Σημειώσεις Γραμμικού & μη-Γραμμικού Προγραμματισμού

June 27, 2018

Περιεχόμενα

Μοντέλα Βελτιστοποίησης

Ο όρος *μοντέλο βελτιστοποίησης* αναφέρεται στη μαθηματική διατύπωση ενός προβλήματος το οποίο ενδιαφερόμαστε να λύσουμε με τον ¨καλύτερο τρόπο¨. Ένα μοντέλο βελτιστοποίησης εκφράζεται συνήθως μέσω μίας *αντικειμενικής συνάρτησης (objective function)* f, την οποία προσπαθούμε να βελτιστοποιήσουμε μέσα σε ένα *εφικτό σύνολο (feasible set)* σημείων S.

π.χ.

$$\begin{aligned} \min_x \quad & f(x) \\ \text{subject to} \quad & g(x) \leq c \end{aligned}$$

Το εφικτό σύνολο S μπορεί να ορίζεται είτε μέσω μίας σειράς εξισώσεων, είτε μέσω μίας σειράς ανισώσεων, είτε και τα δύο. Τα αντίστοιχα προβλήματα λέγονται *προβλήματα με εξισωτικούς/ανισωτικούς/μεικτούς περιορισμούς*. Όταν όλες οι συναρτήσεις που ορίζουν το εφικτό σύνολο και η αντικειμενική συνάρτηση είναι γραμμικές το πρόβλημα λέγεται *γραμμικό πρόβλημα βελτιστοποίησης (linear program)*. Έαν το πρόβλημα δεν είναι γραμμικό λέγεται *μη γραμμικό πρόβλημα βελτιστοποίησης (non-linear program)*.

Για ένα σημείο $x \in S$, εάν υπάρχει ανοικτό σύνολο U, έτσι ώστε $x \in U \subseteq S$, στο οποίο το x βελτιστοποιεί την αντικειμενική συνάρτηση, τότε το σημείο x λέγεται *τοπικό βέλτιστο (local optimum)*. Εάν ένα σημείο βελτιστοποιεί την αντικειμενική συνάρτηση σε όλο το S λέγεται *ολικό βέλτιστο (global optimum)*. Γενικά, η εύρεση ολικού βέλτιστου είναι πολύ πιο δύσκολη από την εύρεση τοπικού βέλτιστου.

Chapter 1

Θεμελιώδεις Αρχές Βελτιστοποίησης

1.1 Εφικτότητα και Βελτιστοποίηση

Έστω ένα σύνολο περιορισμών

$$g_i(x) = 0, \quad i \in \mathcal{E}$$
$$g_j(x) \geq 0, \quad j \in \mathcal{I}$$

Τα σημεία που ικανοποιούν αυτούς τους περιορισμούς σχηματίζουν το εφικτό σύνολο S και λέγονται *εφικτά*.

Έστω ένα εφικτό σημείο $x_0 \in S$. Ένας ανισωτικός περιορισμός $g(x) \geq 0$ λέγεται *ενεργός (active* or *binding)* στο x_0, εάν $g(x_0) = 0$. Διαφορετικά, ο περιορισμός λέγεται μη-ενεργός. Αντίστοιχα, για έναν περιορισμό $g(x) \geq 0$, ένα εφικτό σημείο x_0 για το οποίο $g(x_0) = 0$ λέγεται πως είναι στο *σύνορο (boundary)* του περιορισμού. Τα εφικτά σημεία που δεν είναι στο σύνορο του περιορισμού λέγεται πως είναι στο *εσωτερικό (interior)* του. Οι εξισωτικοί περιορισμοί θεωρούνται ενεργοί σε κάθε εφικτό σημείο.

Το σύνολο $\partial S \subseteq S$ στο οποίο τουλάχιστον ένας περιορισμός είναι ενεργός λέγεται το *σύνορο* του εφικτού συνόλου, ενώ τα σημεία του συνόλου $S \backslash \partial S$ λέγονται *εσωτερικά σημεία*.

Τα μοντέλα μεγιστοποίησης και ελαχιστοποίησης είναι ισοδύναμα καθώς

$$\max_x f(x) = \min_x \, (-f(x))$$

επομένως μπορούμε να μιλάμε για ελαχιστοποίηση αντί για βελτιστοποίση χωρίς απώλεια γενίκευσης.

Λέμε πως ένα εφικτό σημείο είναι *ολικό ελάχιστο* εάν $f(x_*) \leq f(x), \ \forall \ x \in S$ και *αυστηρά ολικό ελάχιστο* εάν $f(x_*) < f(x), \ \forall \ x \in S \backslash \{x_0\}$. Ο απλούστερος ορισμός για τη λύση x_* ενός προβλήματος βελτιστοποίησης, είναι να είναι ολικό ελάχιστο της αντικειμενικής συνάρτησης στο εφικτό σύνολο. Επειδή συχνά είναι πολύ δύσκολο να βρεθεί μία τέτοια λύση, μπορούμε να προσπαθήσουμε να βρούμε ένα *τοπικό ελάχιστο*, δηλαδή ένα σημείο x_* για το οποίο $f(x_*) \leq f(x), \ \forall \, x \in \mathcal{B}_\epsilon(x_*) \subset S$. Για ένα *αυστηρά τοπικό ελάχιστο* η παραπάνω ανισώτητα είναι αυστηρή για κάθε $x \in \mathcal{B}_\epsilon(x_*) \backslash \{x_*\} \subset S$.

1.2 Κυρτά Σύνολα και Κυρτές Συναρτήσεις

Για μία ειδική περίπτωση προβλημάτων η εύρεση ολικού ελάχιστου είναι πάντα εφικτή. Αυτό αφορά τα προβλήματα των οποίων η αντικειμενική συνάρτηση είναι *κυρτή (convex)* και το εφικτό σύνολο είναι *κυρτό*. Ένα πρόβλημα βελτιστοποίησης για το οποίο ισχύουν τα παραπάνω λέγεται *κυρτό πρόβλημα βελτιστοποίησης (convex optimization problem).*

Λέμε πως ένα σύνολο $S \subseteq \mathbb{R}^n$ είναι κυρτό εάν για οποιαδήποτε σημεία $x, y \in S$ το σημείο $\alpha x + (1-\alpha)y \in S$ για κάθε $\alpha \in [0,1]$. Με άλλα λόγια, για οποιαδήποτε δύο σημεία στο S το ευθύγραμμο τμήμα που τα ενώνει περιέχεται στο S.

Λέμε πως μία συνάρτηση $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ είναι κυρτή σε ένα σύνολο S, εάν $\forall x, y \in S$ και $\alpha \in [0,1]$, ισχύει πως $f(\alpha x + (1-\alpha)y) \leq \alpha f(x) + (1-\alpha)f(y)$. Εάν ισχύει η αντίστροφη ανισότητα η συνάρτηση λέγετε *κοίλη (concave).* Από τον ορισμό βλέπουμε πως μία γραμμική συνάρτηση είναι και κυρτή και κοίλη. Εάν η ανισότητα είναι αυστηρή για κάθε $x \neq y$ και $\alpha \in (0,1)$, τότε η συνάρτηση λέγεται αντίστοιχα *αυστηρά κυρτή* ή *αυστηρά κοίλη (strictly convex/concave).*

Ένα βοηθητικό αποτέλεσμα το οποίο είναι προφανές είναι πως μία συνάρτηση $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ είναι κυρτή στο S εάν και μόνο εάν είναι κυρτή και σαν συναρτηση μίας μεταβλητής όταν την περιορίζουμε σε ένα οποιοδήποτε ευθύγραμμο τμήμα που ανήκει στο S. Δηλαδή, η f είναι κυρτή εάν και μόνο εάν για κάθε $x, y \in S$ η συνάρτηση $g : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ που δίνεται από $g(\alpha) = f(x + \alpha(y-x))$ έιναι κυρτή.

Θεώρημα (Ολική Λύση Κυρτών Προβλημάτων Βελτιστοποίησης)

Έστω x_* τοπικό ελάχιστο ενός κυρτού προβλημάτος βελτιστοποίησης. Τότε το x_* είναι και ολικό ελάχιστο. Εάν η αντικειμενική συνάρτηση είναι αυστηρά κυρτή τότε το x_* είναι μοναδικό ολικό ελάχιστο.

Απόδειξη

Έστω πως το $x_* \in S$ είναι τοπικό ελάχιστο αλλά όχι ολικό. Τότε, $\exists y \in S$ έτσι ώστε $f(y) < f(x_*)$. Επειδη το S είναι κυρτό σύνολο το σημείο $\alpha x_* + (1-\alpha)y$ ανήκει στο S για κάθε $\alpha \in [0,1]$. Επιπλέον, εφόσον η f είναι κυρτή στο S ισχύει πως

$$f(\alpha x_* + (1-\alpha)y) \leq \alpha f(x_*) + (1-\alpha)f(y) < \alpha f(x_*) + (1-\alpha)f(x_*) = f(x_*)$$

Για $\alpha \to 1$ το σημείο $\alpha x_* + (1-\alpha)y \to x_*$ και άρα δεν υπάρχει ανοικτό σύνολο που περιέχει το x_* στο οποίο το x_* να είναι ελάχιστο καθώς για οποιοδήποτε τέτοιο σύνολο υπάρχει α_0 έτσι ώστε $\forall \alpha_0 \leq \alpha < 1$ το $\alpha x_* + (1-\alpha)y$ ανήκει σε αυτό. Άρα το x_* δεν είναι τοπικό ελάχιστο. Άτοπο. $\square$

Για το δεύτερο μέρος του θεωρήματος παρατηρουμέ ότι αν $y \neq x$ είναι δύο ολικά ελάχιστα και η συνάρτηση f είναι αυστηρά κυρτή και το S είναι κυρτό, τότε

$$f(\alpha x + (1-\alpha)y) < \alpha f(x) + (1-\alpha)f(y) = f(x)$$

και άρα τα σημεία x, y δεν είναι ολικά ελάχιστα. $\square$

Ακολουθεί ένα χρήσιμο αποτέλεσμα για επαρκώς λείες κυρτές συναρτήσεις.

Λήμα: Για επαρκώς λεία συνάρτηση f η κυρτότητα της f στο S ισοδυναμεί με τη συνθήκη πως η εσσιανή της συνάρτησης είναι γνήσια θετική *(positive definite)* στο S, δηλαδή

$$y^T \nabla^2 f(x) y \geq 0, \ \forall x \in S, \ \forall y$$

Σημειώνουμε πως το διάνυσμα y δεν είναι απαραίτητα στο S στην παραπάνω ανισότητα. Για συναρτήσεις μίας μεταβλητής η παραπάνω συνθήκη απλοποιείται σε

$$f'' \geq 0$$

<u>Απόδειξη</u>: Έστω f επαρκώς λεία συνάρτηση και κυρτό σύνολο $S \subseteq \mathcal{X}_f$ ($\mathcal{X}_f$ συμβολίζει το πεδίο ορισμού της f).

($\Rightarrow$)

Έστω πως η f είναι κυρτή στο S. Τότε για κάθε $x, y \in S$ ισχύει πως

$$f(\alpha x + (1-\alpha)y) \leq \alpha f(x) + (1-\alpha)f(y)$$

το οποίο γρλαφεται ισοδύναμα ως

$$f(y + \alpha(x-y)) \leq f(y) + \alpha(f(x) - f(y)) \Rightarrow \frac{f(y+\alpha(x-y)) - f(y)}{\alpha} \leq f(x) - f(y)$$

Παίρνοντας το όριο καθώς το $\alpha \to 0$ αυτής της ανισότητας και χρησιμοποιώντας τον ορίσμο της κατα διεύθυνση παραγώγου, έχουμε πως

$$D_{(x-y)}f(y) \leq f(x) - f(y)$$

όπου $D_{(x-y)}f(y)$ συμβολίζει την κατά διεύθηνση παράγωγο της f στο σημείο y και στην κατεύθηνση $x-y$. Αυτή όμως η ανισότητα είναι ισοδύναμη με

$$f(y) + \nabla f(y)^T (x-y) \leq f(x)$$

Η συνάρτηση f όμως, είναι κυρτή στο S εάν και μόνο εάν για κάθε $x, y \in S$ η συνάρτηση $g(\alpha) = f(\alpha(y-x)+x)$ είναι κυρτή. Επίσης, για μονοδιάστατη κυρτή συνάρτηση στο S' ισχύει από τα παραπάνω πως για κάθε $y, x \in S'$ (χώρις απώλεια γενίκευσης $y > x$),

$$g(y) + g'(y)(x-y) \leq g(x) \;\&\; g(x) + g'(x)(y-x) \leq g(y)$$

το οποίο δίνει

$$g(y) + g(x) + g'(x)(y-x) + g'(y)(x-y) \leq g(x) + g(y) \Rightarrow$$

$$(g'(y) - g'(x))(x - y) \leq 0 \Rightarrow \frac{g'(y) - g'(x)}{y - x} \geq 0$$

και άρα για $y \to x$

$$g''(x) \geq 0$$

για κάθε x στο S'. Άρα εφόσον για κάθε x, y η συνάρτηση $g(\alpha) = f(\alpha(y-x)+x)$ είναι μονοδιάστατη κυρτή συνάρτηση ισχύει πως

$$g''(\alpha) = (x-y)^T \nabla^2 f(\alpha(y-x)+x)(x-y) \geq 0$$

και επειδή τα σημεία x, y ήταν αυθαίρετα επιλεγμένα συμπεραίνουμε πως η εσσιανή της f είναι γνήσια θετική. $\Box$

$(\Leftarrow)$

Έστω μονοδιάστατη συνάρτηση $g(x)$ με $g''(x) \geq 0$ $\forall x \in S'$. Έστω επίσης σημεία $x_1, x_2 \in S'$ και $x_0 = \alpha x_1 + (1-\alpha)x_2 \in S'$. Το θεώρημα Taylor μας δίνει πως γύρω από το σημείο $x_0 \in S'$,

$$g(x) = g(x_0) + g'(x_0)(x - x0) + \frac{1}{2}g''(z)(x - x_0)^2$$

οπού $z \in [x_0, x] \subseteq S'$ και άρα από την υπόθεση

$$g(x) \geq f(x_0) + f'(x_0)(x - x0)$$

θέτοντας $x = x_1, x_2$ έχουμε

$$g(x_1) \geq g(x_0) + g'(x_0)(x_1 - x0) \ \& \ g(x_2) \geq g(x_0) + g'(x_0)(x_2 - x0) \Rightarrow$$

$$\alpha g(x_1) + (1-\alpha)g(x_2) \geq g(x_0) + g'(x_0)(\alpha(x_1 - x0) + (1-\alpha)(x_2 - x0)) \Rightarrow$$

$$\alpha g(x_1) + (1-\alpha)g(x_2) \geq g(x_0)$$

και άρα εφόσον x_1, x_2 ήταν αυθαίρετα επιλεγμένα στο S' η συνάρτηση g' είναι κυρτή. Για οποιαδήποτε συνάρτηση $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ με εσσιανή γνησία θετική σε κυρτο σύνολο S θα ισχύει πως

$$g''(\alpha) = (x_1 - x_2)^T \nabla^2 f(\alpha(x_1 - x_2) + x_1)(x_1 - x_2) \geq 0$$

για οποιαδήποτε $x_1, x_2 \in S$. Αλλά τότε κάθε τέτοια g είναι κυρτή και άρα η f είναι κυρτη στο S. $\square$

1.3 Ταχύτητα Σύγκλισης

Πολλές φορές ενδιαφερόμαστε για επαναλληπτικούς αλγόριθμους οι οποίοι υπολογίζουν μία σειρά από όλο και καλύτερες προσεγγίσεις της πραγματικής λύσης. Για τη συζήτηση τέτοιων αλγορίθμων τα ακόλουθα ερωτήματα είναι σημαντικά:

1. Συγκλίνει ο αλγόριθμος;
2. Πόσο γρήγορα συγκλίνει ο αλγόριθμος;

Εάν η σύγκλιση ενός αλγορίθμου γίνεται σε πεπερασμένο αριθμό επαναλήψεων, μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε τον αριθμό επαναλήψεων ή τον αριθμό από αριθμητικές πράξεις για να μετρήσουμε την ταχύτητα σύγκλισης.

Πολλοί αλγόριθμοι δεν συγκλίνουν σε πεπερασμένο αριθμό βημάτων και σε αυτές τις περιπτώσεις χρησιμοποιούμε ένα διαφορετικό μέτρο για την ταχύτητα σύγκλισης το οποίο λέμε *ρυθμό σύγκλισης (rate of conergence)*. Έστω πως η έξοδος του αλγορίθμου στην επανάληψη k είναι x_k και η λύση του προβλήματος είναι x_*. Ορίζουμε το σφάλμα στην επανάληψη k ως $e_k = x_k - x_*$. Από την υπόθεση πως ο αλγόριθμός πλησιάζει στη λύση έχουμε πως

$$\lim_{k \to \infty} e_k = 0$$

Λέμε πως ο αλγόριθμος συγκλίνει με ρυθμό r και σταθερά ρυθμού C στη λύση, εάν

$$\lim_{k\to\infty} \frac{||e_{k+1}||}{||e_k||^r} = C$$

Στην πράξη δεν παρατηρείται ο ρυθμός σύγκλισης παρά μόνο στο όριο μετά από πολλές επαναλήψεις και δεν υπάρχει κάποια εγγύηση για το ρυθμό μείωσης του σφάλματος στις αρχικές επαναλήψεις. Επιπλέον, στην πράξη ο αλγόριθμος τερματίζεται μετά από πεπερασμένο αριθμό επαναλήψεων, αφού το σφάλμα φτάσει κάτω από κάποιο προκαθορισμένο κατώφλι, με αποτέλεσμα να μην μπορεί να παρατηρηθεί ο θεωρητικός ρυθμός που επιτυγχάνεται στο όριο.

Στην ιδανική περίπτωση όπου $r = 1$ και $0 < C < 1$ λέμε πως ο αλγόριθμος έχει *γραμμική σύγκλιση*. Εάν $r = 1$ και $C = 0$ λέμε πως ο αλγόριθμός έχει *υπέρ-γραμμική σύγκλιση*. Σημειώνουμε πως όλοι οι αλγόριθμοι με ρυθμό $r > 1$ έχουν υπέργραμμική σύγκλιση καθώς

$$\lim_{k\to\infty} \frac{||e_{k+1}||}{||e_k||^r} = C \;\Rightarrow\; \lim_{k\to\infty} \frac{||e_{k+1}||}{||e_k||} = C \lim_{k\to\infty} ||e_k||^{r-1} = 0$$

Από αυτό το αποτέλεσμα βλέπουμε πως για μικρές τιμές της σταθεράς ρυθμού η γραμμική σύγκλιση είναι παρόμοια με συγκλίσεις υψηλότερου βαθμού. Στη γενική περίπτωση όμως ένας υψηλότερος βαθμός σύγκλισης σημαίνει και καλύτερη επίδοση του αλγορίθμου.

1.4 Η Μέθοδος Newton για μη-γραμμικές εξισώσεις

Πολλές φορές θα είναι χρήσιμο για την επίλυση προβλημάτων βελτιστοποίησης να μπορούμε να βρούμε τη λύση σε προβλήματα της μορφής

$$f(x) = 0$$

όπου η f είναι τουλάχιστον δύο φορές παραγωγίσιμη. Όταν τα $x, f(x)$ έχουν ίδια διάσταση και η f είναι γραμμική αν υπάρχει μοναδική λύση μπορεί να βρεθεί αποτελεσματικά. Για γενικές μη-γραμμικές συναρτήσεις f η εύρεση λύσης δεν είναι τόσο απλή και μπορεί να μην υπάρχει εγγύηση για το ότι η λύση μπορεί να βρεθεί. Υπάρχουν όμως αλγόριθμοι όπως η μέθοδος Newton που είναι συχνά αποτελεσματικοί.

Η βασική ιδέα πίσω από τη μέθοδο Newton συνοψίζεται ως εξής: ξεκινώντας από μία προσέγγιση x_k της λύσης, θέλουμε να προσεγγίσουμε γραμμικά την f κοντά στο x_k μέσω του θεωρήματος Taylor και να λύσουμε αποδοτικά για ρίζα της γραμμικής εξίσωσης που προκύπτει. Συγκεκριμένα, αν ξεκινάμε από μία προσέγγιση της λύσης x_k, έχουμε

$$f(x_k + p) \approx f(x_k) + \nabla f(x_k)^T p$$

και αν το σύστημα έχει λύση μπορούμε να την υπολογίσουμε αποδοτικά και να θέσουμε τη λύση σαν την αρχική προσέγγιση της επόμενης επανάληψης.

$$x_{k+1} = x_k - \nabla f(x_k)^{-T} f(x_k)$$

Θεώρημα (Σύγκλιση μεθόδου Newton σε μία διάσταση)

Έστω επαρκώς λεία συνάρτηση f με ρίζα x_* έτσι ώστε ο $f(x_k)f'(x_*) \neq 0, \forall k$. Τότε $\exists \delta > 0$ έτσι ώστε εάν $|x_* - x_0| < \delta$ η σειρά x_k που δίνεται από τη μέθοδο Newton με αρχικό σημείο το x_0 συγκλίνει με ρυθμό σύγκλισης $r = 2$ και σταθερά ρυθμού $C = |\frac{f''(x_*)}{2f'(x_*)}|$.

Απόδειξη

Έστω πως ισχύουν η προυποθέσεις του θεωρήματος. Χρησιμοποιώντας το θεώρημα

Taylor έχουμε πως

$$0 = f(x_*) = f(x_k - e_k) = f(x_k) + f'(x_k)^T e_k + \frac{1}{2} f''(z_k) e_k^2$$

για κάποιο $z_k \in [x_*, x_k]$. Εφόσον $f'(x_*) \neq 0$ αυτή η εξίσωση ξαναγράφεται ως

$$e_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} = \frac{f''(z_k)}{2f'(x_k)} e_k^2 \Rightarrow e_{k+1} = \frac{f''(z_k)}{2f'(x_k)} e_k^2$$

καθώς $\lim\limits_{k\to\infty} e_k = 0$ συμπεραίνουμε πως $\lim\limits_{k\to\infty} z_k = x_*$ και άρα

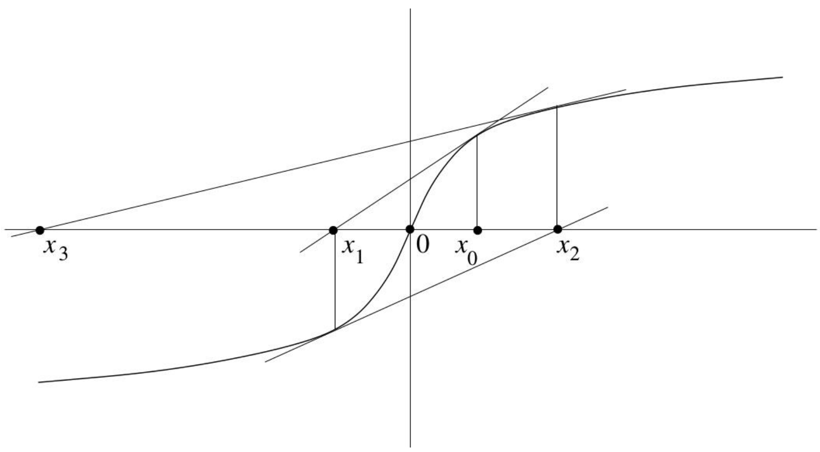
$$\lim_{k\to\infty} \frac{|e_{k+1}|}{|e_k|^2} = |\frac{f''(x_*)}{2f'(x_*)}|$$

□

Στην περίπτωση που $f'(x_*) = 0$ και $f'(x_k) f''(x_*) \neq 0, \forall k$ ο αλγόριθμος δεν έχει τετραγωνικό ρυθμό σύγκλισης (καθώς η σταθερά ρυθμού τείνει στο άπειρο). Επίσης για να έχει η μέθοδος τετραγωνικό ρυθμό σύγκλισης προαπαιτείται να είναι το αρχικό σημείο κοντά σε κάποια ρίζα. Ένα παράδειγμα που υπογραμμίζει την σημασία αυτής της συνθήκης είναι η συνάρτηση

$$f(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}}$$

όπως φαίνεται και στο παρακάτω σχήμα (παρμένο από το βιβλίο του μαθήματος).



__**Θεώρημα**__ (Σύγκλιση μεθόδου Newton σε n διαστάσεις)

Έστω επαρκώς λεία συνάρτηση f με ρίζα $x_* \in \mathbb{R}^n$ έτσι ώστε οι πίνακες $\nabla f(x_*)^T$ και $\nabla f(x_k)^T, \forall k$ να είναι αντιστρέψιμοι. Τότε $\exists \delta > 0$ έτσι ώστε εάν $||x_* - x_0|| < \delta$ η σειρά x_k που δίνεται από τη μέθοδο Newton με αρχικό σημείο το x_0 συγκλίνει με τετραγωνικό ρυθμό σύγκλισης.

Chapter 2

Αναπαράσταση Γραμμικών Περιορισμών

Πολλές φορές σε προβλήματα με περιορισμούς μας ενδιαφέρει να μπορούμε να βρούμε για ένα εφικτό σημείο άλλα γειτονικά εφικτά σημεία. Είναι δυνατόν, εκφράζοντας τις μεταβλήτες με διαφορετικές συντεταγμένες η περιγραφή γειτονικών σημείων να γίνει πολύ ευκολότερη. Για προβλήματα με γραμμικούς περιορισμους τα εκάστοτε εφικτά σύνολα είναι κυρτά σύνολα που γεωμετρικά αναπαριστούνται από πολύεδρα. Στο υπόλοιπο κεφάλαιο θεωρούμε πως οι περιορισμοί είναι γραμμικοί.

Έστω ότι $\exists \epsilon > 0$ έτσι ώστε για ένα σημείο $\bar{x} \in S$ και μία κατεύθυνση v ισχύει $\bar{x} + \alpha v \in S, \forall \alpha \in [0, \epsilon]$. Τότε η κατεύθυνση v λέγεται *εφικτή κατεύθυνση στο* $\bar{x}$ *(feasible direction at* $\bar{x}$*)*. Διαισθητικά μία κατεύθυνση είναι εφικτή στο $\bar{x}$ όταν μπορείς να κινηθείς σε αυτήν από το $\bar{x}$ χωρίς να φύγεις από το εφικτό σύνολο. Προφανής συνέπεια της κυρτότητας του εφικτού συνόλου είναι πως για οποιαδήποτε σημεία $x, y \in S$ υπάρχει εφικτή κατεύθυνση στο x που οδηγεί στο y.

Οι επαναλληπτικοί αλγόριθμοι που σε κάθε επανάληψη δίνουν σαν έξοδο ένα εφικτό σημείο λέγονται *μέθοδοι εφικτού σημείου.* Ακόμα και αν ένας αλγόριθμος φτάνει θεωρητικά σε λύση του προβλήματος, συχνά αυτό δεν επιτυγχάνεται σε πεπερασμένο αριθμό βημάτων. Σε αυτή την περίπτωση είναι σημαντικό η έξοδος του αλγορίθμου κατά τη διακοπή του να είναι εφικτό σημείο, καθώς διαφορετικά δεν μπορεί να χρησιμοποιηθεί το αποτέλεσμα. Προφανώς, η χρήση μεθόδων εφικτού σημείου μας απαλάσουν από αυτή την επιπλοκή.

Ο αλγόριθμος που ακολουθεί μία μέθοδος εφικτού σημείου δίνεται στη γενική του μορφή από τα παρακάτω βήματα:

Αλγόριθμος

1. Επιλογή (τυχαίου) αρχικού εφικτού σημείου x_0

2. Για $k = 0, 1, ...$:

   $i)$ Επιλογή εφ. κατ. v_k στο x_k έτσι ώστε $f(x_k + \alpha_k v_k) < f(x_k)$

   $ii)$ Εάν δεν υπάρχει τέτοια v_k τερματισμός

   $iii)$ Ενημέρωση $x_{k+1} = x_k + \alpha_k v_k$

Η γενική μορφή των περιορισμών ενός προβλήματος με γραμμικούς εξισωτικούς περιορισμούς δίνεται από

$$a_i^T x = b_i, \quad i \in \mathcal{E}$$

Ορίζοντας τα

$$A = \begin{pmatrix} -a_1- \\ \vdots \\ -a_{|\mathcal{E}|}- \end{pmatrix} \ \& \ b = \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_{|\mathcal{E}|} \end{pmatrix}$$

Οι περιορισμοί του προβλήματος ξαναγράφονται ως

$$Ax = b$$

Για να είναι μία κατεύθυνση v εφικτή σε ένα σημείο x_0 σε αυτό το πρόβλημα θα πρέπει να ισχύει ότι

$$A(x_0 + \alpha v) = b \Rightarrow Av = 0$$

Άρα σε προβλήματα με εξισωτικούς γραμμικούς περιορισμούς μία κατεύθυνση είναι εφικτή εάν και μόνο εάν αντιστοιχεί σε κάποιο διανύσμα του μηδενικού χώρου του αντίστοιχου πίνακα A.

Στην περίπτωση που υπάρχουν και ανισωτικοί περιορισμοί το πρόβλημα γράφεται $Ax \geq b$ και εξετάζουμε ξεχωριστά τους ενεργούς και τους ανενεργούς. Εάν σε κάποιο σημείο x_0 ισχύει $\alpha_i^T x_0 > b_i$, τότε για αρκετά μικρό α για οποιαδήποτε κατεύθυνση v θα ισχύει και πως $\alpha_i^T x_0 + \alpha v > b_i$. Έτσι λοιπόν βλέπουμε πως οι ανενεργοί περιορισμοί σε ένα σημείο δεν επηρεάζουν τις εφικτές κατευθύνσεις σε αυτό. Εάν σε κάποιο σημείο x_0 ισχύει $\alpha_i^T x_0 = b_i$ και ο περιορισμός είναι $\alpha_i^T x_0 \geq b_i$, τότε για να είναι μία κατεύθυνση v εφικτή θα πρέπει να ισχύει πως $\alpha_i^T v \geq 0$.

Άρα λοιπόν, έχουμε πως για ένα πρόβλημα με γραμμικούς περιορισμούς της μορφής

$$g_i(x) = 0, \quad i \in \mathcal{E}$$
$$g_j(x) \geq 0, \quad j \in \mathcal{I}$$

Εάν για ένα σημείο x_0 οι ενεργοί ανισωτικοί περιορισμοί είναι οι $g_j(x) \geq 0,\ j \in \hat{\mathcal{I}}$, τότε οι εφικτές κατευθύνσεις v στο x_0 είναι αυτές που ικανοποιούν

$$\alpha_i^T v = 0,\ i \in \mathcal{E}\ \&\ \alpha_i^T v \geq 0,\ i \in \hat{\mathcal{I}}$$

Chapter 3

Η γεωμετρία του Γραμμικού Προγραμματισμού και Γραμμικός Προγραμματισμός

3.1 Εισαγωγή

Μπορεί εύκολα να διαπιστώθει γραφικά πως η λύση σε ένα γραμμικό πρόγραμμα θα βρίσκεται πάντα σε μία κορυφή του εφικτού συνόλου. Αυτή η γεωμετρική παρατήρηση μας επιτρέπει να λύσουμε το πρόβλημα βελτστοποίησης ψάχνοντας τις κορυφές του εφικτού συνόλου. Σε υψιλότερες διαστάσεις αυτό μπορεί να μην είναι τόσο απλό και για αυτό το λόγο βοηθάει να προσπαθήσουμε να εκφράσουμε αυτή την ιδέα αλγεβρικά.

3.1.1 Βασικές Εφικτές Λύσεις

Ένα γραμμικό πρόγραμμα μπορεί να εκφράστει με πολλούς τρόπους και κάποιες φορές ένας τρόπος μπορεί να είναι πιο πρακτικός από έναν άλλο. Για την επίλυση γραμμικών προγραμμάτων μέσω της μεθόδου *simplex*, την οποία θα συζητήσουμε στη συνέχεια, είναι πρακτικό να εκφράσουμε το γραμμικό πρόγραμμα στην *τυπική μορφή (standard form)* του. Λέμε πως το πρόβλημα είναι σε τυπική μορφή όταν διατυπώνεται ως

$$\begin{aligned} \underset{x}{\text{minimize}} \quad & z = c^T x \\ \text{subject to} \quad & Ax = b \\ & x \geq 0 \end{aligned}$$

όπου $b \geq 0$.

Τα διανύσματα x, c είναι n-διάστατα, ενώ ο πίνακας A έχει διαστάσεις $m \times n$ και λέγεται *πίνακας περιορισμών (constraint matrix)*.

Οποιοδήποτε γραμμικό πρόγραμμα μπορεί να γραφτεί σε τυπική μορφή. Εάν αρχικά είναι πρόβλημα μεγιστοποίησης μπορούμε να αλλάξουμε την αντικειμενική συνάρτηση z με την $z' = -z$. Εάν κάποια συνιστώσα του b είναι αρνητική μπορούμε να πολλαπλασιάσουμε τον σχετικό περιορισμό με -1. Τις μεταβλητές που έχουν κάποιο μη μηδενικό κάτω όριο π.χ. $x \geq t,\ t \neq 0$ μπορούμε να τις αντικαταστήσουμε με $x' = x - t$, ενώ μπορούμε να εντάξουμε πάνω φράγματα σε μεταβλητές στον πίνακα περιορισμών. Αυτός δεν είναι ο μόνος τρόπος να χειριστούμε πάνω φράγματα, ούτε είναι ο πιο αποδοτικός. Ένας ανισωτικός περιορισμός μπορεί να μετατραπεί σε εξισωτικό με την εισαγωγή *μεταβλητών χαλάρωσης (slack variables)*. Για παράδειγμα ο περιορισμός $x_1 + 2x_2 \leq 10$ μπορεί να γραφτεί ως $x_1 + 2x_2 + s_1 = 10$ με $s_1 \geq 0$, όπου η s_1 είναι μεταβλητή χαλάρωσης. Τέλος, μεταβλητές x που δεν επηρεάζονται από κάποιον περιορισμό μπορούν να αντικατασταθούν χρησιμοποιώντας δύο νέες μη αρνητικές μετάβλητες, γράφοντας $x = x_1 - x_2$ όπου $x_1, x_2 \geq 0$.

Για γραμμικά προγράμματα σε τυπική μορφή θεωρούμε πως ο πίνακας περιορισμών A είναι πλήρους βαθμού σειρών, καθώς η ύπαρξη γραμμικά εξαρτώμενων σειρών θα σήμαιναι είτε ότι οι περιορισμοί είναι ασύμβατοι, είτε ότι κάποιοι περιορισμοί επαναλαμβάνονται. Επιπλέον προκειμένου να μην είναι κενό το εφικτό σύνολο θεωρούμε πως ο αριθμός των περιορισμών είναι το πολύ όσες και οι μεταβλητές του προβλήματος. Δηλαδή, αν ο πίνακας περιορισμών A έχει διαστάσεις $m \times n$, τότε $m \leq n$.

Η έννοια της κορυφής του εφικτού συνόλου όριζεται γεωμετρικά μέσω της κυρτότητας. Συγκεκριμένα, ένα σημείο $x \in S$ λέγεται κορυφή εάν και μόνο εάν δεν είναι εφικτό να γραφτεί ως

$$x = \alpha y + (1 - \alpha) z$$

για $y, z \in S$ με $y, z \neq x$ και $\alpha \in (0, 1)$. Με άλλα λόγια εάν ένα σημείο $x \in S$ είναι κορυφή και ισχύει πως $x = \alpha y + (1 - \alpha) z$ με $y, z \in S$ και $\alpha \in (0, 1)$, τότε $y = z = x$. Ισοδύναμα, μπορούμε να περιγράψουμε τις κορυφές αλγεβρικά ως εξής:

Θεωρώντας πως το γραμμικό πρόγραμμα είναι γραμμένο σε τυπική μορφή, ένα σημείο x λέγεται *βασική λύση (basic solution)*, εάν ικανοποιεί τους εξισωτικούς περιορισμούς του προγράμματος και οι στήλες του πίνακα περιορισμών A που αντιστοιχούν σε μη μηδενικές συνιστώσες του x είναι γραμμικά ανεξάρτητες.

Επειδή ο βαθμός του A είναι m, είναι δυνατό να χωρίσουμε το διάνυσμα x που αντιστοιχεί σε μία βασική λύση σε δύο υποδιανύσματα x_N και x_B μήκους $n - m$ και m αντίστοιχα, έτσι ώστε οι συντελεστές των περιορισμών του x_B να είναι ένας πίνακας B πλήρους βαθμού με διαστάσεις $m \times m$. Οι μεταβλητές που αντιστοιχούν σε συνιστώσες του x_B λέγονται *βασικές μεταβλητές*, ενώ αυτές που αντιστοιχούν σε συνιστώσες του x_N λέγονται *μη βασικές μεταβλητές*. Οι βασικές μεταβλητές λέγονται συλλογικά *βάση*. Μέσω κατάλληλης αναδιάταξης των στήλων του πίνακα A (και των συνιστώσεων της βασικής λύσης), έχουμε

$$Ax = \left(\begin{array}{c:c} B & N \end{array} \right) \left(\begin{array}{c:c} x_B & x_N \end{array} \right)^T = Bx_B + Nx_N = Bx_B = b$$

Εφόσον οι μη βασικές μεταβλητές της βασικής λύσης έχουν εξ ορισμού τιμή 0. Μία βασική λύση είναι *βασική εφικτή λύση (basic feasible solution)* όταν ικανοποιεί και τον περιορισμό $x \geq 0$. Εάν μία βασική εφικτή λύση είναι και λύση του γραμμικού προγράμματος (δίνει βέλτιστη τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης) τότε λέγεται *βέλτιστη βασική εφικτή λύση (optimal basic feasible solution).*

Αφού γίνει η επιλογή των μεταβλητών της βασικής λύσης x που θα αποτελέσουν το διάνυσμα x_B, η βασική λύση καθορίζεται μοναδικά, καθώς $x_N = 0$ και η εξίσωση $Bx_B = b$ έχει μοναδική λύση (επειδή ο πίνακας B είναι πλήρους βαθμού). Ακολουθεί πως ο αριθμός των βασικών λύσεων είναι ίσος με τον αριθμό των πιθανών επιλογών για το x_B που ισούται με

$$\binom{n}{m} = \frac{n!}{(n-m)!m!}$$

Εφόσον οποιαδήποτε βασική εφικτή λύση είναι και βασική λύση, αυτός ο αριθμός φράσει από πάνω τον αριθμό τον βασικών εφικτών λύσεων.

Θεώρημα (Βασικές Εφικτές Λύσεις & Κορυφές Εφικτού Συνόλου)

Ένα σημείο x είναι κορυφή του συνόλου $\{x : Ax = b, x \geq 0\}$ εάν και μόνο εάν είναι βασική εφικτή λύση.

Απόδειξη

($\Leftarrow$)

Έστω πως ένα σημείο x είναι βασική εφικτή λύση. Επειδή το x ικανοποιεί όλους τους περιορισμούς του προβλήματος εξ ορισμού είναι και εφικτό σημείο. Μπορούμε επίσης να θεωρήσουμε πως οι συνιστώσες του είναι διατεταγμένες ως

$$x = \begin{pmatrix} x_B \\ x_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_B \\ 0 \end{pmatrix}$$

όπου η δεύτερη ισότητα ισχύει από τον ορισμό του x_N. Έστω πως το x δεν είναι κορυφή του εφικτού συνόλου. Τότε υπάρχουν δύο ξεχωριστά σημεία $S \ni z, y \neq x$ έτσι ώστε $x = \alpha y + (1-\alpha)z$ και $0 < \alpha < 1$. Μπορούμε να γράψουμε τα y, z με τον εξής τρόπο,

$$y = \begin{pmatrix} y_B \\ y_N \end{pmatrix} \;\; \& \;\; z = \begin{pmatrix} z_B \\ z_N \end{pmatrix}$$

όπου οι διάταξη των συνιστώσεων είναι ίδια με αύτη των συνιστώσεων του x. Επειδή τα y, z είναι εφίκτα σημεία πρέπει να ισχύει πως $y_N, z_N \geq 0$. Αλλά, $x = \alpha y + (1-\alpha)z \Rightarrow 0 = x_N = \alpha y_N + (1-\alpha)z_N$ και αφού όλοι οι όροι στο δεξί μέρος της εξίσωσης είναι μη αρνητικοί οδηγούμαστε στο συμπέρασμα πως $y_N, z_N = 0$. Επίσης, $x, y, z \in S \Rightarrow Ax = Ay = Az = b$ και λόγο του ότι $x_N = y_N = z_N = 0$, έχουμε πως $Bx_B = By_B = Bz_B = b$, όπου B ο πίνακας συντελεστών των μη μηδενικών συνιστώσεων του x ο οποίος είναι εξ ορισμού πλήρους τάξης. Άρα $x = y = z$. Άτοπο

$\square$

$(\Rightarrow)$

Έστω πως το x είναι κορυφή του εφικτού συνόλου. Επειδή $x \in S$, έχουμε πως $Ax = b$ και $x \geq 0$. Με κατάλληλη αναδιάταξη των συνιστώσεων του x, μπορούμε να το γράψουμε ως

$$x = \begin{pmatrix} x_B \\ x_N \end{pmatrix}$$

όπου $x_N = 0$. Εάν ο πίνακας συντελεστών B του x_B έχει γραμμικά ανεξάρτητες στήλες, τότε εξ ορισμού το x είναι βασική εφικτή λύση. Εάν δεν έχει, θα κατασκευάσουμε δύο σημεία $y, z \in S$ έτσι ώστε $x = \frac{1}{2}(y+z)$ αποδυκνείοντας έτσι ότι το x δεν μπορεί να είναι κορυφή του S.

Έστω λοιπόν B_i η i^{th} στήλη του B. Εάν οι στήλες του B είναι γραμμικά εξαρτημένες, σημαίνει πώς υπάρχουν $p_1, .., p_k$ όχι όλα ίσα με 0 έτσι ώστε,

$$p_1 B_1 + ... + p_k B_k = 0$$

Ορίζοντας $p = (p_1, ..., p_k)$ η παραπάνω ισότητα ξαναγράφεται

$$Bp = 0$$

και αυτό μας δίνει πως

$$B(x_B + \alpha p) = Bx_B + \alpha Bp = Bx_B = b$$

Επειδή $x_B \geq 0$ για αρκετά μικρό $\epsilon > 0$ τα σημεία

$$y = \begin{pmatrix} x_B + \epsilon p \\ x_N \end{pmatrix} \quad \& \quad z = \begin{pmatrix} x_B - \epsilon p \\ x_N \end{pmatrix}$$

παραμένουν εφικτά και ικανοποιούν τη σχέση $x = \frac{1}{2}(y+z)$. Επομένως, το x δεν μπορεί να είναι κορυφή. Άτοπο.

Συμπεραίνουμε πως οι στήλες του B είναι γραμμικά ανεξάρτητες και άρα πως το x είναι βασική εφικτή λύση. $\square$

Στην περίπτωση που μία ή περισσότερες από τις βασικές μεταβλητές σε μία βασική εφικτή λύση x είναι 0, λέμε πως η x είναι εκφυλισμένη κορυφή και το γραμμικό πρόγραμμα λέμε πως είναι εκφυλισμένο. Σε μία εκφυλισμένη κορυφή μπορεί να υπάρχουν αρκετές βάσεις για την ίδια βασική εφικτή λύση.

Για ένα κυρτό σύνολο S μία *μη φραγμένη κατεύθυνση (direction of unboundedness)* του S είναι ένα διάνυσμα $d \neq 0$ εάν

$$x + \alpha d, \ \forall x \in S \ \& \ \alpha \geq 0$$

Λήμα

Ένα διάνυσμα $d \neq 0$ είναι μη φραγμένη κατεύθυνση του συνόλου $S = \{x : Ax = b, x \geq 0\}$, εάν και μόνο εάν $Ad = 0$ και $d \geq 0$.

Απόδειξη

$(\Leftarrow)$

Προφανής.

$(\Rightarrow)$

Εάν ένα διάνυσμα d είναι μη φραγμένη κατεύθυνση του συνόλου $S = \{x : Ax = b, x \geq 0\}$, τότε για κάθε $\alpha \geq 0$ ισχύει πως $x + \alpha d \in S \Rightarrow A(x + \alpha d) = b \Rightarrow Ad = 0$. Επιπλέον, για κάθε $\alpha \geq 0$ ισχύει πως $x + \alpha d \geq 0$ το οποίο μπορεί να ισχύει μόνο εάν $d \geq 0$, καθώς το α μπορεί να είναι αυθαίρετα μεγάλο. $\square$

Το θεώρημα που ακολουθεί μας λέει πως οποιοδήποτε σημείο του εφικτού συνόλου ενός γραμμικού προγράμματος μπορεί να γραφτεί σαν κυρτός συνδυασμός των κορυφών του και (πιθανόν) μίας μη φραγμένης κατεύθυνσής του.

Θεώρημα (Θεώρημα Αναπαράστασης)

Έστω $S = \{x : Ax = b, x \geq 0\}$ το εφικτό σύνολο ενός γραμμικού προγράμματος σε τυπική μορφή και $V = \{v_1, v_2, ..., v_k\}$ το σύνολο των κορυφών του S. Για κάθε εφικτό σημείο $x \in S$ υπάρχουν $\alpha_1, \alpha_2, ..., \alpha_k \geq 0$ με $\sum_{i=1}^{k} \alpha_i = 1$ για τα οποία ισχύει πως

$$x = d + \sum_{i=1}^{k} \alpha_i v_i$$

όπου $d = 0$ ή το d είναι μη φραγμένη κατεύθυνση του S.

Τα παραπάνω αποτελέσματα μας επιτρέπουν να αποδείξουμε πως εάν ένα γραμμικό πρόγραμμα έχει λύση, τότε ή λύση θα βρίσκεται σε μία από τις κορυφές του εφικτού συνόλου.

Θεώρημα (Βέλτιστης Βασικής Εφικτής Λύσης)

Εάν ένα γραμμικό πρόγραμμα σε τυπική μορφή έχει βέλτιστη λύση, τότε έχει μία βέλτιστη βασική εφικτή λύση.

Απόδειξη

Έστω πως $x \in S$ είναι βέλτιστη λύση του γραμμικού προγράμματος, η οποία υπάρχει από την υπόθεση. Τότε από το θεώρημα αναπαράστασης έχουμε πως

$$x = d + \sum_{i=1}^{k} \alpha_i v_i$$

όπου $\sum_{i=1}^{k} \alpha_i = 1$ και $\alpha_i \geq 0, \forall i$. Η τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης στο x θα είναι

$$c^T x = c^T d + \sum_{i=1}^{k} \alpha_i c^T v_i$$

Αποδεικνύουμε πρώτα πως $c^T d = 0$. Ορίζουμε το σημείο

$$x_\gamma = x + (\gamma - 1)d = \gamma d + \sum_{i=1}^{k} \alpha_i v_i$$

το οποίο είναι εφικτό από τον ορισμό του d. Η τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης στο x_γ είναι

$$c^T x + (\gamma - 1)c^T d$$

Εάν $c^T d < 0$, εφόσον το γ μπορεί να είναι αυθαίρετα μεγάλο, η αντικειμενική συνάρτηση δεν φράσεται από κάτω. Άτοπο, καθώς είχαμε υποθέση πως το x είναι βέλτιστη λύση. Εάν $c^T d > 0$ τότε για τιμές $0 < \gamma < 1$, έχουμε πως $c^T x_\gamma < c^T x$ το οποίο οδηγεί επίσης σε άτοπο καθώς είχαμε υποθέση πως το x είναι βέλτιστη λύση.

Άρα, $c^T d = 0$. Τώρα, έστω πως $v_* \in V$ ικανοποιεί πως $c^T v_* \leq c^T v, \forall v \in V$. Τέτοιο v υπάρχει πάντα εφόσον το $|V|$ είναι πεπερασμένο. Τότε ισχύει πως

$$c^T x = \sum_{i=1}^{k} \alpha_i c^T v_i \geq \sum_{i=1}^{k} \alpha_i c^T v_* = c^T v_*$$

Άρα εφόσον το x ήταν βέλτιστη λύση του γραμμικού προγράμματος, τότε το v_* είναι βέλτιστη βασική εφικτή λύση. $\square$

Σημειώνουμε πως είναι δυνατό να έχουμε πάνω από μία βέλτιστη βασική εφικτή λύση. Σε αυτή την περίπτωση όλοι η κυρτοί συνδυασμοί των βέλτιστων βασικών εφικτών λύσεων είναι βέλτιστες λύσεις.

3.1.2 Πίνακες Ολικής Μοναδιαίεας Ορίζουσας

Για μία ειδική κατηγορία πινάκων περιορισμών A οι λύσεις του γραμμικού προγράμματος έχουν ακέραιες συνιστώσες όταν και οι τιμές των συνιστώσεων του b είναι ακέραιες. Αυτό μας ενδιαφέρει γιατί σε ορισμένες περιπτώσεις θα μας επιτρέψει να μοντελοποιήσουμε προβλήματα ακέραιου προγραμματισμού (προβλήματα βελτιστοποίησης σε ακέραιους χώρους ορισμού) σαν προβλήματα γραμμικού προγραμματισμού (που λύνονται ευκολότερα).

Ένας πίνακας A είναι *ολικής μοναδιαίεας ορίζουσας* (*Total Unimodular* (*TUM*)) εάν κάθε τετραγωνικός υπο-πίνακας του έχει ορίζουσα ± 1 ή 0. Έστω ένα γραμμικό πρόβλημα σε κανονική μορφή με m περιορισμούς $Ax = b$ με A να είναι TUM και B ένας πίνακας που σχηματίζεται από την επιλογή m γραμμικά ανεξάρτητων στήλων του A. Έστω επίσης πως το b έχει ακέραιες συνιστώσες. Τότε οι βασικές εφικτές λύσεις του προβλήματος έχουν μη μηδενικές συνιστώσες που δίνονται από

$$x_B = B^{-1}b = \frac{B^{adj}b}{\det(B)}$$

και εφόσον ο πίνακας B^{adj} έχει σαν στοιχεία τις ορίζουσες τετραγωνικών υπο-πινάκων του A και είναι ο ίδιος τετραγωνικός υπο-πίνακας του A είναι σαφές πως το x_B έχει ακέραιες συνιστώσες.

3.1.3 Μέθοδος Simplex

Περιγραφή Αλγορίθμου

Η μέθοδος *Simplex* είναι μία από τις πιο διαδεδομένες και χρήσιμες μεθόδους επίλυσης γραμμικών προγραμμάτων. Η μέθοδος εξετάζει συστηματικά τις βασικές εφικτές λύσεις του προγράμματος για την εύρεση βέλτιστης βασικής εφικτής λύσης. Αυτό είναι αρκετό για τη λύση του προγράμματος, καθώς εάν υπάρχει βέλτιστη λύση τότε υπάρχει και βέλτιστη βασική εφικτή λύση όπως αποδείχθηκε παραπάνω.

Η *Simplex* είναι παράδειγμα μεθόδου εφικτού σημείου επίλυσης γραμμικών προγραμμάτων γραμμένα σε τυπική μορφή. Σε κάθε επανάληψη, για μη εκφυλισμένα προβλήματα, μας δίνει σαν έξοδο μία διαφορετική βασική εφικτή λύση. Σχηματικά, ο αλγόριθμος ελέγχει σε κάθε βήμα εάν η βάση στην οποία βρίσκεται είναι βέλτιστη και εάν δεν είναι επιλέγει μία εφικτή κατεύθυνση στην οποία η αντικειμενική συνάρτηση βελτιώνεται και κινείται αναλόγως σε μία γειτονική κορυφή. Δύο κορυφές λέγονται γειτονικές εάν ενώνονται από μία ακμή του εφικτού συνόλου. Αλγεβρικά δύο βάσεις λέγονται γειτονικές εάν έχουν $m-1$ κοινές μεταβλητές και δύο βασικές εφικτές λύσεις λέγονται γειτονικές εάν έχουν γειτονικές βάσεις.

Για την εξήγηση της $Simplex$ θεωρούμε το γραμμικό πρόγραμμα σε τυπική μορφή

$$\begin{aligned} \min_{x} \quad & z = c^T x \\ \text{subject to} \quad & Ax = b \\ & x \geq 0 \end{aligned}$$

Έστω πως x μία βασική εφικτή λύση με διατεταγμένες συντεταγμένες ως

$$x = \begin{pmatrix} x_B \\ x_N \end{pmatrix}$$

όπως παραπάνω. Η τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης στο x γράφεται $z = c^T x = c_B^T x_B + c_N^T x_N$ όπου c_B, c_N η συντελεστές των βασικών και μη βασικών συντελεστών αντίστοιχα. Γράφουμε επίσης τους περιορισμούς ως

$$Bx_B + Nx_N = b \Leftrightarrow x_B = B^{-1}b - B^{-1}Nx_N$$

Με αυτόν τον τρόπο αλλάζοντας μία μη βασική μεταβλητή x_N βρίσκουμε την αντίστοιχη x_B και έτσι παίρνουμε ένα νέο εφικτό σημείο. Αντικαθιστώντας αυτή την έκφραση για το x_B στην αντικειμενική συνάρτηση παίρνουμε

$$z = c_B^T(B^{-1}b - B^{-1}Nx_N) + c_N^T x_N = c_B^T B^{-1}b + (c_N^T - c_B^T B^{-1}N)x_N$$

το οποίο μπορούμε να γράψουμε πιο κομψά θέτοντας $y = (c_B^T B^{-1})^T = B^{-T}c_B$ που δίνει

$$z = c_B^T B^{-1}b + (c_N^T - y^T N)x_N$$

Οι συνιστώσες του διανύσματος y λέγονται *πολλαπλασιαστές simplex* και εξαρτώνται μόνο από την βάση που ορίζεται από το x. Γράφοντας την αντικειμενική συνάρτηση μόνο ως προς τις μη βασικές μεταβλητές μας επιτρέπει να υπολογίσουμε εύκολα πως μία αλλαγή σε κάθε μία από αυτές αλλάζει τη z. Έστω $\hat{c}_j$ η j-ιοστή συνιστώσα του $\hat{c}_N^T = (c_N^T - c_B^T B^{-1} N)$. Τότε εάν αλλάξουμε την τιμή της j-ιοστής μη βασικής μεταβλητής $x_j : 0 \to \epsilon$ τότε η αντικειμενική συνάρτηση θα αλλάξει κατά $\hat{c}_j \epsilon$. Ο συντελεστής $\hat{c}_j$ λέγεται μειωμένο κόστος του x_j.

Είναι σαφές πως εάν το μειωμένο κόστος μίας μεταβλητής είναι αρνητικό, τότε αυξάνοντας αυτή την μεταβλητή η αντικειμενική συνάρτηση θα μειωθεί. Εάν η τωρινή βασική εφικτή λύση δεν είναι βέλτιστη τότε μπορούμε να επιλέξουμε μία μη βασική μεταβλητή x_j για να προσθέσουμε στη βάση ελέγχοντας το μειωμένο κόστος της. Αφού γίνει αυτό πρέπει να καθορίσουμε πόσο μπορούμε να αυξήσουμε αυτή τη μεταβλητή προτού φύγουμε από το εφικτό σύνολο. Για αυτό το σκοπό ελέγχουμε τι αποτέλεσμα έχει η αύξηση της x_j στις μεταβλητές της τωρινής βάσης.

Η εξίσωση που σχετίζει το x_B και το x_N είναι $x_B = B^{-1}b - B^{-1}N x_N$. Αλλάζοντας το x_j (θεωρούμε το j σαν το δείκτη στο x και όχι στο x_N) παίρνουμε $x_B = B^{-1}b - B^{-1}A_j x_j$, αφού $N x_N = A_j x_j$ εφόσον η x_j είναι η μόνη μη μηδενική συνιστώσα του x_N. Η συνιστώσα x_j μπορεί να αυξηθεί εωσότου μία μεταβλητή στο x_B γίνει 0. Έστω $\hat{A}_j = B^{-1}A_j$. Εάν η i-ιοστή συνιστώσα $\hat{A}_{ji} < 0$ η αντίστοιχη μεταβλητή $(x_B)_i$ θα αυξάνεται με το x_j, ενώ εάν $\hat{A}_{ji} = 0$ η $(x_B)_i$ μένει αμετάβλητη. Προφανώς εάν $\hat{A}_{ji} > 0$ η $(x_B)_i$ μειώνεται και γίνεται μηδέν όταν $x_j = \frac{(B^{-1}b)_i}{\hat{A}_{ji}}$. Σημειώνουμε i_+ τα i για τα οποία $\hat{A}_{ji} > 0$. Έτσι λοιπόν η μεταβλητή της βάσης στην οποία αντιστοιχεί η μικρότερη τιμή του $\frac{(B^{-1}b)_{i_+}}{\hat{A}_{ji_+}}$ είναι η μεταβλητή που θα μηδενιστεί πρώτη και επομένως η μεταβλητή που θα φύγει από τη βάση.

Η ενημέρωση της βάσης και της αντικειμενικής συνάρτησης γίνεται από

$$x_B \leftarrow x_B - \hat{A}_j \min_{i \in i_+}\{\frac{(B^{-1}b)_i}{\hat{A}_{ji}}\},\ z \leftarrow z + \hat{c}_j \min_{i \in i_+}\{\frac{(B^{-1}b)_i}{\hat{A}_{ji}}\}$$

Τα παραπάνω περιγράφουν τη βασική διαδικασία της $Simplex$ και παρακάτω παρουσιάζουμε μία σκιαγράφηση του αλγορίθμου.

Αλγόριθμος ($Simplex$)

Είσοδος: c, A, x_0 (όπως παραπάνω).

Θέτω $x = x_0$.

Για $i = 1, 2, ...$

1. Υπολογίζουμε τους πολλαπλασιαστές $simplex$ y. Εάν $c_N^T \geq y^T N$ η x είναι βέλτιστη βασική εφικτή λύση και τερματίζουμε.

2. Επιλέγουμε μία συνιστώσα x_j για την οποία $(c_N^T)_j < (y^T N)_j$

3. Υπολογίζουμε το διάνυσμα $\hat{A}_j$ και τον δείκτη $i \in i_+$ για τον οποίον ελαχιστοποιείται η ποσότητα $\delta_q = \frac{(B^{-1}b)_q}{\hat{A}_{jq}}$

4. Ενημερώνουμε $x_B \leftarrow x_B - \hat{A}_j \delta_i$ και αντίστοιχα το x

Όταν το μειωμένο κόστος μίας μη βασικής μεταβλητής στη βέλτιστη βασική εφικτή λύση είναι μηδέν τότε προσθέτοντας αυτή τη μεταβλητή στη βάση δεν αλλάζουμε την τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης. Αυτό συμβαίνει όταν υπάρχει πάνω από μία βέλτιστη βασική εφικτή λύση. Η $Simplex$ είναι μέθοδος εφικτού σημείο καθώς το αποτέλεσμα του αλγορίθμου σε κάθε βήμα είναι μία βασική εφικτή λύση. Συνεπάγαιτε πως για μη εκφυλισμένα προβλήματα ο αλγόριθμος επιστρέφει μία διαφορετική κορυφή του εφικτού συνόλου σε κάθε βήμα. Επιπλέον, επειδή σε κάθε βήμα αλλάζει μία μεταβλητή της βάσης ο αλγόριθμος κινείται πάντα σε γειτονική βασική εφικτή λύση σε σχέση με την τρέχουσα.

Ο παραπάνω αλγόριθμος δεν εξηγεί το πως γίνεται η επιλόγη μεταβλήτης x_j η οποία θα μπει στη βάση σε κάθε βήμα ούτε το πως διαλέγουμε την αρχική βασική εφικτή λύση. Η επιλόγη της x_j μπορεί να γίνει με διάφορους τρόπους ένας από τους οποίους είναι η επιλογή της μεταβλητής με το ποιο αρνητικό μειωμένο κόστος. Αυτή η επιλογή δεν είναι απαραίτητα η καλύτερη. Στην επόμενη ενότητα συζητάμε το θέμα της αρχικοποίησης.

Τεχνητές Μεταβλητές

Για προβλήματα τα οποία στην κανονική τους μορφή έχουν μεταβλητή χαλάρωσης με θετικό συντελεστή σε κάθε περιορισμό τους, μπορούμε να επιλέξουμε τις μεταβλητές χαλάρωσης σαν αρχική βάση. Αυτό γιατί οι μεταβλητές της βάσης έχουν ίδιο πλήθος με τους περιορισμούς. Επίσης στην κανονική του μορφή το γραμμικό πρόγραμμα έχει $b \geq 0$ και θέτοντας όλες τις αρχικές μεταβλητές ίσες με μηδέν ικανοποιούνται όλοι οι περιορισμοί. Γενικά δεν είναι απαραίτητο πως όλοι οι περιορισμοί ενός προβλήματος θα έχουν μεταβλητές χαλάρωσης (με θετικό συντελεστή) και έτσι πρέπει να εξηγήσουμε κάποιον γενικό τρόπο για την εκκίνηση της *Simplex*.

Μία τεχνική για την επίλυση του προβλήματος αρχικοποίησης είναι η χρήση *τεχνητών μεταβλητών*. Η ιδέα είναι πως προσθέτω μία μεταβλητή σε κάθε περιορισμό που δεν έχει μεταβλητή χαλάρωσης με θετικό συντελεστή και χρησιμοποιώ αυτές τις νεές μεταβλητές μαζί με τις μεταβλητές χαλάρωσης που είχαν θετικό συντελεστή σαν μία αρχική βάση. Στη συνέχεια προσπαθούμε να κινηθούμε σε μία βασική εφικτή λύση του αρχικού προβλήματος, δηλαδή, σε μία λύση όπου όλες οι τεχνητές μεταβλητές έχουν τιμή μηδέν. Για παράδειγμα, έστω το πρόβλημα

$$\begin{aligned}
\min \quad & z = 2x_1 + 3x_2 \\
\text{s.t.} \quad & 3x_1 + 2x_2 = 14 \\
& 2x_1 - 4x_2 \geq 2 \\
& 4x_1 + 3x_2 \leq 19 \\
& x_1, x_2 \geq 0
\end{aligned}$$

Σε κανονική μορφή γράφεται ως

$$\begin{aligned}
\min \quad & z = 2x_1 + 3x_2 \\
\text{s.t.} \quad & 3x_1 + 2x_2 = 14 \\
& 2x_1 - 4x_2 - s_1 = 2 \\
& 4x_1 + 3x_2 + s_2 = 19 \\
& x_1, x_2, s_1, s_2 \geq 0
\end{aligned}$$

Βλέπουμε πως ο πρώτος περιορισμός δεν περιέχει μεταβλητή χαλάρωσης και πως η μεταβλητή s_1 θα έπρεπε να παίρνει τιμή -2 για να είναι στην αρχική βάση (καθως έχει αρνητικό συντελεστή). Έτσι δεν είναι σαφές το πως πρέπει να επιλέξουμε την αρχική βάση. Με την εισαγωγή τεχνητών μεταβλητών το πρόβλημα παίρνει τη μορφή

$$\begin{aligned}
\min \quad & z = 2x_1 + 3x_2 \\
\text{s.t.} \quad & 3x_1 + 2x_2 + a_1 = 14 \\
& 2x_1 - 4x_2 - s_1 + a_2 = 2 \\
& 4x_1 + 3x_2 + s_2 = 19 \\
& x_1, x_2, s_1, s_2, a_1, a_2 \geq 0
\end{aligned}$$

και τώρα επιλέγουμε σαν αρχική βάση τις μεταβλητές a_1, a_2, s_2 η οποίες παίρνουν τιμές $x_B = (a_1, a_2, s_2) = (14, 2, 19)$. Στοχος μας είναι να καταφέρουμε να κινηθούμε από αυτή τη βάση σε μία βασική εφικτή λύση του αρχικού προβλήματος, δηλαδή, σε μία βάση που δεν περιέχει τις τεχνητές μεταβλητές. Είναι σαφές πως η αρχική βάση που δίνουμε μέσω των τεχνητών μεταβλητών δεν είναι καν εφικτό σημείο για το αρχικό πρόβλημα.

Η *μέθοδος δύο φάσεων* είναι μία διαδικασία για την εύρεση αρχικής βασικής εφικτής λύσης μετά την αρχικοποίηση με τεχνητές μεταβλητές. Ξεκινάει -στην πρώτη φάση- με τον ορισμό βοηθιτικού γραμμικού προγράμματος με αντικειμενική συνάρτηση

$$z^* = \sum_i a_i$$

και περιορισμούς ίδιους με τους περιορισμούς του αρχικού προβλήματος. Λόγο των περιορισμών η ελάχιστη τιμή που θα μπορούσε να πάρει αυτή η συνάρτηση σε εφικτό σημείο είναι 0. Συγκεκριμένα, εάν το αρχικό εφικτό σύνολο δεν είναι άδειο θα μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε τη *simplex* για να φτάσουμε σε ένα σημείο στο οποίο $z^* = 0$ και αυτό θα αντιστοιχούσε σε βασική εφικτή λύση του αρχικού προβλήματος. Εάν δεν γίνεται αυτό σημαίνει πως η λύση του βοηθητικού προβλήματος θα έχει τιμή $z^* > 0$ και σε αυτή την περίπτωση το αρχικό πρόβλημα δεν έχει λύση.

Εάν η βέλτιστη λύση του βοηθητικού προβλήματος είναι βασική εφικτή λύση του αρχικού προγράμματος, μπορούμε να τη χρησιμοποιήσουμε -στη δεύτερη φάση- για να τρέξουμε τη *simplex* στο αρχικό πρόβλημα. Έτσι λοιπόν έχουμε μία μέθοδο για να αντιμετωπίσουμε το πρόβλημα της εύρεσης αρχικής βασικής εφικτής λύσης.

Ένας δεύτερος τρόπος να αντιμετωπίσουμε την αρχικοποίηση είναι μέσω της μεθόδου του *μεγάλου M*. Αυτή λειτουργεί αλλάζοντας την αντικειμενική συνάρτηση του προβλήματος

$$z \to z' = z + M \sum_i a_i$$

Όπου M μία θετική τιμή. Είναι σαφές από τους περιορισμούς του προβλήματος πως ο όρος $M\sum_i a_i$ θα είναι πάντα μη αρνητικός. Έτσι, η βέλτιστη τιμή της z' θα είναι η ίδια με τη βέλτιστη τιμή της z. Επομένως, μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε τη *simplex* για να λύσουμε το πρόβλημα με τεχνητές μεταβλητές και να βρούμε λύση που είναι βέλτιστη και για το αρχικό πρόγραμμα. Στην πράξη η τιμή της M πρέπει να επιλέγεται αρκετά μεγάλη ώστε να οδηγεί της τεχνητές μεταβλητές εκτός βάσης γρήγορα. Αυτό γιατί θέλουμε μετά από συγκεκριμένο αριθμό επαναλήψεων να υπάρχει κάποια εγγύηση πως η λύση στην οποία έχουμε φτάσει είναι εφικτή. Εάν το M επιλεχθεί πολύ μεγάλο μπορεί να οδηγήσει σε προβλήματα υπολογισμού λόγο στρογγυλοποίησης.

Σύγκλιση

Εάν για κάποιο πρόβλημα σε κάποια επανάληψη της *simplex* προκύπτει πως μία βασική μεταβλητή είναι 0 τότε ο αλγόριθμος μπορεί να παγιδευτεί σε ένα κύκλο δίχως τέλος στον οποίο η τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης δεν βελτιώνεται. Για παράδειγμα, εάν $(B^{-1}b)_i = 0$ τότε θα ισχύει πως $\min\limits_{q\in i_+}\{\frac{(B^{-1}b)_q}{\hat{A}_{jq}}\} = 0$ και άρα βγαίνει από τη βάση μία μεταβλητή με τιμή μηδέν και μπαίνει τη βάση μία μεταβλητή με τιμή μηδέν (αφού ενημερώνεται με μηδενική αλλαγή). Έτσι παρατηρούμε πως πρώτων η τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης δεν αλλάζει αφού ουσιαστικά βρισκόμαστε στην ίδια κορυφή και δεύτερον, πως υπάρχει και πάλι μία μεταβλητή μηδενικής τιμής στη βάση. Αυτό σημαίνει πως ο αλγόριθμος έχει παγιδευτεί αφού θα επαναλαμβάνεται η παραπάνω διαδικασία επ΄ άπειρον.

Το παραπάνω πρόβλημα μπορούμε ωστόσο να το συναντήσουμε μόνο σε εκφυλισμένα προγράμματα. Εάν εξαιρέσουμε τέτοια προγράμματα η *simplex* συγκλίνει πάντα σε πεπερασμένο αριθμό βημάτων όπως αποδεικνύεται μέσω του παρακάτω θεωρήματος.

Θεώρημα (Σύγκλιση της *Simplex*)

Έστω πως εφαρμόζουμε την μέθοδο *simplex* σε γραμμικό πρόγραμμα για το οποίο σε κάθε βήμα του αλγορίθμου κάθε βασική μεταβλητή έχει θετική τιμή. Τότε, σε πεπερασμένο αριθμό βημάτων, η μέθοδος είτε τερματίζει σε βέλτιστη βασική εφικτή λύση είτε αποφασίζει πως το πρόβλημα είναι μη φραγμένο.

Απόδειξη

Εάν σε μία επανάληψη της *simplex* όλα τα μειωμένα κόστοι είναι μη αρνητικά, τότε τερματίζει ο αλγόριθμος και για τους λόγους που εξηγήθηκαν παραπάνω η έξοδος είναι βελτιστη βασική εφικτή λύση. Διαφορετικά, μπορούμε να βρούμε μία μεταβλητή με αρνητικό μειωμένο κόστος για την οποία (από την υπόθεση του θεωρήματος) η ενημέρωση $\min\limits_{q \in i_+}\{\frac{(B^{-1}b)_q}{\hat{A}_{jq}}\} > 0$, εκτός εάν $\forall i \ \hat{A}_{ji} \leq 0$ στην οποία περίπτωση το πρόβλημα είναι μη φραγμένο και ο αλγόριθμος τερματίζει.

Εάν λοιπόν το πρόβλημα είναι φραγμένο, κάτω από την υπόθεση του θεωρήματος σε κάθε επανάληψη η αντικειμενική συνάρτηση μειώνεται. Αυτό όμως σημαίνει πως δεν μπορεί ο αλγόριθμος να επισκεφθεί δεύτερη φορά την ίδια βάσικη εφικτή λύση αφού σε αυτή την περίπτωση η αντικειμένικη συναρτηση δεν θα είχε μειωθεί στις ενδιάμεσες επαναλήψεις. Άρα λοιπόν σε κάθε επανάληψη ο αλγόριθμος επισκέπτεται μία νέα κορυφή του εφικτού συνόλου και επειδή υπάρχει πεπερασμένος αριθμός κορυφών ο αλγόριθμος θα τις έχει επισκεφθεί όλες σε πεπερασμένο αριθμό βημάτων ή θα έχει φτάσει στη βέλτιστη λύση σε πεπερασμένο αριθμό βήματων. □

Κλείνοντας αυτή την ενότητα σημειώνουμε πως υπάρχουν τρόποι να αναγκάσουμε την *simplex* να τερματίσει ακόμα και όταν το γραμμικό πρόγραμμα είναι εκφυλισμένο αλλά τέτοιες μέθοδοι δεν συζητήθηκαν στα πλαίσια του μαθήματος.

3.2 Θεωρία Δυικότητας

3.2.1 Όρισμοι & θεωρήματα

Για κάθε γραμμικό πρόγραμμα υπάρχει ένα άλλο, στενά συνδεδεμένο, γραμμικό πρόγραμμα το οποίο λέμε *δυικό* και στο οποίο ο ρόλος των μεταβλητών και των περιορισμών αντιστρέφεται. Για κάθε μεταβλητή στο πρωτεύον πρόβλημα έχουμε έναν περιορισμό στο δυικό και για κάθε περιορισμό στο πρωτεύον έχουμε μία μεταβλητή στο δυικό. Ο ορισμός του δυικού είναι πιο φυσικός όταν το πρωτεύον πρόβλημα είναι γραμμένο σε *κανονική μορφή*, δηλαδή ως

$$\begin{aligned} \min \quad & z = c^T x \\ \text{s.t.} \quad & Ax \geq b \\ & x \geq 0 \end{aligned}$$

Αποδεικνύεται τετριμμένα πως κάθε γραμμικό πρόγραμμα γράφεται σε κανονική μορφή. Το δυικό για το παραπάνω αυθαίρετο πρωτεύον πρόβλημα ορίζεται ως

$$\begin{aligned} \max \quad & w = b^T \lambda \\ \text{s.t.} \quad & A^T \lambda \leq c \\ & \lambda \geq 0 \end{aligned}$$

Μπορεί εύκολα κανείς να δει πως το δυικό πρόβλημα του δυικού προβλήματος είναι το πρωτεύον πρόβλημα. Η θεωρία της δυικότητας μας δίνει δύο σημαντικά αποτελέσματα που συσχετίζουν το πρωτεύον πρόβλημα με το δυικό. Αυτά μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την δημιουργία νέων μεθόδων επίλυσης γραμμικών προγραμμάτων. Επιπλέον, πολλά κομμάτια αυτής της θεωρίας επεκείνονται και στο μη γραμμικό προγραμματισμό. Παρακάτω ξεκινάμε τη συζήτηση αυτών των αποτελεσμάτων αποδεικνύοντας τα σχετικά θεωρήματα.

Θεώρημα (Ασθενής δυικότητα)

Έστω x εφικτό σημείο για το πρωτεύον πρόβλημα σε κανονική μορφή και λ εφικτό σημείο για το δυικό πρόβλημα. Τότε,

$$z = c^T x \geq b^T \lambda = w$$

Απόδειξη

Έχουμε από τους περιορισμούς του δυικού πως $c^T \geq \lambda^T A$ και άρα ακολουθεί πως

$$z = c^T x \geq \lambda^T A x \geq \lambda^T b = b^T \lambda = w$$

□

Από το παραπάνω θεώρημα προκύπτουν κάποια ενδιαφέροντα πορίσματα. Πρώτων, εάν το πρωτεύον πρόβλημα είναι μη φραγμένο τότε το δυικό πρόβλημα δεν έχει λύσεις και εάν το δυικό πρόβλημα είναι μη φραγμένο τότε το πρωτεύον δεν έχει λύσεις. Επιπλέον, εάν τα x, λ είναι εφικτά σημεία για το πρωτεύον και το δυικό αντίστοιχα και ισχύει $c^T x = b^T \lambda$ τότε τα x, λ είναι βέλτιστα.

Θεώρημα (Ισχυρή δυικότητα)

Έστω ένα γραμμικό πρόγραμμα και το δυικό του. Εάν το ένα από τα δύο έχει βέλτιστη λύση, τότε έχει και το άλλο και οι βέλτιστες τιμές των αντικειμενικών συναρτήσεων τους είναι ίσες.

Απόδειξη

Εάν το πρωτεύον πρόβλημα έχει λύση x_* τότε χωρίς απώλεια γενίκευσης είναι βέλτιστη βασική εφικτή λύση. Γράφουμε

$$x_* = \begin{pmatrix} x_B \\ x_N \end{pmatrix},\ A = \begin{pmatrix} B & N \end{pmatrix},\ c = \begin{pmatrix} c_B \\ c_N \end{pmatrix}$$

Από τη βελτιστότητα του x_* ακολουθεί πως τα μειωμένα κόστη των συνιστώσεων του είναι όλα μη αρνητικά και άρα

$$c_N^T - c_B^T B^{-1} N \geq 0 \Leftrightarrow c_N^T \geq c_B^T B^{-1} N$$

Έστω λ_* οι πολλαπλασιαστές *simplex* που αντιστοιχούν σε αυτή τη βέλτιστη βασική εφικτή λύση. Έχουμε

$$\lambda_*^T A = c_B^T B^{-1} A = c_B^T B^{-1} \begin{pmatrix} B & N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_B^T & c_B^T B^{-1} N \end{pmatrix} \leq c^T$$

και άρα το λ_* είναι εφικτό σημείο του δυικού προγράμματος. Επιπλέον,

$$w = b^T \lambda_* = \lambda_*^T b = c_B^T B^{-1} b = c_B^T x_B = z$$

που σημαίνει πως το λ_* είναι βέλτιστη λύση για το δυικό και πως οι βέλτιστες τιμές των αντικειμενικών συναρτήσεων είναι ίσες. □

Από την παραπάνω απόδειξη παρατηρούμε πως σε κάθε βήμα του αλγόριθμου *simplex* τα μειωμένα κόστη που δίνονται από $\hat{c} = c - A^T \lambda$ είναι οι μεταβλητές χαλάρωσης του δυικού προβλήματος. Όσο αυτά είναι αρνητικά οι πολλαπλασιαστές *simplex* είναι μη εφικτά σημεία του δυικού προγράμματος.

Υπάρχει μία ακόμα σημαντική σχέση ανάμεσα σε πρωτεύον πρόγραμμα και στο δυικό του που συνοψίζεται στο ακόλουθο θεώρημα.

Θεώρημα (Συμπληρωματική Χαλάρωση)

Εάν η x_* είναι βέλτιστη λύση για ένα γραμμικό πρόγραμμα και λ είναι βέλτιστη λύση για το δυικό του, τότε

$$x^T(c - A^T\lambda) = 0 \tag{3.1}$$

Επιπλέον, εάν η x είναι εφικτή λύση για το πρωτεύον και η λ είναι εφικτή λύση για το δυικό και ισχυέι η (3.1) τότε τα x, y είναι βέλτιστα. Η συνθήκη (3.1) λέγεται συμπληρωματική χαλάρωση.

Απόδειξη

Αν x, λ όπως στην υπόθεση είναι βέλτιστα, τότε από την ισχυρή δυικότητα έχουμε πως $c^T x - \lambda^T A x = 0 \Leftrightarrow x^T(c - A^T\lambda) = 0$ που αποδεικνύει το πρώτο μέρος του θεωρήματος.

Εάν $x^T(c - A^T\lambda) = 0$ τότε $z = w$ και άρα εφόσον x, λ είναι εφικτά πρέπει x, λ να είναι και βέλτιστα από την ασθενή δυικότητα. $\square$

Έστω $x_j(c_j - A_j^T\lambda)$ η j-ιοστή συνιστώσα του διανύσματος $x^T(c - A^T\lambda)$. Είναι πιθανόν να έχουμε ταυτόχρονα $x_j = 0$ και $c_j = A_j^T\lambda$, όταν για παράδειγμα το πρόβλημα είναι εκφυλισμένο. Εάν για κάθε x_j ισχύει ακριβώς ένα από τα $x_j = 0$ και $c_j = A_j^T\lambda$ τότε λέμε πως έχουμε *αυστηρή συμπληρωματική χαλάρωση*. Για κάθε γραμμικό πρόγραμμα που έχει βέλτιστη εφικτή λύση υπάρχει ένα ζεύγος από αυστηρά συμπληρωματικές λύσεις για το πρωτεύον και το δυικό. Ωστόσο, αυτές δεν είναι απαραίτητα βασικές λύσεις.

Γενικά, για x εφικτό σημείο του πρωτεύοντος προβλήματος και y εφικτό σημείο του δυικού, λέμε *χάσμα δυικότητας* την ποσότητα $c^T x - b^T y$. Το χάσμα δυικότητας είναι μη αρνητικό και μηδενίζεται μόνο όταν τα x, y είναι βέλτιστα για τα αντίστοιχα προβλήματα τους.

3.2.2 Αλγόριθμοι

Σε αυτή την ενότητα συζητάμε κάποιους αλγορίθμους που εκμεταλεύονται τα παραπάνω θεωρήματα για να λύσουν ένα γραμμικό πρόγραμμα. Όπως είδαμε, το θεώρημα συμπληρωματικής χαλάρωσης μας δίνει πως εάν ένα εφικτό σημείο x για το πρωτεύον και ένα εφικτό σημείο y για το δυικό ικανοποιούν την συνθήκη συμπληρωματικής χαλάρωσης, τότε τα x, y είναι βέλτιστα για τα αντίστοιχα προβλήματα τους. Θα κατασκευάσουμε έναν επαναληπτικό αλγόριθμο που εκμεταλεύεται αυτό το αποτέλεσμα ως εξής.

Θα αναζητούμε ζεύγη σημείων (x_k, y_k), όπου το y_k είναι εφικτό σημείο για το δυικό και το ζευγάρι (x_k, y_k) ικανοποιεί την συνθήκη συμπληρωματικής χαλάρωσης. Σε κάθε βήμα θα προσπαθούμε να διατηρήσουμε την εφικτότητα του y_k και την συνθήκη συμπληρωματικής χαλάρωσης και να επιτύχουμε την εφικτότητα του x_k. Το δυικό είναι απλά ένα γραμμικό πρόγραμμα και μπορούμε να βρούμε πάντα μία αρχική βασική εφικτή λύση (εάν υπάρχει) με τη μέθοδο αρχικοποίησης της $simplex$. Έτσι επιλέγουμε το y_0.

Έστω $J = \{j : y_0^T A_j = c_j\}$. Για $i \notin J$ θέτουμε $(x_0)_i = 0$ και αυτό εξασφαλίζει την συμπληρωματική χαλάρωση. Όταν το x_k είναι εφικτό ο αλγόριθμος τερματίζει. Για να είναι εφικτό πρέπει να ισχύουν τα παρακάτω

$$\sum_{j\in J} a_{ij}x_j = b_i \ \forall i$$

$$x_j \geq 0 \ \forall j \in J$$

$$x_j = 0 \ \forall j \notin J$$

ορίζουμε το *περιορισμένο πρωτεύον πρόβλημα* (RP)

$$\begin{aligned} \min \qquad & q = \sum_i y_i \\ \text{s.t.} \qquad & y_i + \sum_{j\in J} a_{ij}x_j = b_i \ \forall i \\ & x_j \geq 0 \ \forall j \in J \\ & x_j = 0 \ \forall j \notin J \\ & y_i \geq 0 \ \forall i \end{aligned}$$

Διαισθητικά, όταν το q είναι ελάχιστο, τότε το x είναι όσο πιο κοντά γίνεται στο να είναι εφικτό για το παρόν y. Εάν το $q = 0$ τότε ο αλγόριθμος τερματίζει καθώς το x θα είναι εφικτό για το πρωτεύον και άρα βέλτιστο. Στο επόμενο βήμα υπολογίζουμε το δυικό του περιορισμένου πρωτεύοντος προβλήματος (DRP) προκειμένου να ενημερώσουμε το y. Αυτό είναι απαραίτητο καθώς το τωρινό y δεν είναι βέλτιστο (αλλιώς θα είχαμε $q = 0$). Έστω πως $\bar{y}$ είναι η λύση του DRP. Τότε, από την ισχυρή δυικότητα εφαρμοσμένη στα RP και DRP έχουμε πως $\bar{y}^T b > 0$. Αυτό σημαίνει πως το $y_{k+1} = y_k + \theta\bar{y}$ για θετικό θ θα βελτιώνει την τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης του δυικού οπότε πρέπει απλά να βεβαιώσουμε πως το y_{k+1} θα παραμένει εφικτό σημείο για το αρχικό δυικό (μέσω της επιλογής του θ).

Για να παραμένει το y_{k+1} εφικτό, πρέπει να ισχύει

$$y_{k+1}^T A_j \leq c_j \ \forall j \notin J$$

Έτσι, το βέλτιστο θ το οποίο μας φέρνει όσο πιο κοντά γίνεται στη βέλτιστη λύση για το τωρινό x δίνεται από

$$\theta = \min_{j \notin J,\ \bar{y}^T A_j > 0} [\frac{c_j - y_k^T A_j}{\bar{y} A_j}]$$

Επαναλαμβάνουμε αυτή τη διαδικασία μέχρι ο αλγόριθμος να συγκλίνει στη βέλτιστη λύση. Σημειώνουμε πως σε κάθε βήμα εξασφαλίζουμε πως το y_k είναι εφικτό και η τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης του δυικού αυξάνεται, πως ισχύει η συμπληρωματική χαλάρωση και πως το x_k έρχεται όλο και πιο κοντά στο εφικτό σύνολο.

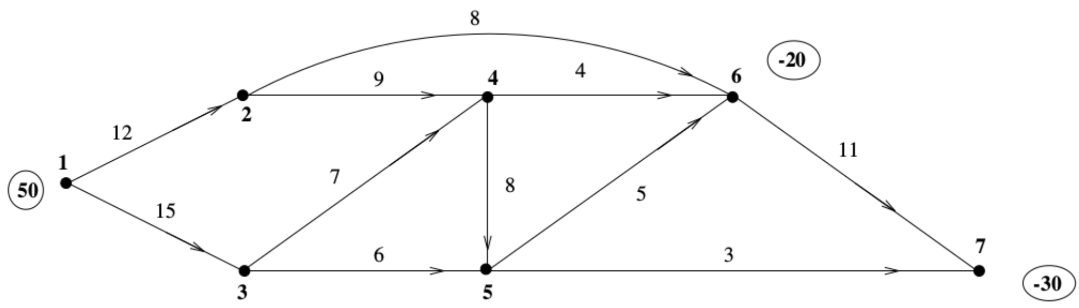
Ο παραπάνω αλγόριθμος που περιγράψαμε λέγεται αλγόριθμος *πρωτεύοντος-δυικού*. Όπως είδαμε η κεντρική του ιδέα είναι το να λύσει το γραμμικό πρόγραμμα λύνοντας μία σειρά από ευκολότερα γραμμικα προγράμματα (RP & DRP). Η μέθοδος πρωτεύοντος-δυικού είναι μία μέθοδος *εξωτερικού σημείου*, αλλά μπορούμε να τη μετατρέψουμε σε μέθοδο εσωτερικού σημείου αντιστρέφοντας το ρόλο του πρωτεύοντος και του δυικού προβλήματος.

3.3 Προβλήματα Δικτύων

Τα γραμμικά προγράμματα που ορίζονται σε δίκτυα έχουν πολλές ιδιότητες που μας επιτρέπουν να επαναδιατυπώσουμε τη μέθοδο *simplex* και να λύσουμε προβλήματα μεγάλης κλίμακας πιο αποδοτικά. Το βασικό πρόβλημα με το οποίο θα ασχοληθούμε είναι η εύρεση *ροής δικτύου ελαχίστου κόστους*. Αυτό, γραμμένο σαν γραμμικό πρόγραμμα έχει την παρακάτω μορφή

$$\begin{aligned} \min \quad & z = c^T x \\ \text{s.t.} \quad & A^T x = b \\ & l \le x \le u \end{aligned}$$

όπου επιτρέπουμε σε συνιστώσες του l και του u να πάρουν τιμές $-\infty, \infty$. Ας δούμε πως μπορούμε να μοντελοποιήσουμε ένα δίκτυο με αυτόν τον τρόπο. Έστω το παρακάτω δίκτυο (παρμένο από το βιβλίο του μαθήματος)



Για κάθε διατεταγμένο ζευγάρι κορυφών του δικτύου (i, j) έχουμε μία μεταβλητή x_{ij} και ένα κόστος c_{ij}. Θεωρούμε πως το x_{ij} έχει περιορισμούς $0 \leq x \leq 30$ ενώ το c_{ij} μας λέει το κόστος μεταφοράς μίας μονάδας ροής από τον κόμβο i στον j. Έτσι για κάθε κατευθυνόμενη ακμή στο δίκτυο έχουμε μία μεταβλητή και αντίστοιχα για κάθε κορυφή έχουμε έναν ισωτικό περιορισμό που δίνετε από

$$\sum_j x_{ij} - \sum_k x_{ki} = b_i$$

Ο περιορισμός αυτός μας λέει το πως η ροή που εισέρχεται σε έναν κόμβο i σχετίζεται με τη ροή που φεύγει από τον ίδιο κόμβο. Όταν το b_i είναι θετικό ο κομβός λέγεται *πηγή*, όταν είναι μηδεν *κομβός σταθερής ροής* ενώ όταν είναι αρνητικό λέγεται *κόμβος βύθισης*. Για παράδειγμα στον παραπάνω γράφο ο κόμβος 1 είναι πηγή αφού προσθέτει 50 στη ροή ενώ οι κόμβοι $6, 7$ είναι κόμβοι βύθισης αφου αφαιρούν 20 και 30 αντίστοιχα από τη ροή. Το παραπάνω δικτυακό πρόβλημα ροής ελάχιστου κόστους γράφεται σαν γραμμικό πρόγραμμα ως

$$\begin{aligned}
\min \quad z = 12x_{12} + 15x_{13} + 9x_{24} + 8x_{26} + 7x_{34} + 6x_{35} + \\
+4x_{46} + 8x_{45} + 5x_{56} + 3x_{57} + 11x_{67} \\
\text{s.t.} \qquad\qquad\qquad\qquad\qquad x_{12} + x_{13} = 50 \\
x_{24} + x_{26} - x_{12} = 0 \\
x_{34} + x_{35} - x_{13} = 0 \\
x_{45} + x_{46} - x_{24} - x_{34} = 0 \\
x_{56} + x_{57} - x_{45} - x_{35} = 0 \\
x_{67} - x_{46} - x_{56} - x_{26} = -20 \\
-x_{57} - x_{67} = -30 \\
0 \leq x \leq 30
\end{aligned}$$

Παρατηρούμε πως όλοι οι συντελεστές του μητρώου περιορισμών είναι ± 1 ή 0. Επίσης το άθροισμα όλων των περιορισμών είναι μηδέν αφού κάθε ακμή που προστήθετε σε έναν κόμβο θα αφαιρείται από έναν άλλον. Έτσι ο βαθμός του πίνακα περιορισμών είναι το πολύ $m - 1$ όπου m ο αριθμός περιορισμών που είναι ίσος με τον αριθμό κόμβων. Εάν το άθροισμα των b είναι επίσης 0 τότε οι περιορισμοί είναι συμβατοί μεταξύ τους και απλά υπάρχει (τουλάχιστον ένας) περιορισμός που είναι περιττός. Αποδεικνύεται πως ο βαθμός του πίνακα περιορισμών είναι $m - 1$.

Ένα *δέντρο* σε ένα δίκτυο, είναι ένα συνδεδεμένο υποδίκτυο που δεν έχει κλίκες. Ένα *γεννητικό δέντρο* είναι ένα δέντρο που περιέχει όλους τους κόμβους του αρχικού δικτύου. Από εδώ και στο εξής θεωρούμε πως το δίκτυο του προβλήματος είναι συνδεδεμένο και πως δεν υπάρχουν ακμές της μορφής (i, i).

Είναι προφανές πως για οποιοδήποτε δέντρο με πάνω από ένα κόμβο υπάρχει τουλάχιστον ένας κόμβος που συνδέετε με μία μοναδική ακμή. Επιπλέον ένα γεννητικό δέντρο με m κόμβους έχει ακριβώς $m-1$ ακμές. Αυτό αποδεικνύεται με μαθηματική επαγωγή οπού στο επαγωγικό βήμα αφαιρούμε έναν από τους κόμβους που συνδέονται με μοναδική ακμή και την ακμή του. Τέλος, εάν ένα δίκτυο περιέχει κάποια κλίκα, τότε αφαιρώντας μία ακμή από αυτή την κλίκα δίνει ένα συνδεδεμένο δίκτυο με μία λιγότερη κλίκα. Ακολουθεί πως επαναλαμβάνοντας αυτή τη διαδικασία μπορώ πάντα να βρω ένα γεννητικό δέντρο του αρχικού δικτύου.

Για δεδομένο πρόβλημα ο πίνακας περιορισμών έχει μία στήλη για κάθε μεταβλητή, δηλαδή για κάθε ακμή του δικτύου. Αποδεικνύεται πως κρατώντας μόνο τις στήλες που αντιστοιχούν σε ένα γεννητικό δέντρο του δικτύου ο πίνακας με διαστάσεις $m \times (m-1)$ που προκύπτει είναι βαθμού $m-1$. Μία *λύση γεννητικού δέντρου* x είναι μία λύση για την οποία ικανοποιούνται οι περιορισμοί $Ax = b$ του δικτύου και επίσης υπάρχει ένα γεννητικό δέντρο T και για κάθε ακμή (i, j) που δεν είναι μέρος του T, έχουμε $x_{ij} = 0$. Μία *εφικτή λύση γεννητικού δέντρου* ικανοποιεί επιπλέον $x \geq 0$.

Αποδεικνύεται πως μία λύση για ένα πρόβλημα δικτύου είναι βασική εφικτή λύση του αντίστοιχου γραμμικού προγράμματος εάν και μόνο εάν είναι λύση γεννητικού δέντρου. Αυτό το γεγονός μας επιτρέπει να ορίσουμε μία πιο αποδοτική μορφή της μεθόδου *simplex* για προβλήματα ροής δικτύου ελαχίστου κόστους. Ωστόσο, δεν συζητάμε λεπτομέρειες στα πλαίσια του μαθήματος.

3.4 Υπολογιστική Πολυπλοκότητα Γραμμικού Προγραμματισμού

Σε πρακτικές δοκιμές, ακόμα και σε μεγάλα περίπλοκα προβλήματα η *simplex* μπορεί αποδοτικά να δώσει αποτελέσματα. Ωστόσο, έχει αποδειχθεί πως για μία συγκεκριμένη κλάση προβλημάτων η πολυπλοκότητα της μεθόδου είναι εκθετική. Αυτό οδήγησε ερευνητές στην αναζήτηση πολυωνυμικών αλγορίθμων για την επίλυση γραμμικών προγραμμάτων και την ανακάλυψη της ελλειψοειδούς μεθόδου η οποία παρά την καλή θεωρητική της απόδοση πρακτικά δεν είναι αποδοτική. Για αυτό το λόγο η μέθοδος *simplex* παρέμεινε ευρέως διαδεδομένη.

Αργότερα αποδείχθηκε επίσης πως μετρώντας την απόδοση με την μέση περίπτωση (αντί για τη χειρότερη περίπτωση) και εάν εξαιρέσουμε μία συγκεκριμένη κλάση προβλημάτων, η *simplex* είναι πολυωνυμική. Το 1984 ο *Karmakar* πρότεινε έναν νέο πολυωνυμικό αλγόριθμο για την επίλυση γραμμικών προγραμμάτων που οδήγησε στην ανάπτηξη της κλάσης μεθόδων εσωτερικού σημείου. Αυτές οι μέθοδοι συναγωνίζονται πρακτικά τη μέθοδο *simplex* και έχουν καλύτερες θεωρητικές εγγυήσεις.

Όταν μιλάμε για την πολυπλοκότητα των αλγορίθμων εδώ, αναφερόμαστε στο πόσο γρήγορα αυξάνονται οι πράξεις που εκτελεί ο αλγόριθμος σε σχέση με την είσοδο του. Για παράδειγμα, για τη *simplex* σε ένα πρόβλημα με n μεταβλητές και m περιορισμούς θα μας ενδιέφερε το πως αυξάνεται ο αριθμός πράξεων του αλγορίθμου σαν συνάρτηση του n και του m. Όπως αναφέραμε και σε προηγούμενη ενότητα υπάρχουν $\binom{n}{m}$ βασικές εφικτές λύσεις για ένα γραμμικό πρόγραμμα με n μεταβλητές και m περιορισμούς και υπάρχει η πιθανότητα η *simplex* να πρέπει να τις επισκεφθεί όλες.

Για τα περισσότερα προβλήματα που συναντάμε στην πράξη η *simplex* επισκέπτεται ένα μικρό αριθμό από αυτες τις βασικές εφικτές λύσεις και αυτό κάνει τη μέθοδο πρακτικά αποδοτική. Ωστόσο, το 1972 αποδείχθηκε πως για κάθε κανόνα ανταλλαγής βασικών και μη βασικών μεταβλητών στις επαναλλήψεις της *simplex*, υπάρχουν προβλήματα αυθαίρετου μεγέθους για τα οποία η *simplex* επισκέπτεται όλες τις βασικές εφικτές λύσεις του προβλήματος και άρα είναι εκθετική.

Chapter 4

Βελτιστοποίηση Χωρίς Περιορισμούς

Σε αυτό το κεφάλαιο μελετάμε το πρόβλημα βελτιστοποίησης μίας συνάρτησης $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ όταν όλα τα σημεία $x \in \mathbb{R}^n$ είναι εφικτά. Επιπλέον, θεωρούμε πως η f έχει συνάρτηση $Taylor$. Όπως έχουμε συζητήσει και νωρίτερα, η εύρεση ολικού βέλτιστου σημείου για μία γενική συνάρτηση είναι πολύ δύσκολο πρόβλημα. Επιπλέον, δεν είναι καν εύκολο να πιστωποιήσουμε πως ένα δεδομένο τοπικό βέλτιστο είναι και ολικό. Για αυτό το λόγο, μπορούμε να πούμε πως η καλύτερη προσέγγιση στη βελτιστοποίηση μίας συνάρτησης είναι η προσπάθεια εύρεσης τοπικών βέλτιστων.

Η εύρεση τοπικών βέλτιστων είναι ένα πιο προσιτό πρόβλημα. Όπως θα δούμε στη συνέχεια έχουμε αναγκαίες και επαρκείς συνθήκες για την τοπική βελτιστότητα που μπορούμε να ελέγξουμε εύκολα. Επιπλέον, σε ορισμένες περιπτώσεις, όπως όταν η f είναι κυρτή/κοίλη, η εύρεση τοπικού βέλτιστου ισοδυναμεί με την εύρεση ολικού.

4.1 Συνθήκες Τοπικής Βελτιστότητας

Ξεκινάμε τη σύζητηση για προβλήματα ελαχιστοποίησης. Παρόμοια αποτελέσματα αποδεικνύονται και για προβλήματα μεγιστοποίησης.

Έστω x_* ένα τοπικό ελάχιστο της συνάρτησης f. Από το θεώρημα $Taylor$ έχουμε πως για $p = x - x_*$,

$$f(x_* + p) = f(x_*) + \nabla f(x_*)^T p + \frac{1}{2} p^T \nabla^2 f(\xi) p$$

για κάποιο ξ ανάμεσα στο x και στο x_*. Εφόσον το x_* είναι τοπικό ελάχιστο, ισχύει πως $\forall p \in \mathbb{R}^n$ για αρκετά μικρό $\epsilon > 0$,

$$f(x_* + \epsilon p) > f(x_*) \Rightarrow \nabla f(x_*)^T p + \frac{1}{2} \epsilon p^T \nabla^2 f(\xi) p > 0$$

Συγκεκριμένα, αυτό πρέπει να ισχύει και καθώς $\epsilon \to 0$ που δίνει

$$\nabla f(x_*)^T p > 0, \ \forall p \in \mathbb{R}^n$$

Εάν διαλέξουμε ένα $p_0 \in \mathbb{R}^n$ τότε έχουμε

$$\nabla f(x_*)^T p_0 > 0 \text{ και } \nabla f(x_*)^T (-p_0) > 0$$

και άρα συμπεραίνουμε πως $\nabla f(x_*)^T = 0$.

Αυτό είναι μία απαραίτητη συνθήκη να είναι το x_* τοπικό ελάχιστο και αποδεικνύεται πως είναι και απαραίτητη συνθήκη για να είναι το x_* μέγιστο σε ένα αντίστοιχο πρόβλημα μεγιστοποίησης. Λέμε αυτη τη συνθήκη *απαραίτητη συνθήκη πρώτου βαθμού* αφού αφορά μόνο την παράγωγο πρώτου βαθμού. Η συνθήκη πρώτου βαθμού δεν είναι επαρκής αφού ικανοποιείτε από τοπικά ελάχιστα, μέγιστα και σαγματικά σημεία. Ωστόσο, μπορούμε να διαχωρίσουμε αυτές τις περιπτώσεις εξετάζοντας και τη δεύτερη παράγωγο.

Εάν ένα σημείο x_* είναι τοπικό ελάχιστο, τότε από το θεώρημα $Taylor$ και τη συνθήκη πρώτου βαθμού ακολουθεί πως,

$$f(x_* + p) - f(x_*) = \frac{1}{2}p^T \nabla^2 f(\xi) p > 0$$

για κάποιο ξ ανάμεσα στο x και στο x_* και για κάθε κατεύθυνση p. Έστω πως $\exists v \in \mathbb{R}^n$ τεοιο ώστε να ισχύει πως $v^T \nabla^2 f(x_*) v < 0$. Εφόσον η f είναι επαρκώς λεία, ισχύει πως $\nabla^2 f$ είναι συνεχής και άρα επιλέγοντας $||x - x_*||$ αρκετά μικρό ισχύει πως $\frac{1}{2}v^T \nabla^2 f(\xi) v < 0$ το οποίο οδηγεί σε άτοπο. Συμπεραίνουμε πως $p^T \nabla^2 f(x_*) p \geq 0$ για κάθε $p \in \mathbb{R}^n$. Έχουμε λοιπόν την *αναγκαία συνθήκη δευτέρου βαθμού* που λέει πως εάν το x_* είναι τοπικό ελάχιστο, τότε ο πίνακας $\nabla^2 f(x_*)$ είναι ημιθετικά ορισμένος. Αντίστοιχα, εάν το x_* είναι τοπικό μέγιστο τότε ο πίνακας $-\nabla^2 f(x_*)$ είναι ημιθετικά ορισμένος.

Επεκτείνοντας λίγο το παραπάνω επιχείρημα, αποδεικνύεται πως ένα σημείο είναι αυστηρό τοπικό ελάχιστο/μέγιστο εάν και μόνο εάν ισχύει η αναγκαία συνθήκη πρώτου βαθμού και ο πίνακας $\nabla^2 f(x_*) / - \nabla^2 f(x_*)$ είναι γνήσια θετικός. Σημειώνουμε, πως εάν ο πίνακας $\nabla^2 f(x_*) / - \nabla^2 f(x_*)$ είναι γνήσια θετικός τότε είναι και ημιθετικά ορισμένος. Εάν για ένα δεδομένο σημείο μπορούμε να ελέγξουμε αυτές τις συνθήκες τότε μπορούμε να ελέγξουμε και εάν το δεδομένο σημείο είναι τοπικό βέλτιστο. Για να επιτύχουμε μία υλοποίηση που ελέγχει αυτές τις συνθήκες σε έναν υπολογιστή πρέπει να τις προσαρμώσουμε λίγο στα πιθανά αριθμητικά σφάλματα λόγο προσεγγίσεων.

Στη συνέχεια εξετάζουμε κάποιες από τις πλέον διαδεδομένες μεθόδους για τον υπολογισμό τοπικών βέλτιστων.

4.2 Μέθοδοι

4.2.1 Μέθοδος Newton για Βελτιστοποίηση

Όπως είδαμε ένα τοπικό βέλτιστο θα ικανοποιεί πάντα την αναγκαία συνθήκη πρώτου βαθμού. Έτσι, ένας τρόπος να προσεγγίσουμε μία βέλτιστη τιμή είναι να ψάξουμε για σημεία x που ικανοποιούν

$$\nabla f(x) = 0$$

Ένας τρόπος να λύσουμε αυτό το πρόβλημα είναι μέσω της εφαρμογής της μεθόδου *Newton* στην συνάρτηση $\nabla f(x)$. Η ενημέρωση της λύσης σε κάθε βήμα παίρνει τη μορφή

$$x_{k+1} = x_k - [\nabla^2 f(x_k)]^{-1} \nabla f(x_k)$$

ή

$$x_{k+1} = x_k + p_k$$

οπού το p_k είναι η λύση του γραμμικού συστήματος

$$\nabla^2 f(x_k) p_k = -\nabla f(x_k)$$

Στην πράξη το p_k υπολογίζεται λύνοντας το παραπάνω γραμμικό σύστημα και όχι αντιστρέφοντας την εσσιανή της f.

Είναι δυνατό να σκεφτούμε τη μέθοδο *Newton* απευθείας σαν μία μέθοδο βελτιστοποίησης ως εξής. Η γραμμική προσέγγιση της $\nabla f(x)$ γύρω από το x_k είναι $\nabla f(x_k + p) \approx \nabla f(x_k) + \nabla^2 f(x_k) p$. Επίσης, μπορούμε να γράψουμε $f(x_k + p) \approx q_k(p) = f(x_k) + \nabla f(x_k)^T p + \frac{1}{2} p^T \nabla^2 f(x_k) p$. Παρατηρούμε πως η γραμμική προσέγγιση της παραγώγου $\nabla f(x_k + p)$, είναι η παράγωγος της $q_k(p)$ ως προς p. Επομένως, η αναζήτηση σταθερου σημείου της συνάρτησης f από τη μέθοδο *Newton* εφαρμοσμένη στην $\nabla f(x)$ είναι μία μέθοδος κατά την οποία προσεγγίζουμε την f με ένα πολυώνυμο δευτέρου βαθμού $q_k(p)$ γύρω από το x_k και στη συνέχεια βρίσκουμε το βέλτιστο αυτού του πολυωνύμου και το χρησιμοποιούμε για x_{k+1}.

Στην πράξη σπάνια χρησιμοποιείται η μέθοδος *Newton* για βελτιστοποίηση στην απλή της μορφή που μόλις περιγράψαμε. Συνήθως γίνονται κάποιες μετατροπές έτσι ώστε να υπάρχει εγγύηση για τη σύγκλιση της μεθόδου ή να έχει μειωμένο κόστος. Επίσης, στην μορφή που την περιγράψαμε παραπάνω η μέθοδος δεν ξεχωρίζει μεταξύ τοπικών ελάχιστων, μέγιστων και σαγματικών σημείων. Μία απλή μετατροπή της μεθόδου (για προβλήματα ελαχιστοποίησης) θα ήταν να εισάγουμε ένα συντελεστή a_k στον τύπο ενημέρωσης της λύσης $x_{k+1} = x_k + a_k p_k$, έτσι ώστε $f(x_{k+1}) \leq f(x_k)$.

Το κόστος της μεθόδου *Newton* αναλύεται σε: υπολογισμό παραγώγων, επίλυση γραμμικού συστήματος και αποθήκευση μητρώων. Για ένα πρόβλημα n μεταβλητών η πολυπλοκότητα υπολογισμού της εσσιανής της f είναι $\mathcal{O}(n^2)$ δεδομένου πως ο προγραμματιστής έχει υπολογίσει αναλυτικά όλες τις δεύτερες παραγώγους. Η λύση του γραμμικού συστήματος που ακολουθεί έχει πολυπλοκότητα $\mathcal{O}(n^3)$ και η απαιτούμενη μνήμη είναι της τάξης $\mathcal{O}(n^2)$. Παρά το κόστος της, το οποίο για αρκετα μεγάλα n μπορεί να απαγορεύει τη χρήση της, η μέθοδος *Newton* έχει καλή σύγκλιση για ένα μεγάλο εύρος συναρτήσεων. Αυτό συνοψίζεται στο παρακάτω θεώρημα.

Θεώρημα (Σύγκλιση μεθόδου *Newton* για προβλήματα βελτιστοποίησης)

Έστω $f : S \to \mathbb{R}$ επαρκώς λεία, όπου $S \subseteq \mathbb{R}^n$ ανοικτό κυρτό σύνολο και πως η $\nabla^2 f$ είναι *Lipschitz*, δηλαδή

$$||\nabla^2 f(x) - \nabla^2 f(y)|| \leq L||x - y||$$

για κάθε $x, y \in S$ και $L < \infty$. Έστω επίσης πως το x_* είναι ελάχιστο της f στο S και ο πίνακας $\nabla^2 f(x_*)$ είναι γνήσια θετικός. Εάν $\{x_k\}$ είναι η ακολουθία που προκύπτει από την μέθοδο *Newton* και x_0 είναι το αρχικό σημείο της ακολουθίας τότε εάν $||x_0 - x_*||$ είναι αρκετά μικρό η ακολουθία συγκλίνει με τετραγωνικό ρυθμό στο x_*.

Λόγο της καλής της σύγκλισης για τα περισσότερα προβλήματα που μας ενδιαφέρουν, η μέθοδος *Newton* θεωρείτε μία 'ιδανική' μέθοδος για την επίλυση τους. Αυτό ενισχύεται επίσης από το ακόλουθω θεώρημα. Λόγο όμως του υψηλού κόστους της δεν είναι τόσο πρακτική. Για προβλήματα που έχουν αραιούς εσσιανούς πίνακες η απαιτούμενη μνήμη αλλά και το κόστος επίλυσης των γραμμικών συστημάτων της μεθόδου *Newton* είναι πολύ μειωμένο και έτσι μπορεί να χρησιμοποιηθεί. Για γενικά προβλήματα, η καλύτερη προσέγγιση είναι η κατάλληλη τροποποίηση της μεθόδου έτσι ώστε να έχει όσα περισσότερα από τα καλά της στοιχία, αλλά όσο δυνατόν μειωμένο κόστος.

Θεώρημα (Υπεργραμμική Σύγκλιση)

Έστω $f : S \to \mathbb{R}$ επαρκώς λεία, όπου $S \subseteq \mathbb{R}^n$ ανοικτό κυρτό σύνολο και πως η $\nabla^2 f$ είναι *Lipschitz*.

Έστω η ακολουθία $x_* \notin \{x_k\} \subset S$ που γεννάται αναδρομικά από τον κανόνα $x_{k+1} = x_k + p_k$ και πως $\lim_{k\to\infty} x_k = x_*$, όπου x_* το βέλτιστο της f στο S. Επιπλέον, έστω $\nabla f^2(x_*)$ γνήσια θετικός.

Τότε, η ακολουθία $\{x_k\}$ συγκλίνει υπεργραμμικά στο x_* και $\nabla f(x_*) = 0$ εάν και μόνο εάν

$$\lim_{k\to\infty} \frac{||p_k - (p_N)_k||}{||p_k||} = 0$$

όπου $(p_N)_k$ είναι η κατεύθυνση που προκύπτει από τη μέθοδο *Newton* στο x_k.

Χωντρικά, εάν ένας αλγόριθμος συγκλίνει στη λύση με υπεργραμμικό ρυθμό σύγκλισης, τότε μετά από αρκετά βήματα οι ενημερώσεις του θα είναι ίδιες με τις ενημερώσεις του αλγορίθμου *Newton*.

4.2.2 Εγγύηση Κατάβασης

Θέλουμε να ορίσουμε έναν γενικό επαναληπτικό αλγόριθμο για την εύρεση τοπικών ελάχιστων με τη μορφή $x_{k+1} = x_k + a_k p_k$, έτσι ώστε $f(x_{k+1}) < f(x_k)$ και $a_k > 0$. Αυτό θα ήταν επιθυμητό γιατί θα μας επέτρεπε να βελτιώνουμε την προσεγγιστική μας λύση για όσο έτρεχε ο αλγόριθμος. Για να επιτύχουμε το παραπάνω πρέπει να επιλέγουμε τα p_k έτσι ώστε $p_k^T \nabla f(x_k) < 0$, δηλαδή το p_k να είναι κατεύθυνση κατάβασης στο x_k.

Για τη μέθοδο *Newton* έχουμε $p_k = -[\nabla^2 f(x_k)]^{-1} \nabla f(x_k)$. Για να ισχύουν τα παραπάνω πρέπει να έχουμε $\nabla f^T(x_k)[\nabla^2 f(x_k)]^{-1} \nabla f(x_k) > 0$. Αυτό ισχύει για παράδειγμα όταν το $[\nabla^2 f(x_k)]^{-1}$ είναι γνήσια θετικό. Ωστόσο, είναι ξεκάθαρο πως το να είναι το $[\nabla^2 f(x_k)]^{-1}$ γνήσια θετικό είναι ισχυρότερη συνθήκη από το $p_k^T \nabla f(x_k) < 0$. Όταν λοιπόν δεν είναι το $[\nabla^2 f(x_k)]^{-1}$ γνήσια θετικό, μία μέθοδος για να επιτύχουμε την κατάβαση θα ήταν να βρούμε έναν γνήσια θετικό πίνακα M και να θέσουμε $p_k = M \nabla f(x_k)$. Με αυτόν τον τρόπο θα ισχύει πως $p_k^T \nabla f(x_k) < 0$. Στα περισσότερα προβλήματα, για σημεία αρκετά κοντά στη λύση η εσσίανη θα είναι γνήσια θετική (θα είναι σίγουρα ημιθετικά ορισμένη) οπότε αυτό το κόλπο θα χρειάζεται να το χρησιμοποιούμε μόνο μακρύα από τη λύση. Επιπλέον, μπορούμε να βρούμε έναν στενά συνδεδεμένο με την εσσιανή θετικά ορισμένο πίνακα, τον οποίον μπορούμε να υπολογίσουμε με σχεδόν το ίδιο κόστος που θα χρειαζόμασταν για να υπολογίσουμε και την εσσιανή. Αυτό φαίνεται παρακάτω.

Εάν το $\nabla^2 f(x_k)$ είναι γνήσια θετικό τότε μπορούμε να το παραγοντοποιήσουμε ως $\nabla^2 f(x_k) = LDL^T$ οπού το L είναι κάτω τριγωνικός πίνακας και το D είναι διαγώνιος πίνακας με θετικές εγγραφές (η παραγοντοποίηση αυτή σχετίζεται με την παραγοντοποίηση $Cholesky$). Εάν δεν είναι γνήσια θετικό το $\nabla^2 f(x_k)$, τότε στην αντίστοιχη παραγοντοποίηση το D θα έχει κάποιες μη θετικές τιμές τις οποίες μπορούμε να αντικαταστήσουμε με κάποια μικρή θετική τιμή ή την απόλυτη τιμή τους. Ο πίνακας D^* που προκύπτει έτσι έχει όλες τις εγγραφές του θετικές και ο πίνακας $M = LD^*L^T$ είναι γνήσια θετικός. Για να λύσουμε το γραμμικό σύστημα στη μέθοδο $Newton$ βρίσκουμε έτσι και αλλιώς την παραγοντοποίηση LDL^T όποτε ο υπολογισμός του M γίνεται με μικρό παραπάνω κόστος. Αποδεικνύεται πως υπάρχει ένας διαγώνιος πίνακας E, έτσι ώστε $\nabla^2 f(x_k) + E = M$.

Παρακάτω έχουμε την περιγραφή ενός γενικού αλγορίθμου που εφαρμόζει την παραπάνω μέθοδο. Αυτός ο αλγόριθμος είναι η βάση πολλών μεθόδων τις οποίες λέμε *βασισμένες στη μέθοδο Newton* και δύο σημαντικά παραδείγματα των οποίων θα δούμε στη συνέχεια.

Αλγόριθμος (Αναζήτηση σε ευθεία)

1. Επιλέγουμε μία αρχική λύση x_0 και ένα κατώφλι ανοχής ϵ

2. Για $k = 1, 2, ...$:

   (i) Εάν $||\nabla f(x_k)|| < \epsilon$ τερμάτισε και επέστρεψε x_k.

   (ii) Υπολογίζουμε $M = \nabla^2 f(x_k) + E = LDL^T$ έτσι ώστε M γνήσια θετικός και λύνουμε το σύστημα $(LDL^T)p_k = -\nabla f(x_k)$

   (iii) Τέλος, επιλέγουμε το a_k έτσι ώστε να είναι βέλτιστο το βήμα $x_{k+1} = x_k + a_k p_k$

Στον παραπάνω αλγόριθμο δεν διευκρινίσαμε πως επιλέγεται το E το οποίο μπορεί να είναι και 0 όταν η εσσίανη είναι γνήσια θετική. Αυτό μπορεί να γίνει με πολλούς τρόπους αρκεί να ικανοποιούνται κάποιες προυποθέσεις που θα δούμε παρακάτω. Διαφορετικές επιλογές για το M δίνουν διαφορετικούς αλγορίθμους εκ των οποίων κάποιοι μπορεί να είναι πιο κατάλληλοι για κάποια προβλήματα και άλλοι για άλλα.

Ο αλγόριθμος λέγεται αλγόριθμος αναζήτησης σε ευθεία γιατί αφού επιλέξει την κατεύθυνση κατάβασης, ψάχνει στην ευθεία με αυτή την κατεύθυνση για την καλύτερη λύση επάνω της (μέσω του a_k). Στην πράξη έχει μεγάλο κόστος η εύρεση του a_k που ελαχιστοποιεί την αντικειμενική συνάρτηση σε κάθε βήμα και για αυτό θέλουμε να την αποφύγουμε. Για να το επιτύχουμε αυτό, θέλουμε να περιγράψουμε κάποιες απλές συνθήκες πάνω στα a_k και p_k που θα μας εγγυώνται τη σύγκλιση του αλγορίθμου σε τοπικό ελάχιστο. Έτσι αρκεί να διαλέγουμε τα p_k και a_k για να ικανοποιούν αυτές τις απλές συνθήκες.

Όπως έχουμε ήδη συζητήσει το p_k πρέπει σε κάθε βήμα να είναι κατεύθυνση κατάβασης. Έτσι, κάτω από την προυπόθεση πως $a_k > 0$, πρέπει να έχουμε πως $p_k^T \nabla f(x_k) < 0$. Ωστόσο, αυτό πρακτικά δεν αρκεί καθώς μπορεί η κατεύθυνση p_k να είναι αυθαίρετα κοντά στο να είναι κάθετη στη $\nabla f(x_k)$ στην οποία περίπτωση η τιμή της f αλλάζει πάρα πολύ αργά προς την p_k. Έτσι απαιτούμε πως

$$-\frac{p_k^T \nabla f(x_k)}{||p_k||\ ||\nabla f(x_k)||} \geq \epsilon > 0$$

για κάποιο κατόφλι ϵ. Αυτή η συνθήκη λέγεται *συνθήκη γωνίας* καθώς αφορά τη γωνία θ ανάμεσα σε p_k^T και $\nabla f(x_k)$ (το αριστερό κομμάτι της παραπάνω ανισώτητας ισούται με $\cos(\theta)$).

Μία δεύτερη συνθήκη για την κατεύθυνση p_k είναι το να είναι *σχετική με την κλίση.*

Αυτό σημαίνει πως για κάποιο $m > 0$ έχουμε

$$\forall k,\ ||p_k|| \geq m||\nabla f(x_k)||$$

αυτό μας λέει πως δεν επιτρέπουμε στην p_k να είναι αυθαίρετα μικρότερη από την κλίση στο x_k. Αυτή η συνθήκη απαγορεύει στον αλγόριθμο να 'παγώσει' μακρυά από κάποιο σημείο που ικανοποιεί την αναγκαία συνθήκη πρώτου βαθμού. Έτσι, μας εγγυάται πως ο αλγόριθμος θα συνεχίσει να ψάχνει μέχρι να βρεί κάποιο τοπικό βέλτιστο ή κάποιο σαγματικό σημείο.

Όσον αφορά τον συντελεστή a_k η πρώτη συνθήκη που θέλουμε να ικανοποιεί είναι η συνθήκη *ικανής κατάβασης*. Αυτή περιγράφεται παρακάτω. Η γραμμική προσέγγιση της συνάρτησης στο βήμα k είναι

$$f(x_k + a_k p_k) \approx f(x_k) + a_k p_k^T \nabla f(x_k)$$

τότε η γραμμική προσέγγιση της f προβλέπει πως η συνάρτηση θα μεταβληθεί κατά

$$f(x_{k+1}) - f(x_k) \approx a_k p_k^T \nabla f(x_k)$$

η συνθήκη ικανής κατάβασης λεεί πως το a_k πρέπει να επιλέγεται έτσι ώστε η μεταβολή της αντικειμενικής συνάρτησης που επιτυγχάνεται να ικανοποιεί

$$||f(x_{k+1}) - f(x_k)|| \geq \mu a_k ||p_k^T \nabla f(x_k)||$$

όπου $0 < \mu < 1$. Αν το a_k είναι μικρό, τότε η γραμμική προσέγγιση της συνάρτησης είναι καλή και η συνθήκη ικανοποιείται. Εάν το a_k είναι μεγάλο τότε η γραμμική προσέγγιση μπορεί να είναι πολύ κακή και η συνθήκη παραβιάζεται. Εάν μία συνάρτηση είναι 'αρκετά' μη γραμμική τότε το να παίρνουμε μεγάλα βήματα σε κάθε επανάληψη είναι ριψοκίνδυνο καθώς μπορεί να καταλήξουμε να αυξήσουμε την αντικειμενική συνάρτηση. Η ικανή συνθήκη κατάβασης εξασφαλίζει πως σε αυτή την περίπτωση θα παίρνουμε μικρά βήματα, αφού για μεγαλύτερα βήματα η συνθήκη θα παραβιάζεται (αφού η συνάρτηση δεν θα προσεγγίζεται καλά γραμμικά). Αντίστοιχα, για 'αρκετά' γραμμικές συναρτήσεις θα μας επιτρέπει να παίρνουμε μεγαλύτερα βήματα και άρα να συγκλίνουμε γρηγορότερα.

Για να εξασφαλίσουμε πως δεν θα επιλέξουμε το a_k να είναι πολύ μικρό, επιλέγουμε το πρώτο στοιχείο της λίστας $\{1, \frac{1}{2}, \frac{1}{3}, ...\}$ που ικανοποιεί την ικανή συνθήκη κατάβασης. Αποδεικνύεται, σε μορφή θεωρήματος, πως με αυτό τον κανόνα επιλογής του a_k και με τις παραπάνω συνθήκες στα p_k ο αλγόριθμος συγκλίνει σε σημείο που ικανοποίει την αναγκαία συνθήκη πρώτου βαθμού πάντα, εάν η ∇f είναι *Lipschitz* και το αρχικό σημείο x_0 επιλέγεται ώστε το $\{x : f(x) \leq f(x_0)\}$ να είναι φραγμένο.

4.2.3 Πιο Απότομη Κατάβαση

Είναι χρήσιμο πριν συνεχίσουμε να έχουμε στο μυαλό μας πως για αλγορίθμους εύρεσης τοπικών ελαχίστων, υπάρχει μία ανταλλαγή ανάμεσα στο κόστος άνα επανάλληψη και στον αριθμό επαναλήψεων. Για παράδειγμα η μέθοδος *Newton* έχει πολύ υψηλό κόστος ανά επανάληψη αλλά συγκλίνει ταχύτατα. Σε αυτή την ενότητα θα εξετάσουμε μία άλλη μέθοδο της οποίας το κόστος ανά επανάληψη είναι χαμηλό αλλά μπορεί να χρειάζεται πολλές επαναλήψεις για να συγκλίνει.

Η μέθοδος *πιο απότομης κατάβασης* που θα συζητήσουμε στη συνέχεια είναι μία μετατροπή της μεθόδου *Newton* κατα την οποία προσεγγίζουμε την εσσιανή της συνάρτησης με τον μοναδιαίο πίνακα. Αυτό σημαίνει πως η κατεύθηνση p_k ικανοποιεί

$$p_k = -\nabla f(x_k)$$

Στη συνέχεια εκτελούμε αναζήτηση σε ευθεία για να πάρουμε $x_{k+1} = x_k + a_k p_k$. Σημειώνουμε πως αυτός ο αλγόριθμος πέφτει στα πλαίσια του αλγορίθμου αναζήτησης σε ευθεία που συζητήσαμε παραπάνω αφού ο μοναδιαίος πίνακας είναι θετικά ορισμένος. Ένας αλλός τρόπος να αιτιολογήσουμε αυτή την επιλογή κατεύθυνσης, είναι ο εξής.

Εάν προσεγγίσουμε την συνάρτηση γραμμικά, $f(x_k + \epsilon\hat{p}) \approx f(x_k) + \epsilon\hat{p}^T\nabla f(x_k)$, τότε το διάνυσμα μοναδιαίου μήκους $\hat{p}$ που ελαχιστοποιεί την συνάρτηση είναι το

$$\hat{p} = -\frac{\nabla f(x_k)}{||\nabla f(x_k)||}$$

Για αυτό το λόγο παίρνει και το όνομά της η μέθοδος. Σε κάθε σημείο επιλέγει την κατεύθηνση που για αρκετά μικρό μήκος βήματος ϵ ελαχιστοποιεί την τιμή της συνάρτησης στο επόμενο βήμα.

Είναι προφανές πως η παραπάνω επιλογή κατεύθυνσης ικανοποιεί και την συνθήκη γωνίας, αλλά και την συνθήκη σχέσης με την κλίση που περιγράψαμε παραπάνω. Αυτό σημαίνει πως για κατάλληλη επιλογή βήματος, *Lipschitz* συναρτήσεις και καλό αρχικό σημείο, η μέθοδος θα συγκλίνει. Ωστόσο, αποδεικνύεται πως η μέθοδος μπορεί να εγγυηθεί μόνο γραμμική σύγκλιση.

4.2.4 Μέθοδος Ψευδό-*Newton*

Η μέθοδος ψευδό-*Newton* είναι από τις σημαντικότερες μεθόδους εύρεσης τοπικών ελαχίστων, ιδιαίτερα για προβλήματα με μικρό-μεσαίο πλήθος μεταβλητών (για τα οποία μπορούμε να αποθηκεύσουμε πίνακες). Ωστόσο, ακόμα και για προβλήματα με μεγάλο πλήθος μεταβλητών υπάρχουν μέθοδοι *ψευδό-Newton με περιορισμένη μνήμη* οι οποίες είναι διαδεδομένες αλλά της οποίες δεν συζητήθηκαν στα πλαίσια του μαθήματος.

Η βασική ιδέα της ψευδό-*Newton* είναι να προσεγγίζει σε κάθε βήμα την εσσιανή της συνάρτησης στο τρέχον σημείο με έναν γνήσια θετικό πίνακα B_k και να λύνει το πρόβλημα ελαχιστοποίησης της

$$q(p) = f(x_k) + \nabla f(x_k)^T p + \frac{1}{2} p^T B_k p$$

Όπως έχουμε προαναφέρει, το $q(p)$ είναι τετραγωνική προσέγγιση της συνάρτησης f (όταν το $B_k \approx \nabla^2 f(x_k)$) στο $x_k + p$. Έτσι η μέθοδος ψευδό-$Newton$ λειτουργεί παρόμοια με την $Newton$: προσεγγίζει σε κάθε βήμα τοπικά την συνάρτηση τετραγωνικά και ελαχιστοποιεί την προσέγγιση. Υπάρχουν πολλές εκδοχές αυτού του αλγορίθμου που εξαρτώνται από την μέθοδο επιλογής του B_k. Αποδεικνύεται πως αν και η μέθοδος δεν συγκλίνει όσο γρήγορα όσο η μέθοδος $Newton$, μπορεί να συγκλίνει υπεργραμμικά. Επίσης, η πολυπλοκότητα είναι αρκετά καλύτερη από αυτή της $Newton$. Για να εκτιμήσουμε το $\nabla^2 f(x_k)$ χρειαζόμαστε μόνο πληροφορία για την πρώτη παράγωγο και η επίλυση του συστήματος για την έυρεση της κατεύθυνσης επιτυγχάνεται με πολυπλοκότητα $\mathcal{O}(n^2)$.

Μία εκδοχή της ψευδό-$Newton$ είναι η μέθοδος *τέμνουσας*. Αυτή προσεγγίζει την δεύτερη παράγωγο σύμφωνα με τον τύπο

$$\nabla^2 f(x_k)(x_k - x_{k-1}) \approx \nabla f(x_k) - \nabla f(x_{k-1})$$

όταν το x_k είναι κοντά στο x_{k-1} αυτή η προσέγγιση είναι καλή (εξ ορισμού). Για συναρτήσεις μίας μεταβλητής, η μέθοδος τέμνουσας μας δίνει τον επαναλληπτικό τύπο

$$x_{k+1} = x_k - \frac{x_k - x_{k-1}}{f'(x_k) - f'(x_{k-1})} f'(x_k)$$

Ένας πίνακας B_k που ικανοποιεί

$$B_k(x_k - x_{k-1}) = \nabla f(x_k) - \nabla f(x_{k-1})$$

λέμε πως ικανοποιεί τη *συνθήκη τέμνουσας*. Αυτή η συνθήκη από μόνη της δεν προσδιορίζει τον πίνακα B_k μοναδικά (εκτός αν έχουμε το μονοδιάστατο πρόβλημα.

Για απλότητα, έστω $y_k = \nabla f(x_{k+1}) - \nabla f(x_k)$ και $\delta x_k = x_{k+1} - x_k$. Έτσι η συνθήκη τέμνουσας γράφεται

$$B_{k+1}\delta x_k = y_k$$

Ένας απλός τρόπος να ορίσουμε τα B_k έτσι ώστε να ικανοποιεί την συνθήκη τέμνουσας για κάθε $k \geq 1$, είναι μέσω του παρκάτω επαναληπτικού τύπου. Ξεκινώντας από έναν οποιονδήποτε πίνακα B_0,

$$B_{k+1} = B_k + \frac{(y_k - B_k\delta x_k)(y_k - B_k\delta x_k)^T}{(y_k - B_k\delta x_k)^T\delta x_k}$$

Για κάθε $k \geq 1$ ο πίνακας B_k ικανοποιεί τη συνθήκη τέμνουσας και έτσι μπορεί να δικαιολογηθεί σαν προσέγγιση της εσσιανής στο βήμα $k+1$. Για τον αρχικό πίνακα B_0 μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε οποιονδήποτε πίνακα θέλουμε και συχνά χρησιμοποιούμε τον μοναδιαίο πίνακα. Ωστόσο, εάν μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε μία καλύτερη προσέγγιση της εσσιανής στο x_0 με μικρό κόστος, αυτό μπορεί να οφελήσει.

Το υπολογιστικό κόστος για τον υπολογισμό του B_{k+1} είναι $\mathcal{O}(n^2)$ και η εύρεση της κατεύθυνσης από το B_{k+1} επιτυγχάνεται επίσης σε $\mathcal{O}(n^2)$ (κανονικά για την επίλυση γραμμικού συστήματος χρειαζόμαστε $\mathcal{O}(n^3)$). Ο λόγος που η εύρεση κατεύθυνσης έχει μικρότερο κόστος για αυτή τη μέθοδο είναι πως μπορούμε να βρούμε τύπους για να ενημερώνουμε την παραγωντοποίηση *Cholesky* του B_k αντί για το ίδιο το B_k και έτσι να λύνουμε το γραμμικό σύστημα με οπισθόδρομη αντικατάσταση.

Γενικά για όλες τις μεθόδους ψεύδο-*Newton* είναι επιθυμητό να έχουμε κάποιον αναδρομικό τύπο ενημέρωσης των B_k.

Chapter 5

Μη-Γραμμικός Προγραμματισμός

Σε αυτό το κεφάλαιο θα συζητήσουμε μη γραμμικά προβλήματα βελτιστοποίησης με περιορισμούς, δηλαδή προβλήματα με γενική μορφή

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) \\ s.t. \quad & g_i(x) = 0, \quad i \in \mathcal{E} \\ & g_j(x) \geq 0, \quad j \in \mathcal{I} \end{aligned}$$

όπου τα g_i & g_j και η f είναι επαρκώς λεία. Όπως και στην βελτιστοποίηση χωρίς περιορισμούς η εύρεση ολικών βέλτιστων είναι πολύ δύσκολο πρόβλημα και για αυτό το λόγο εξετάζουμε την εύρεση τοπικών ελαχίστων. Η ανάλυση μας σε αυτό το κεφάλαιο βασίζεται στον διαμερισμό των προβλημάτων σε:

1. Προβλήματα με γραμμικούς ισωτικούς περιορισμούς
2. Προβλήματα με γραμμικούς ανισωτικούς περιορισμούς
3. Προβλήματα με μη-γραμμικούς ισωτικούς περιορισμούς
4. Προβλήματα με μη-γραμμικούς ανισωτικούς περιορισμούς

5.1 Συνθήκες Βελτιστότητας για Γραμμικούς Περιορισμούς

5.1.1 Ισωτικοί Περιορισμοί

Ξεκινάμε τη συζήτηση μας με προβλήματα της μορφής

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) \\ s.t. \quad & Ax = b \end{aligned}$$

Η κεντρική ιδέα στην ανάλυσή μας, είναι η επαναγραφή του προβλήματος σαν ένα πρόβλημα χωρίς περιορισμούς. Εάν επιτύχουμε σε αυτή την επανεγγραφή, έχουμε αυτόματα αναγκαίες και ικανές συνθήκες για την τοπική βελτιστότητα μιας υποψήφιας λύσης και μεθόδους για την εύρεση τοπικών βέλτιστων. Για προβλήματα με περιορισμούς $Ax = b$, δεδομένου ενός εφικτού σημείου $\bar{x}$, μπορούμε να γράψουμε οποιοδήποτε άλλο εφικτό σημείο σαν $x = \bar{x} + p$ όπου p μία εφικτή κατεύθυνση.

Οι εφικτές κατευθύνσεις για προβλήματα με ισωτικούς περιορισμούς $Ax = b$, είναι τα διανύσματα στο μηδενικό χώρο του A. Εάν Z είναι ένας $n \times m$ πίνακας με στήλες που αποτελούν βάση του μηδενικού χώρου του A, τότε κάθε εφικτό σημείο είναι της μορφής

$$x = \bar{x} + Zv$$

όπου το $v \in \mathbb{R}^m$. Έτσι, για δεδομένο εφικτό σημείο $\bar{x}$ το πρόβλημα βελτιστοποίησης είναι ισοδύναμο με το πρόβλημα

$$\min_v \quad \phi(v) = f(\bar{x} + Zv)$$

που είναι πρόβλημα βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς. Λέμε την ϕ που κατασκευάσαμε παραπάνω *μειωμένη αντικειμενική συνάρτηση*. Έχουμε από τον κανόνα αλυσίδας

$$\nabla\phi(v) = Z^T \nabla f(x) \;\&\; \nabla\phi(v) = Z^T \nabla^2 f(x) Z$$

τα οποία λέμε αντίστοιχα *μειωμένη κλίση* και *μειωμένη εσσιανή*. Αυτές οι ποσότητες μας δίνουν την κλίση και την εσσιανή του περιορισμού της f στο εφικτό σύνολο. Είναι σαφές πως υπάρχει ένα-προς-ένα αντιστοιχία μεταξύ των τοπικών βέλτιστων x_* και v_* και από την προηγούμενη ενότητα έχουμε συνθήκες τοπικής βελτιστότητας.

Μεταφράζοντας τις συνθήκες της προηγούμενης ενότητας στο συγκεκριμένο πρόβλημα, έχουμε πως ένα σημείο x_* είναι τοπικό ελάχιστο εάν και μόνο εάν

Αναγκαίες και ικανές συνθήκες βελτιστότητας για γραμμικούς ισωτικούς περιορισμούς:

1. Το x_* είναι εφικτό σημείο
2. $Z^T \nabla f(x_*) = 0$
3. Το $Z^T \nabla^2 f(x_*) Z$ είναι γνήσια θετικό

Επιπλέον, μπορούμε να αναπτύξουμε την κλίση της f ως

$$\nabla f(x_*) = Z y_* + A^T \lambda_*$$

αφού οι στήλες του Z και του A^T μαζί, είναι βάση του $\mathbb{R}^n$. Από τη δεύτερη συνθήκη βελιστότητας και το παραπάνω ανάπτυγμα προκύπτει πως $Z^T Z y_* = 0$. Άρα $y_*^T Z^T Z y_* = ||Z y_*||^2 = 0$, δηλαδή $Z y_* = 0$. Έτσι, έχουμε πως

$$\nabla f(x_*) = A^T \lambda_*$$

που σημαίνει πως η παράγωγος της αντικειμενικής συνάρτησης σε σταθερό σημείο είναι ένας γραμμικός συνδυασμός των κλίσεων των περιορισμών. Οι συντελεστές λ_* λέγονται πολλαπλασιαστές *Lagrange*.

Ένας διαφορετικός τρόπος να γράψουμε το πρόβλημα χωρίς περιορισμούς είναι μέσω της συνάρτησης *Lagrange* που δίνεται από

$$\mathcal{L}(x, \lambda) = f(x) - \lambda^T(Ax - b)$$

έχουμε $\nabla_x \mathcal{L}(x, \lambda) = \nabla f(x) - \lambda^T A$ και $\nabla_\lambda \mathcal{L}(x, \lambda) = Ax - b$. Έτσι, τα τοπικά βέλτιστα είναι σταθερά σημεία της συνάρτησης *Lagrange*.

5.1.2 Ανισωτικοί Περιορισμοί

Στρέφουμε τώρα την προσοχή μας σε προβλήματα με ανισωτικούς γραμμικούς περιορισμούς της μορφής

$$\begin{array}{ll} \min & f(x) \\ s.t. & Ax \geq b \end{array}$$

Εάν το x_* είναι εφικτό τοπικό βέλτιστο της f, τότε οι περιορισμοί που δεν είναι ενεργοί στο x_* δεν επηρεαζουν την τοπική βελτιστότητα του x_*. Εάν το σύνολο των ενεργών περιορισμών στο x_* περιγράφεται από $\hat{A}x = \hat{b}$ τότε το x_* είναι τοπικό βέλτιστο του προβλήματος

$$\begin{array}{ll} \min & f(x) \\ s.t. & \hat{A}x = \hat{b} \end{array}$$

Έτσι έχουμε τις συνθήκες που περιγράψαμε στην προηγούμενη ενότητα, συγκεκριμένα $\nabla f(x_*) = \hat{A}^T \hat{\lambda}_*$. Επιπλέον, ισχύει πως $\hat{\lambda}_* \geq 0$. Αυτό γιατί υπάρχει μία εφικτή κατεύθυνση p έτσι ώστε $\hat{A}^T p = e_i$ για κάθε i και άρα έχουμε

$$0 \leq p^T \nabla f(x_*) = p^T \hat{A}^T \hat{\lambda}_* = \hat{\lambda}_{*i}, \ \forall i$$

Μπορούμε να σκεφτόμαστε πως οι πολλαπλασιαστές *Lagrange* των μη-ενεργών περιορισμών είναι απλά μηδέν. Έτσι, σε τοπικό βέλτιστο ισχύει η συνθκήκη *συμπληρωματικής χαλάρωσης* ως

$$\lambda_{*i}(A_i x - b_i) = 0$$

Δηλαδή, σε τοπικά βέλτιστα, ένας περιορισμός είναι είτε ενεργός είτε ο αντίστοιχος πολλαπλασιαστής $Lagrange$ του είναι 0. Συνοψίζουμε τις αναγκαίες συνθήκες βελτιστότητας ενός εφικτού σημείου x_* για προβλήματα με ανισωτικούς περιορισμούς παρακάτω
Αναγκαίες συνθήκες βελτιστότητας για γραμμικούς ανισωτικούς περιορισμούς:

$\exists \lambda_*$ έτσι ώστε

1. $\nabla f(x_*) = A^T \lambda_*$ ή $Z^T \nabla f(x_*) = 0$
2. $\lambda_* \geq 0$ και $\lambda_*^T (Ax - b) = 0$
3. Το $Z^T \nabla^2 f(x_*) Z$ είναι ημι-θετικά ορισμένος

όπου Z είναι ο μηδενικός πίνακας του πίνακα των ενεργών περιορισμών. Οι αντίστοιχες ικανές συνθήκες δίνονται από
Ικανές συνθήκες βελτιστότητας για γραμμικούς ανισωτικούς περιορισμούς:

$\exists \lambda_*$ έτσι ώστε

1. $Ax_* \geq b$
2. $\nabla f(x_*) = A^T \lambda_*$ ή $Z^T \nabla f(x_*) = 0$
3. $\lambda_* \geq 0$ και αυστηρή συμπληρωματική χαλάρωση
4. Το $Z^T \nabla^2 f(x_*) Z$ είναι γνήσια θετικός

Σημειώνουμε πως στην πράξη είναι δύσκολο να βρούμε το σύνολο των ενεργών περιορισμών σε ένα σημείο.

5.2 Συνθήκες Βελτιστότητας για Μη-Γραμμικούς Περιορισμούς

5.2.1 Ισωτικοί Περιορισμοί

Σε αυτή την ενότητα συζητάμε τις αναγκαίες και επαρκείς συνθήκες τοπικής βελτιστότητας για προβλήματα με ισωτικούς μη-γραμμικούς περιορισμούς με μορφή

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) \\ s.t. \quad & g_i(x) = 0, \;\; i \in \mathcal{I} \end{aligned}$$

Για την υπόλοιπη συζήτησή μας θεωρούμε πως το x_* είναι *σύνηθες σημείο*, δηλαδή, πως είναι εφικτό σημείο και τα $\nabla g_i(x_*)$ για κάθε i είναι γραμμικά ανεξάρτητα. Η συνάρτηση *Lagrange* για αυτό το πρόβλημα δίνεται από

$$\mathcal{L}(x, \lambda) = f(x) - \lambda^T g(x)$$

Έστω Z ο μηδενικός πίνακας του $\nabla g(x_*)^T$

Αναγκαίες συνθήκες βελτιστότητας για μη-γραμμικούς ισωτικούς περιορισμούς:

$\exists \lambda_*$ έτσι ώστε

1. $\nabla_x \mathcal{L}(x_*, \lambda_*) = 0$

2. Ο πίνακας $Z^T \nabla^2_{xx} \mathcal{L}(x_*, \lambda_*) Z$ είναι ημι-θετικά ορισμένος

Αναγκαίες συνθήκες βελτιστότητας για μη-γραμμικούς ισωτικούς περιορισμούς:

$\exists \lambda_*$ έτσι ώστε

1. $\nabla_x \mathcal{L}(x_*, \lambda_*) = 0$

2. Ο πίνακας $Z^T \nabla^2_{xx} \mathcal{L}(x_*, \lambda_*) Z$ είναι γνήσια θετικός

Σημειώνουμε πως η συνθήκες δευτέρου βαθμού για μη-γραμμικούς περιορισμούς αφορούν τη συνάρτηση *Lagrange* και όχι την αντικειμενική συνάρτηση (όπως στην περίπτωση γραμμικών περιορισμών). Αυτό γιατί η εσσιανή της συνάρτησης *Lagrange* δεν επηρεάζεται από τους περιορισμούς όταν αυτοί είναι γραμμικοί αφού όλες οι δεύτερες παράγωγοι τους θα είναι 0. Έτσι μπορούμε να σκεφτόμαστε πως οι γενικές συνθήκες αφορούν την συνάρτηση *Lagrange* και πως στην ειδική περίπτωση που έχουμε γραμμικούς περιορισμούς μπορούμε να τους διατυπώσουμε μόνο με την αντικειμενική συνάρτηση.

5.2.2 Ανισωτικοί Περιορισμοί

Μένει να μιλήσουμε για τις αναγκαίες και επαρκείς συνθήκες τοπικής βελτιστότητας σε προβλήματα με ανισωτικούς μη-γραμμικούς περιορισμούς με μορφή

$$\begin{array}{ll} \min & f(x) \\ s.t. & g_i(x) \geq 0, \;\; i \in \mathcal{I} \end{array}$$

Όπως και πριν, θεωρούμε πως το x_* είναι σύνηθες σημείο, που σε αυτή την περίπτωση σημαίνει πως τα $\nabla g_i(x_*)$, για κάθε ενεργό στο x_* περιορισμό, είναι γραμμικά ανεξάρτητα. Οι αναγκαίες συνθήκες τοπικής βελτιστότητας για προβλήματα με την παραπάνω μορφή, λέγονται συνθήκες *Karush-Kuhn-Tucker* ή *KKT*.

Αναγκαίες συνθήκες βελτιστότητας (KKT) για μη-γραμμικούς ανισωτικούς περιορισμούς:

$\exists \lambda_*$ έτσι ώστε

1. $\nabla_x \mathcal{L}(x_*, \lambda_*) = 0$

2. $\lambda_* \geq 0$ και $\lambda_*^T(Ax - b) = 0$

3. Ο πίνακας $Z^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x_*, \lambda_*) Z$ είναι ημι-θετικά ορισμένος

Ικανές συνθήκες βελτιστότητας για μη-γραμμικούς ανισωτικούς περιορισμούς:

$\exists \lambda_*$ έτσι ώστε

1. $\nabla_x \mathcal{L}(x_*, \lambda_*) = 0$

2. $\lambda_* \geq 0$ και $\lambda_*^T(Ax - b) = 0$

3. Ο πίνακας $\hat{Z}^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x_*, \lambda_*) \hat{Z}$ είναι γνήσια θετικός

Οπού $\hat{Z}$ είναι ο μηδενικός πίνακας του $\hat{A}$ (των ενεργών περιορισμών).

5.3 Δυικότητα - Παίγνια

Όπως είδαμε και σε προηγούμενο κεφάλαιο μπορούμε να ορίσουμε ένα δυικό πρόβλημα για κάθε γραμμικό πρόγραμμα, στο οποίο έχουμε μία μεταβλητή για κάθε περιορισμό και έναν περιορισμό για κάθε μεταβλητή. Μας ενδιαφέρει να κάνουμε κάτι αντίστοιχο και στον μη-γραμμικό προγραμμάτισμο. Συγκεκριμένα, θέλουμε να ορίσουμε ένα δυικό πρόβλημα, όπου οι μεταβλητές είναι οι πολλαπλασιαστές *Lagrange* και η λύση το λ_*, καθώς η αναγκαία συνθήκη πρώτου βαθμού είναι συνάρτηση των x και των λ.

Είναι κλασική προσέγγιση να ορίσουμε το δυικό που περιγράψαμε παραπάνω γράφοντας το πρωτεύον πρόβλημα σαν πρόβλημα min-max και το αντίστοιχο δυικό σαν max-min. Μπορούμε να σκεφτόμαστε αυτή την προσέγγιση σαν ένα μοντέλο των στρατηγικών δύο παικτών που παίζουν ένα παιχνίδι.

Το πρωτεύον πρόβλημα σαν min-max, είναι

$$\min_{x} \max_{\lambda \geq 0} \mathcal{L}(x, \lambda)$$

Η αντικειμενική του συνάρτηση είναι $\mathcal{L}^*(x) = \max_{\lambda \geq 0} \mathcal{L}(x, \lambda)$. Το δυικό του είναι

$$\max_{\lambda \geq 0} \min_{x} \mathcal{L}(x, \lambda)$$

και η αντικειμενική του συνάρτηση είναι $\mathcal{L}_*(\lambda) = \min_{x} \mathcal{L}(x, \lambda)$. Έχουμε αντίστοιχο αποτελέσμα με την ασθενή δυικότητα, που λεεί πως

$$\mathcal{L}^*(x) \geq \mathcal{L}_*(\lambda)$$

Σε ένα παίγνιο με τιμή $\mathcal{L}$, ένα σαγματικό σημείο είναι ένα σημείο (x_*, y_*) στο οποίο ισχύει

$$\mathcal{L}(x_*, y) \leq \mathcal{L}(x_*, y_*) \leq \mathcal{L}(x, y_*)$$

Το αντίστοιχο αποτέλεσμα της ισχυρής δυικόητας είναι πως το

$$\max_{\lambda \geq 0} \min_{x} \mathcal{L}(x, \lambda) = \min_{x} \max_{\lambda \geq 0} \mathcal{L}(x, \lambda)$$

Chapter 6

Συμπληρωματικές Ενότητες

6.1 Μέθοδοι Penalty Barrier

Σε αυτή την ενότητα συζητάμε περιληπτικά της μεθόδους *penalty barrier* για επίλυση μη-γραμμικών προγραμμάτων με περιορισμούς. Η κεντρική ιδέα αυτής της μεθόδου είναι η επίλυση μίας σειράς από προβλήματα χωρίς περιορισμούς των οποίων η λύση στο όριο τείνει στη λύση του αρχικού προβλήματος. Περιγράφουμε σύντομα κάποιες τέτοιες μεθόδους.

Έστω πως προσπαθούμε να λύσουμε το πρόβλημα

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) \\ s.t. \quad & x \in S \end{aligned}$$

Ορίζουμε μία νέα συνάρτηση

$$\sigma(x) = \begin{cases} 0, \ x \notin S \\ +\infty, \ x \in S \end{cases}$$

την οποία σκεφτόμαστε σαν μία άπειρη ποινή για παραβίαση των περιορισμών. Τώρα μετατρέπουμε το πρόβλημα με περιορισμούς σε ένα νέο πρόβλημα

$$\min\ f(x) + \sigma(x) \tag{6.1}$$

χωρίς περιορισμούς. Είναι σαφές πως αυτό το πρόβλημα θα έχει τις ίδιες λύσεις με το αρχικό, αλλά στην πράξη δεν μπορούμε να το λύσουμε, ακόμα και εάν αντικαταστήσουμε το άπειρο με έναν πολύ μεγάλο αριθμό, λόγο των ασυνεχειών της αντικειμενικής συνάρτησης. Έτσι λοιπόν, στις μεθόδους *penalty-barrier* ορίζουμε μία σειρά από προβλήματα χωρίς περιορισμούς, που στο όριο τείνουν στο πρόβλημα (6.1). Η φιλοσοφία είναι παρόμοια με αυτή που περιγράφεται παραπάνω, αλλά φροντίζουμε η συνάρτηση να είναι λεία.

Οι μέθοδοι *φράγματος* (*barrier*) φτιάχνουν μία σειρά από όρους φράγματος που συγκλίνουν στο σ από το εσωτερικό του εφικτού συνόλου και αποτελούν μεθόδους εφικτού σημείου. Οι μέθοδοι ποινής (*penalty*) συγκλίνουν στη λύση από το εξωτερικό του εφικτού συνόλου και επιτρέπουν σε κάποιες επαναλήψεις να έχουν μη εφικτή έξοδο. Γενικά, προτιμάμε της μεθόδους φράγματος όταν μπορούμε να τις χρησιμοποιήσουμε.

Συχνά παραδείγματα από όρους φράγματος είναι

$$\phi(x) = -\sum_{i=1}^{m} \log(g_i(x))$$

και

$$\phi(x) = \sum_{i=1}^{m} \frac{1}{g_i(x)}$$

οι σειρά από προβλήματα βελτιστοποίησης που λύνουμε, έχουν αντικειμενική συνάρτηση

$$b_k = f(x) - \mu_k \phi(x)$$

όπου $\{\mu_k\}$ μία σειρά από μονοτονικά φθήνουσες παραμέτρους. Ο λόγος που λύνουμε μία σειρά από τέτοια προβλήματα αντί για ένα πρόβλημα με μικρή τιμή μ_k είναι ότι το δεύτερο είναι δύσκολο να λυθεί κατευθείαν.

Για μεθόδους εσωτερικού σημείου, συχνά χρησιμοποιούμε επίσης *self-concordant* συναρτήσης σαν όρο φράγματος. Μία $self-concordant$ συνάρτηση f είναι μία συνάρτηση που ικανοποιεί

$$|f'''(x)| \leq 2f''(x)^{\frac{3}{2}}$$

6.2 Semi-Definite Programming (SDP)

Έστω Y ένας $n \times n$ πίνακας με πραγματικές τιμές y_{ij}. Το πρόβλημα βελτισοποίησης μίας γραμμικής συνάρτησης των y_{ij} κάτω από γραμμικούς περιορισμούς και τον επιπλέον περιορισμό πως ο Y είναι ημι-θετικά ορισμένος λέγεται πρόβλημα *semi-definite programming*. Ο SDP είναι φυσική επέκταση του γραμμικού προγραμματισμού και πολλοί αλγόριθμοι εσωτερικού σημείου που χρησιμοποιούνται για την επίλυση γραμμικών προγραμμάτων επεκτείνονται εύκολα σε προβλήματα SDP. Στη συνέχεια ορίζουμε το SDP μαθηματικά. Το εσωτερικό γινόμενο $Frobernius$ ορίζεται από

$$A \cdot B = tr(A^T B) = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} a_{ij} b_{ij}$$

ενώ συμβολίζουμε το ότι ο πίνακας A είναι ημι-θετικά ορισμένος με $A \succeq 0$. Το πρόβλημα SDP γράφεται

$$\begin{aligned} \min \quad & C \cdot Y \\ s.t. \quad & D_i \cdot Y = d_i \ , \quad 1 \leq i \leq k \\ & Y \succeq 0 \end{aligned}$$

Όταν οι πίνακες C, D_i είναι διαγώνιοι, τότε το παραπάνω πρόβλημα γίνεται πρόβλημα γραμμικού προγραμματισμού. Κλείνουμε με το ακόλουθω σημαντικό θεώρημα.

<u>Θεώρημα</u> (Εφικτά Σημεία)

Έστω $\mathcal{S}$ ένα πρόβλημα SDP και $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ένας πίνακας. Μπορούμε σε πολυωνυμικό χρόνο να αποφασίσουμε εάν το A είναι εφικτό σημείο για το $\mathcal{S}$ και εάν δεν είναι να βρούμε ένα διαχωριστικό υπερεπίπεδο.

Το SDP έχει χρησιμοποιηθεί για την εύρεση προσεγγιστικού αλγορίθμου για το MAX-CUT πρόβλημα προσεγγιστική τομή 0.87856.

Bibliography

[1] Igor Griva, Stephen G. Nash, Ariela Sofer.*Linear and Nonlinear Optimization*. Society for Industrial and Applied Mathematics, 2009.

[2] Vijay V. Vazirani. *Approximation Algorithms*. Springer, 2001.