^* + o(1)$$

$$\nabla f_k^T \hat{p}_k = -A_k^T (A_k A_k^T)^{-1} \nabla f_k^T c(x_k + p_k) = \lambda^{*T} c(x_k + p_k) + o(\|p_k\|^2) = \frac{1}{2} \lambda^{*T} c''(x^*) p_k^2 + o(\|p_k\|^2)$$

$$\begin{aligned} f(x_k + p_k + \hat{p}_k) &= f(x_k) + \nabla f_k^T (p_k + \hat{p}_k) + \frac{1}{2} (p_k + \hat{p}_k)^T \nabla^2 f_k (p_k + \hat{p}_k) + o(\|p_k + \hat{p}_k\|^2) \\ &= f(x_k) + \nabla f_k^T (p_k + \hat{p}_k) + \frac{1}{2} p_k^T \nabla^2 f_k p_k + \frac{1}{2} \hat{p}_k^T \nabla^2 f_k \hat{p}_k + o(\|p_k\|^2) \\ &= f(x_k) + \nabla f_k^T (p_k + \hat{p}_k) + \frac{1}{2} p_k^T \nabla^2 f(x^*) p_k + o(\|x_k - x^*\|^2) + \frac{1}{2} \hat{p}_k^T \nabla^2 f_k \hat{p}_k + o(\|p_k\|^2) \\ &= f(x_k) + \nabla f_k^T (p_k + \hat{p}_k) + \frac{1}{2} p_k^T \nabla^2 f(x^*) p_k + \frac{1}{2} \hat{p}_k^T \nabla^2 f_k \hat{p}_k + o(\|p_k\|^2) \\ &= f(x_k) + \nabla f_k^T (p_k + \hat{p}_k) + \frac{1}{2} p_k^T \nabla^2 f(x^*) p_k + O(\|p_k\|^4) + o(\|p_k\|^2) \\ &= f(x_k) + \nabla f_k^T (p_k + \hat{p}_k) + \frac{1}{2} p_k^T \nabla^2 f(x^*) p_k + o(\|p_k\|^2) \\ &= f(x_k) + \nabla f_k^T p_k + \frac{1}{2} \lambda^{*T} c''(x^*) p_k^2 + \frac{1}{2} p_k^T \nabla^2 f(x^*) p_k + o(\|p_k\|^2) \\ &= f(x_k) + \nabla f_k^T p_k + \frac{1}{2} p_k^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) p_k + o(\|p_k\|^2) \\ &= f(x_k) + \nabla f_k^T p_k + \frac{1}{2} p_k^T B_k p_k + o(\|p_k\|^2) \end{aligned}$$

Με τις παραπάνω εκτιμήσεις, την υπόθεση ότι $\|\lambda_{k+1}\|_\infty < \mu < \bar{\mu}$ όπου το $\bar{\mu}$ είναι μια σταθερά και το γεγονός ότι η κατά κατεύθυνση παράγωγος της φ_1 στη κατεύθυνση p_k για το πρόβλημα ισοτικών περιορισμών μπορεί να γραφτεί ως:

$$D(\varphi_1(x_k; \mu); p_k) = \nabla f_k^T p_k - \mu \|c_k\|_1 \quad (4.165)$$

προκύπτει ότι:

$$\begin{aligned} & \varphi_1(x_k + p_k + \hat{p}_k; \mu) - \varphi_1(x_k; \mu) - \eta D(\varphi_1(x_k; \mu); p_k) \\ &= \nabla f_k^T p_k + \frac{1}{2} p_k^T B_k p_k - \mu \|c_k\|_1 - \eta D(\varphi_1(x_k; \mu); p_k) + o(\|p_k\|^2) \quad (4.166) \\ &\stackrel{(4.159)}{=} (1 - \eta) D(\varphi_1(x_k; \mu); p_k) + \frac{1}{2} p_k^T \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) p_k + o(\|p_k\|^2) \end{aligned}$$

Η κατά κατεύθυνση παράγωγος ξαναγράφεται με σκοπό να αποδειχθεί ότι το δεξιό μέλος είναι ασυμπτωτικά μη θετικό ως ακολούθως:

$$D(\varphi_1(x_k; \mu); p_k) = -p_k^T B_k p_k - (\mu - \|\lambda_{k+1}\|_\infty) \|c_k\|_1 \leq -p_k^T B_k p_k \quad (4.167)$$

Επομένως η (4.166) γίνεται:

$$\begin{aligned} & \varphi_1(x_k + p_k + \hat{p}_k; \mu) - \varphi_1(x_k; \mu) - \eta D(\varphi_1(x_k; \mu); p_k) \leq -(1 - \eta) p_k^T B_k p_k + \frac{1}{2} p_k^T B_k p_k + o(\|p_k\|^2) \\ &= (\eta - \frac{1}{2}) p_k^T B_k p_k + o(\|p_k\|^2) \end{aligned}$$

Για μεγάλα k το δεξιό μέλος είναι μη θετικό δεδομένου ότι ο πίνακας B_k είναι θετικά ορισμένος από υπόθεση.

□

4.9.2 Μη-μονότονη στρατηγική Watchdog.

Οι ανεπάρκειες που προκαλούνται από το φαινόμενο του Μαρράτου μπορούν επίσης να αποφευχθούν επιτρέποντας περιστασιακά σε συγκεκριμένες επαναλήψεις να χρησιμοποιούν ένα χαλαρό κριτήριο αντί του καθιερωμένου για να αποφανθούν κατά πόσον ή όχι το δοκιμαστικό μήκος βήματος είναι αποδεκτό. Το χαλαρό κριτήριο μπορεί να είναι οποιαδήποτε συνθήκη η οποία δεν είναι ποτέ περισσότερο απαγορευτική από τη καθιερωμένη, για παράδειγμα μπορεί να είναι η αποδοχή του πρώτου δοκιμαστικού μήκους βήματος σε όλες τις περιπτώσεις. Συνεπώς, η στρατηγική watchdog αποδέχεται περιστασιακά βήματα τα οποία αυξάνουν τη συνάρτηση αξίας και τα οποία αποκαλούνται χαλαρά βήματα.

Αν δεν έχει προκληθεί μέσα σε συγκεκριμένο αριθμό επαναλήψεων του χαλαρού βήματος (\hat{t} επαναλήψεις για παράδειγμα) επαρκής μείωση της συνάρτησης αξίας, τότε ο αλγόριθμος επιστρέφει στην επανάληψη πριν το χαλαρό βήμα και εκτελείται μια κανονική επανάληψη μέσω της μεθόδου αναζήτησης γραμμής ή κάποιας άλλης τεχνικής που θα εξαναγκάζει σε μείωση την συνάρτηση αξίας.

Σε αντίθεση με την αντιστάθμιση 2^{n_5} τάξης η οποία βελτιώνει μόνο την ικανοποίηση των περιορισμών, η στρατηγική watchdog αποσκοπεί τόσο στη βελτίωση της επιτευξιμότητας (feasibility) του αλγόριθμου όσο και της λύσης υπό την έννοια ότι κάθε αύξηση στη συνάρτηση αξίας θα αντισταθμιστεί από τα επακόλουθα βήματα. Στον αλγόριθμο watchdog που ακολουθεί ([2], Αλγόριθμος 15.3, σελ.445) χρησιμοποιείται η μέθοδος αναζήτησης γραμμής και η χρησιμοποιούμενη συνάρτηση αξίας (στην προκειμένη περίπτωση η l_1) επιτρέπεται να αυξάνεται σε ένα μόνο βήμα, δηλαδή $\hat{t}=1$, πριν επιμείνουμε σε μια επαρκή μείωση. Τέλος θεωρείται ότι η παράμετρος ποινής μ δεν μεταβάλλεται έως ότου ολοκληρωθεί ένας επιτυχημένος κύκλος.

Αλγόριθμος 4.6 (Αλγόριθμος Watchdog)

Choose $n \in (0, 0.5)$ and an initial point x_0

Set $k=0$, $S=\{0\}$

repeat until a termination test is satisfied.

Compute a step p_k

Set $x_{k+1}=x_k+p_k$

If $\varphi_\mu(x_{k+1}; \mu) \leq \varphi_\mu(x_k; \mu) + \eta D(\varphi_\mu(x_k; \mu); p_k)$

Set $k=k+1$, $S+S \cup \{k\}$

Else if $\varphi_\mu(x_{k+1}; \mu) > \varphi_\mu(x_k; \mu) + \eta D(\varphi_\mu(x_k; \mu); p_k)$

Compute p_{k+1} from x_{k+1}

Find a_{k+1} such that: $\varphi_\mu(x_{k+2}; \mu) \leq \varphi_\mu(x_{k+1}; \mu) + \eta a_{k+1} D(\varphi_\mu(x_{k+1}; \mu); p_k)$

Set $x_{k+2}=x_{k+1}+a_{k+1}p_{k+1}$

If $\varphi_\mu(x_{k+1}; \mu) \leq \varphi_\mu(x_k; \mu)$ or $\varphi_\mu(x_{k+2}; \mu) \leq \varphi_\mu(x_k; \mu) + \eta D(\varphi_\mu(x_k; \mu); p_k)$

Set $k=k+2$, $S+S \cup \{k\}$

Else if $\varphi_\mu(x_{k+2}; \mu) > \varphi_\mu(x_k; \mu)$

Return to x_k and search along p_k

Find a_k such that $\varphi_\mu(x_{k+3}; \mu) \leq \varphi_\mu(x_k; \mu) + \eta a_k D(\varphi_\mu(x_k; \mu); p_k)$

Set $x_{k+3}=x_k+a_k p_k$

Set $k=k+3$, $S+S \cup \{k\}$

Else compute a direction p_{k+2} from x_{k+2}

Find a_{k+2} such that $\varphi_\mu(x_{k+3}; \mu) \leq \varphi_\mu(x_{k+2}; \mu) + \eta a_{k+2} D(\varphi_\mu(x_{k+2}; \mu); p_{k+2})$

Set $x_{k+3}=x_{k+2}+a_{k+2}p_{k+2}$

Set $k=k+3$, $S+S \cup \{k\}$

End (if)

End (if)

End (repeat)

Το σύνολο S στον παραπάνω αλγόριθμο αναγνωρίζει τις επαναλήψεις για τις οποίες έχει επιτευχθεί επαρκής μείωση στη συνάρτηση αξίας και προκύπτει ότι τουλάχιστον το ένα τρίτο των επαναλήψεων ανήκουν στο S . Στην πράξη τυπικές τιμές του \hat{t} είναι 5 ή 8.

Ένα πλεονέκτημα της στρατηγικής watchdog έναντι της στρατηγικής αντιστάθμισης 2^{ης} τάξης αποτελεί το γεγονός ότι ίσως απαιτεί λιγότερες αποτιμήσεις των συναρτήσεων των περιορισμών μιας και στη καλύτερη περίπτωση τα περισσότερα βήματα θα είναι πλήρη SQP βήματα και θα υπάρχει σπάνια η ανάγκη επιστροφής σε προηγούμενο σημείο.

Για το γενικό μη γραμμικό πρόβλημα βελτιστοποίησης το υποπρόβλημα τετραγωνικού προγραμματισμού (4.12) με την μήτρα B_k στη θέση της $\nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k$ είναι:

$$\min_p f_k + \nabla f_k^T p + \frac{1}{2} p^T B_k p, \quad \begin{cases} \nabla c_i(x_k)^T p + c_i(x_k) = 0, & i \in \mathcal{E} \\ \nabla c_i(x_k)^T p + c_i(x_k) \geq 0, & i \in \mathcal{I} \end{cases} \quad (4.168)$$

Στο [10] θεωρείται ότι οι πίνακες B_k είναι ομοιόμορφα φραγμένοι, ότι οι ιδιοτιμές τους είναι φραγμένες μακριά από το μηδέν και ότι οι περιορισμοί είναι συμβατοί. Με αυτές τις υποθέσεις και κάποιες άλλες συνθήκες αποδεικνύεται ότι όλα τα σημεία συσσώρευσης της ακολουθίας $\{x_k\}$ είναι σημεία KKT. Μια από τις συνθήκες στην ανάλυση του Han [10], είναι ότι οι παράμετροι μ είναι σταθερές και ισχύει $\mu > \|\lambda + 1\|_\infty \forall k$ γι' αυτό το λόγο οι παράμετροι αυτοί κάποιες φορές πρέπει να είναι αρκετά μεγάλες. Ωστόσο μεγάλες τιμές των παραμέτρων αναγκάζουν τη συνάρτηση αξίας h να έχει απότομες πλευρές στο σύνορο της επιτρεπτής περιοχής και συνεπώς για την ικανοποίηση της συνθήκης επαρκούς μειώσεως (4.62) ίσως χρειάζονται πολλές επαναλήψεις. Ένας αλγόριθμος ο οποίος επιλύει το πρόβλημα και μεταβάλλει τις παραμέτρους μ_k αυτόματα σε κάθε επανάληψη έτσι που $\mu_k > \|\lambda + 1\|_\infty$ περιγράφεται από τον Powell [17], ωστόσο η αυτόματη μεταβολή του μ παραβιάζει τη σύγκλιση του αλγόριθμου.

Η στρατηγική watchdog χαλαρώνει τη συνθήκη αναζήτησης γραμμής στο x_{k+1} με τέτοιο τρόπο που να διατηρεί την ιδιότητα της γενικής σύγκλισης, αφήνοντας τις παραμέτρους να είναι σταθερές οι οποίες ικανοποιούν τη συνθήκη του Han αλλά επιτρέποντας τη παραβίαση της συνθήκης επαρκούς μειώσεως της συνάρτησης αξίας. Στην περίπτωση αυτή πολλές από τις ανεπάρκειες στα όρια των περιορισμών αποφεύγονται.

Ένα επιπλέον πλεονέκτημα της τεχνικής watchdog είναι η υπεργραμμική τάξη σύγκλισης έτσι που για όλα τα k με k αρκετά μεγάλο, το μήκος βήματος είναι $a_k = 1$.

Για το σκοπό της ανάλυσης της σύγκλισης η συνθήκη επαρκούς μειώσεως (4.62):

$$\varphi(x_k + a_k p_k; \mu) \leq \varphi(x_k; \mu) + \eta a_k D(\varphi(x_k; \mu); p_k), \quad \eta \in (0, 1)$$

γράφεται ως εξής:

$$\begin{aligned} \varphi(x_k + a_k p_k; \mu) &\leq \varphi(x_k; \mu) - \eta [\hat{\varphi}(0) - \hat{\varphi}(a_k p_k)] \\ &= \varphi(x_k; \mu) - \eta [\varphi(x_k; \mu) - \hat{\varphi}(a_k p_k)] \end{aligned} \quad (4.169)$$

όπου $\hat{\varphi}_l$ είναι η προσέγγιση της φ_l και η οποία προκύπτει αντικαθιστώντας τις συναρτήσεις $f(x)$ και $c_i(x)$ με τις προσεγγιστικές σειρές Taylor πρώτης τάξης αυτών γύρω από το $x=x_k$. Θέτουμε επίσης με l να είναι ο μεγαλύτερος ακέραιος στο διάστημα $[0, k]$ τέτοιος που ο όρος $\varphi_l(x_i; \mu)$ είναι ο μικρότερος σε τιμή από τους αριθμούς $\varphi_i(x_i; \mu)$, $i=0,1,\dots,k$.

▪ **Υπεργραμμική Σύγκλιση της Στρατηγικής Watchdog**

Υπεργραμμική σύγκλιση προκύπτει όταν:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|x_k + p_k - x^*\|}{\|x_k - x^*\|} = 0 \quad (4.170)$$

όπου το x^* είναι ένα σημείο KKT του προβλήματος βελτιστοποίησης. Άρα το ερώτημα είναι κατά πόσον η συνθήκη επαρκούς μειώσεως (4.169) επιτρέπει μήκος βήματος ένα. Για το σκοπό αυτό υποθέτουμε ότι η ακολουθία που παράγεται από τη τεχνική watchdog $\{x_k\}$ συγκλίνει στο σημείο x^* στο οποίο οι κλίσεις των ενεγών περιορισμών $\nabla c_i(x^*)$, $i \in \mathcal{A}(x^*)$ είναι γραμμικώς ανεξάρτητες. Υποθέτουμε επίσης ότι η συνθήκη αυστηρής συμπληρωματικότητας ικανοποιείται και ότι οι παράμετροι $\{\mu_i, i \in \mathcal{A}(x^*)\}$ ικανοποιούν την ανισότητα $\mu_i > |\lambda_i^*|$, $i \in \mathcal{A}(x^*)$. Τέλος υποθέτουμε ότι οι πίνακες $\{B_k\}$ είναι φραγμένοι και ότι οι ικανή συνθήκη 2^{ης} τάξης ικανοποιείται, δηλαδή αν το p είναι οποιαδήποτε κατεύθυνση ορθογώνια στις κλίσεις $\nabla c_i(x^*)$ τότε ισχύει $p^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) p \geq \nu_1 \|p\|^2$ όπου ν_1 είναι μια θετική σταθερά.

Η απόδειξη της υπεργραμμικής σύγκλισης της τεχνικής watchdog υπό τις προαναφερόμενες συνθήκες βασίζεται στα τρία λήμματα που ακολουθούν.

Λήμμα 4.25 ([24], Λήμμα 1, σελ. 9).

Υπάρχουν θετικές σταθερές ν_2, ν_3 και ν_4 τέτοιες ώστε για $\|x - x^*\| \leq \nu_4$

$$\varphi_l(x; \mu) \geq \mathcal{L}(x, \lambda^*) \quad (4.171)$$

$$\text{και } \varphi_l(x; \mu) \geq f(x^*) + \nu_2 \|c(x)\| + \nu_3 \|x - x^*\|^2 \quad (4.172)$$

□

Λήμμα 4.26 ([24], Λήμμα 2, σελ. 10).

Υπάρχει ένας ακέραιος αριθμός K_1 και μια θετική σταθερά ν_5 τέτοια ώστε $\forall k \geq K_1$:

$$\varphi_l(x_k; \mu) - f(x^*) - \eta [\varphi_l(x_k; \mu) - \hat{\varphi}_l(p_k)] \geq \nu_5 [\varphi_l(x_k; \mu) - f(x^*)] \quad (4.173)$$

□

Λήμμα 4.27 ([24], Λήμμα 3, σελ. 11).

Υπάρχουν σταθερές ν_6 και ν_7 τέτοιες ώστε $\forall k \geq K_1$:

$$\|c(x_k + p_k)\| \leq \nu_6 \|x_k - x^*\|^2 \quad (4.174)$$

$$\varphi_1(x_k + p_k; \mu) \leq f(x^*) + \nu_7 \|x_k - x^*\|^2 \quad (4.175)$$

□

Θεώρημα 4.28 Υπεργραμμική σύγκλιση ([24], Θεώρημα 2, σελ. 11).

Αν το χαλαρό κριτήριο της τεχνικής watchdog είναι το να γίνει αποδεκτό το πρώτο δοκιμαστικό μήκος βήματος $a_k=1$ και αν οι συνθήκες καθορισμένες πριν το Λήμμα 4.25 ικανοποιούνται, τότε υπάρχει ένα K_2 τέτοιο ώστε $\forall k \geq K_2$, $x_{k+1} = x_k + p_k$.

Απόδειξη

Έστω όταν $k = K_2$ ο αλγόριθμος χρησιμοποιεί το χαλαρό κριτήριο. Στη περίπτωση αυτή $l = k$ και $x_{k+1} = x_k + p_k$. Αν δεν επέρχεται μια επαρκής μείωση της συνάρτησης αξίας, δηλαδή:

$$\varphi_1(x_{k+1}; \mu) > \varphi_1(x_k; \mu) - \eta[\varphi_1(x_k; \mu) - \hat{\varphi}_1(p_k)] \quad (4.176)$$

τότε στην επόμενη επανάληψη χρησιμοποιείται το καθιερωμένο κριτήριο και συνεπώς πρέπει να αποδειχθεί ότι η συνθήκη (4.169) επιτρέπει μήκος βήματος ένα. Από την (4.175) προκύπτει ότι:

$$\varphi_1(x_k + p_k; \mu) \leq f(x^*) + \nu_7 \|x_k - x^*\|^2$$

Αν το K_2 είναι αρκετά μεγάλο (όχι μικρότερο από το K_1 στο Λήμμα 4.26) τέτοιο ώστε η (4.171) να δίνει:

$$\|x_k + p_k - x^*\| \leq \left(\frac{\nu_3 \nu_5}{\nu_7} \right)^{1/2} \|x_k - x^*\| \quad \forall k \geq K_2$$

έπεται ότι:

$$\begin{aligned} \varphi_1(x_k + p_k; \mu) &\leq f(x^*) + \nu_3 \nu_5^2 \|x_{k-1} - x^*\|^2 \\ &\stackrel{(4.166)}{\leq} f(x^*) + \nu_5^2 [\varphi_1(x_{k-1}; \mu) - f(x^*)] \\ &\stackrel{(4.171)}{\leq} f(x^*) + \nu_5 \left\{ \varphi_1(x_{k-1}; \mu) - f(x^*) - \eta[\varphi_1(x_{k-1}; \mu) - \hat{\varphi}_1(p_{k-1})] \right\} \\ &\stackrel{(4.177)}{<} f(x^*) + \nu_5 [\varphi_1(x_k; \mu) - f(x^*)] \\ &\stackrel{(4.171)}{\leq} \varphi_1(x_k; \mu) - \eta[\varphi_1(x_k; \mu) - \hat{\varphi}_1(p_k)] \end{aligned}$$

Άρα το καθιερωμένο κριτήριο αναζήτησης γραμμής δίνει στο x_{k+1} τη τιμή $x_k + p_k$ και σε αυτό το στάδιο η τιμή του l είναι είτε k ή $k-1$. Αν $l=k$, τότε χρησιμοποιείται το χαλαρό κριτήριο στην επόμενη επανάληψη.

Έστω, ωστόσο ότι $l=k-1$.

Κάνοντας μια επιπλέον αύξηση στο k_2 αν είναι αναγκαίο έτσι που να ισχύει

$\|x_{k+1} - x^*\| \leq \left(\frac{\nu_3 \nu_5}{\nu_7}\right) \|x_k - x^*\|$ έπεται ότι:

$$\begin{aligned} \varphi(x_{k+1}; \mu) &\leq f(x^*) + \nu_7 \|x_k - x^*\|^2 \\ &\leq f(x^*) + \nu_3 \nu_5 \|x_{k-1} - x^*\|^2 \\ &\stackrel{(4.172)}{\leq} f(x^*) + \nu_5 [\varphi(x_{k-1}; \mu) - f(x^*)] \\ &\stackrel{(4.173)}{\leq} \varphi_1(x_{k-1}; \mu) - \eta [\varphi_1(x_{k-1}; \mu) - \hat{\varphi}_1(p_{k-1})] \\ &= \varphi_1(x_l; \mu) - \eta [\varphi_1(x_l; \mu) - \hat{\varphi}_1(p_l)] \end{aligned}$$

όπου η παραπάνω ανισότητα είναι η ίδια με την (4.169). Συνεπώς όταν $l = k - 1$ επιτυγχάνεται επαρκής μείωση της συνάρτησης αξίας και το επόμενο βήμα είναι ένα χαλαρό βήμα.

□

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ

Θεώρημα Taylor.

Έστω ότι $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ συνεχώς διαφορίσιμη και $p \in \mathbb{R}^n$. Τότε:

$$f(x+p) = f(x) + \nabla f(x+p)^T p \quad (\text{Π.1})$$

για κάποιο $t \in (0, 1)$.

Αν επιπλέον είναι δύο φορές συνεχώς διαφορίσιμη ισχύει ότι:

$$\nabla f(x+p) = \nabla f(x) + \int_0^1 \nabla^2 f(x+tp) p dt \quad (\text{Π.2})$$

και ότι:

$$f(x+p) = f(x) + \nabla f(x)^T p + \frac{1}{2} p^T \nabla^2 f(x+tp) p \quad (\text{Π.3})$$

για κάποιο $t \in (0, 1)$.

Ταχύτητα σύγκλισης.

Έστω $\{x_k\}_{k=0}^\infty$ η ακολουθία που κατασκευάζει κάποιος αλγόριθμος η οποία συγκλίνει σε κάποιο όριο $x^* \in \mathbb{R}^n$ το οποίο ικανοποιεί τις συνθήκες ελαχίστου για το πρόβλημα που επιλύεται. Μέτρα της ταχύτητας με την οποία η $\{x_k\}_{k=0}^\infty$ συγκλίνει στο x^* είναι η τάξη σύγκλισης και ο ρυθμός σύγκλισης.

Τάξη σύγκλισης λέγεται ο μέγιστος μη-αρνητικός αριθμός $a \in \mathbb{R}$ που ικανοποιεί τη σχέση:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|x_{k+1} - x^*\|}{\|x_k - x^*\|^a} < \infty \quad (\text{Π.4})$$

Αν a είναι η τάξη σύγκλισης μιας ακολουθίας τότε η τιμή:

$$\beta = \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|x_{k+1} - x^*\|}{\|x_k - x^*\|^a} \quad (\text{Π.5})$$

λέγεται λόγος σύγκλισης.

Η τάξη σύγκλισης είναι μια τελική ιδιότητα, δεν εξαρτάται από τα αρχικά σημεία της ακολουθίας και μετράει πόσο γρήγορα συγκλίνει η ουρά της ακολουθίας.

Από την (Π.5) είναι: $\|x_{k+1} - x^*\| = \beta \|x_k - x^*\|^a$ ασυμπτωτικά για $k \rightarrow \infty$, επομένως όσο μεγαλύτερη είναι η τάξη σύγκλισης τόσο γρηγορότερα συγκλίνει η ακολουθία στο όριό της.

1. Όταν $a=1$ και $\beta \in (0, 1)$ η ουρά της ακολουθίας συγκλίνει τουλάχιστον τόσο γρήγορα όσο η γεωμετρική ακολουθία β^k και λέμε ότι η σύγκλιση είναι γραμμική.
2. Όταν $a=1$ και $\beta=0$ ή $1 < a < 2$ και $\beta > 0$ λέμε ότι η σύγκλιση της ακολουθίας $\{x_k\}$ είναι υπεργραμμική.
3. Όταν $a=2$ τότε λέμε ότι η σύγκλιση είναι τετραγωνική.

Κατά κατεύθυνση παράγωγος.

Η κατά κατεύθυνση παράγωγος μιας συνάρτησης $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ στη κατεύθυνση p δίνεται από τη σχέση:

$$D(f(x); p) \stackrel{def}{=} \lim_{\varepsilon \rightarrow \infty} \frac{f(x + \varepsilon p) - f(x)}{\varepsilon} \quad (\text{Π.6})$$

Η κατά κατεύθυνση παράγωγος μπορεί να ορίζεται ακόμη και αν η f δεν είναι συνεχώς διαφορίσιμη.

Όταν η f είναι συνεχώς διαφορίσιμη σε μια γειτονιά x του ισχύει ότι:

$$D(f(x); p) \stackrel{def}{=} \nabla f(x)^T p \quad (\text{Π.7})$$

Ο παραπάνω τύπος επαληθεύεται ως εξής:

Ορίζουμε την συνάρτηση: $\varphi(a) = f(x + ap) = f(y(a))$ όπου $y(a) = x + ap$.

Προκύπτει ότι:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow \infty} \frac{f(x + \varepsilon p) - f(x)}{\varepsilon} = \lim_{\varepsilon \rightarrow \infty} \frac{\varphi(\varepsilon) - \varphi(0)}{\varepsilon} = \varphi'(0)$$

Εφαρμόζοντας τον κανόνα της αλυσίδας στη συνάρτηση $f(y(a))$ προκύπτει:

$$\varphi'(a) = \sum_{i=1}^n \frac{\partial f(y(a))}{\partial y_i} \nabla y_i(a) = \sum_{i=1}^n \frac{\partial f(y(a))}{\partial y_i} p_i = \nabla f(y(a))^T p = \nabla f(x + ap)^T p$$

και για $a=0$ προκύπτει η (Π.7).

Ο τύπος των Sherman-Morrison-Woodbury.

Αν ο τετραγωνικός αντιστρέψιμος πίνακας A υφίσταται μια ανανέωση πρώτου βαθμού ώστε να προκύψει:

$$\bar{A} = A + ab^T$$

όπου $a, b \in \mathbb{R}^n$ τότε αν ο πίνακας \bar{A}^{-1} είναι αντιστρέψιμος ισχύει:

$$\bar{A}^{-1} = A^{-1} - \frac{A^{-1}ab^TA^{-1}}{1 + b^TA^{-1}a} \quad (\text{Π.8})$$

Τάξεις μεγέθους και τα σύμβολα και τα σύμβολα $O(\cdot)$ και $o(\cdot)$.

Σε πολλές περιπτώσεις είναι χρήσιμο (ή αναγκαίο) να συγκρίνουμε δύο συναρτήσεις ψ και φ που ορίζονται σε μια γειτονιά V ενός σημείου $x^* \in \mathbb{R}^n$ με τιμές σε έναν νορμικό χώρο, ως προς την «τάξη μεγέθους» των τιμών τους. Δηλαδή μας ενδιαφέρει να γνωρίζουμε αν τα

μεγέθη $\|\psi\|$ και $\|\varphi\|$ παραμένουν της ίδιας τάξης μεγέθους, ή αν οι τιμές της μιας εξ αυτών γίνονται πολύ μικρές (αμελητέες) σε σχέση με τις τιμές της άλλης, καθώς μεταβάλλεται η ανεξάρτητη μεταβλητή x .

Για τη συνοπτική απόδοση των σχέσεων τάξεως μεγέθους χρησιμοποιούμε τα σύμβολα $O(\cdot)$ (ό μικρον μεγάλο) και $o(\cdot)$ (ό μικρον μικρό) τα οποία ορίζονται ως εξής:

Λέμε ότι η συνάρτηση ψ κυριαρχείται από την φ σε μια γειτονιά του x^* και γράφουμε $\psi = O(\varphi)$ αν υπάρχει μια θετική σταθερά C και μια γειτονιά $V_o \subset V$ του x^* τέτοια ώστε:

$$\|\psi(x)\| \leq C \|\varphi(x)\|, \quad \forall x \in V_o \quad (\text{Π.9})$$

Λέμε ότι η συνάρτηση ψ είναι αμελητέα σε σχέση με την φ σε μια γειτονιά του x^* και γράφουμε $\psi = o(\varphi)$ αν για κάθε $\varepsilon > 0$ υπάρχει μια γειτονιά $V_\varepsilon \subset V$ του x^* τέτοια ώστε:

$$\|\psi(x)\| \leq \varepsilon \|\varphi(x)\|, \quad \forall x \in V_\varepsilon \quad (\text{Π.10})$$

Σε πολλά σημεία της ανάλυσης ενδιαφερόμαστε για το πως συμπεριφέρονται τα στοιχεία μιας ακολουθίας, για παράδειγμα αν τα στοιχεία της ακολουθίας είναι φραγμένα, ή αν είναι όμοια σε μέγεθος με τα στοιχεία μιας αντίστοιχης ακολουθίας ή αν μειώνονται και αν ναι, πόσο γρήγορα.

Δεδομένων δύο ακολουθιών $\{\eta_k\}$ και $\{\nu_k\}$, γράφουμε $\eta_k = O(\nu_k)$ αν υπάρχει θετική σταθερά C τέτοια ώστε:

$$|\eta_k| \leq C |\nu_k| \quad (\text{Π.11})$$

για κάθε k αρκετά μεγάλο και γράφουμε $\eta_k = o(\nu_k)$ αν η ακολουθία των λόγων $\{\eta_k/\nu_k\}$ τείνει στο μηδέν καθώς $k \rightarrow \infty$, δηλαδή:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\eta_k}{\nu_k} = 0 \quad (\text{Π.12})$$

BIBΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- [1]. R. Fletcher, *Practical Methods of Optimization* (second edition), (John Wiley and Sons, Chichester, 1987).
- [2]. J. Nocedal and S.J. Wright, *Numerical Optimization*, 2nd Edition, Springer, New York, (1999).
- [3]. Wenyu Sun, Ya-Xiang Yuan, *Optimization Theory and Methods-Nonlinear Programming*, 2006 Springer Science+Business Media, LLC.
- [4]. G.H. Golub and C.F. Van Loan, *Matrix Computations*, The Johns Hopkins University Press, Baltimore, 3rd ed., (1996).
- [5]. J. Nocedal and S.J. Wright, *Numerical Optimization*, 1st Edition, Springer, New York, (1999).
- [6]. J. Frederic Bonnans, J. Charles Gilbert, Claude Lemarechal, Claudia A. Sagastizabal, *Numerical Optimization, Theoretical and Practical Aspects* (2nd Edition), Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2006.
- [7]. P.T. Boggs, J.W. Tolle, and P. Wang, *On the local convergence methods for constrained optimization*, SIAM J. Control and Optimization 20 (1982), 161-171.
- [8]. T.F. Coleman and A.R. Conn, *Nonlinear programming via an exact penalty function: asymptotic analysis*, Mathematical Programming 24 (1982), 123-136.
- [9]. J.E. Dennis Jr., and J.J. More, *A characterization of superlinear convergence and its application to quasi-Newton methods*, Math. Comp. 28 (1974), 549-560.
- [10]. S.P. Han, *A global convergent method for nonlinear programming*, Journal of Optimization Theory and Applications 22 (1977), 297-309.
- [11]. Immanuel M. Bomze, Vladimir F. Demyanov, Roger Fletcher, Tamas Terlaky, *Nonlinear Optimization-Lectures given at the Summer School Italy, 1-7, 2007*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2010.
- [12]. J.E. Dennis and R.B. Schnabel, *Numerical Methods for Unconstrained Optimization and Nonlinear Equations*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, (1983).
- [13]. Eric G. Boman, *Infeasibility and Negative Curvature in Optimization*, Ph. D. thesis, Stanford University, 1999.
- [14]. Kaoru Tone, *Revisions of Constrained Approximations in the Successive QP Method for Nonlinear Programming Problems*, Mathematical Programming 26 (1983), 144-152.
- [15]. R. H. Byrd, H.F. Khalfan, R.B. Schnabel, *Analysis of Symmetric Rank-One Trust Region Method*, SIAM Journal of Optimization, Vol. 26, No. 4 (1996), 1025-1039.
- [16]. J.E. Dennis and H.H.W. Mei, *Two New Unconstrained Optimization Algorithms with Use Function and Gradient Values*, Journal of Optimization Theory and Applications 28(1979), 453-482.
- [17]. M. J. D. Powell, *A Fast Algorithm for Nonlinearly Constrained Optimization Calculations*, Numerical Analysis, Dundee 1977, Lecture Notes in Mathematics 630, ed. G. A. Watson, Berlin: Springer-Verlag, 144-175.
- [18]. T.F. Coleman and A.R. Conn, *On the local convergence of a quasi-Newton method for the nonlinear programming problem*, SIAM J. Numerical Analysis 21 (1984) 755-769.

- [19].S.P.Han, *Superlinearly convergent variable matrix algorithms for general nonlinear programming problem*, *Mathematical Programming*, 11 (1976), 263-282.
- [20].R. Fletcher, *An exact penalty function for nonlinear programming with inequalities*, *Mathematical Programming*, 5 (1973), 129-150.
- [21].Erik G. Boman, *Infeasibility and Negative Curvature in Optimization*, Doctor of Philosophy Dissertation, Stanford University, (1999).
- [22].D. Q. Mayne and E. Polak, *A superlinearly convergent algorithm for constrained optimization problems*, *Mathematical Programming Studies*, 16 (1982), pp. 45–61.
- [23].R. Fletcher, *Second order corrections for non-differentiable optimization*, in *Numerical Analysis*, D. Griffiths, ed., Springer Verlag, 1982, pp. 85–114. Proceedings Dundee 1981.
- [24].R. Chamberlain, C. Lemarechal, H. C. Pedersen, and M. J. D. Powell, *The watchdog technique for forcing convergence in algorithms for constrained optimization*, *Mathematical Programming*, 16 (1982), pp. 1–17.