ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΠΑΤΡΩΝ
ΣΧΟΛΗ ΘΕΤΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ
ΤΜΗΜΑ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ

ΜΑΝΟΥΣΑΚΗΣ ΓΕΩΡΓΙΟΣ

ΟΙΚΟΓΕΝΕΙΕΣ ΑΛΓΟΡΙΘΜΩΝ
ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗΣ
ΜΗ ΓΡΑΜΜΙΚΩΝ ΣΥΝΑΡΤΗΣΕΩΝ

ΔΙΔΑΚΤΟΡΙΚΗ ΔΙΑΤΡΙΒΗ

Επιβλέπων Καθηγητής: Χ. Μπότσαρης

ΠΑΤΡΑ 2005

**ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΠΑΤΡΩΝ
ΣΧΟΛΗ ΘΕΤΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ
ΤΜΗΜΑ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ**

ΜΑΝΟΥΣΑΚΗΣ ΓΕΩΡΓΙΟΣ

**ΟΙΚΟΓΕΝΕΙΕΣ ΑΛΓΟΡΙΘΜΩΝ
ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗΣ
ΜΗ ΓΡΑΜΜΙΚΩΝ ΣΥΝΑΡΤΗΣΕΩΝ**

ΔΙΔΑΚΤΟΡΙΚΗ ΔΙΑΤΡΙΒΗ

ΠΑΤΡΑ 2005

ΕΥΧΑΡΙΣΤΙΕΣ

Η παρούσα διατριβή δεν θα ήταν δυνατόν να πραγματοποιηθεί χωρίς την αμέριστη συμπαράσταση και βοήθεια του επιβλέποντα καθηγητή μου κ. Χ. Μπότσαρη. Η συμβολή του τόσο στον επιστημονικό όσο και στον ψυχολογικό τομέα υπήρξε ανεκτίμητη.

Σημαντικότατη ήταν και η συμβολή των δύο άλλων μελών της συμβουλευτικής επιτροπής: του καθηγητή κ. Μ. Βραχάτη και του καθηγητή κ. Π. Σύβα.

Δεν θα ήταν υπερβολή να δηλώσω ότι όλα ανεξαιρέτως τα μέλη του Τμήματος Μαθηματικών του Πανεπιστημίου Πατρών συνέβαλαν άμεσα ή έμμεσα στην υλοποίηση της διατριβής αυτής και τους είμαι ευγνώμων γι' αυτό. Ιδιαίτερα θα ήθελα να ευχαριστήσω τους καθηγητές κ. Χ. Ζαγούρα και Π. Πιντέλα, καθώς και την επίκουρο καθηγήτρια κ. Θ. Γράψα, οι οποίοι με τίμησαν με τη συνεργασία τους.

Τέλος θα ήθελα να ευχαριστήσω την μητέρα μου Μαριέττα, τη γυναίκα μου Τζίνα και τα παιδιά μου Μάνο και Μαρία για την υπομονή που έκαναν όλα αυτά τα χρόνια, και τις θυσίες που πρόθυμα αποδέχτηκαν προκειμένου να κατορθώσω να ολοκληρώσω την εργασία αυτή.

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

<u>ΚΕΦΑΛΑΙΟ 0</u> : ΕΙΣΑΓΩΓΗ.....	ix
-----------------------------------	----

0.1. Το αντικείμενο της Επιχειρησιακής Έρευνας.....	ix
0.2. Μέθοδοι μη γραμμικού προγραμματισμού.....	xii
0.3. Το Γενικό πρόβλημα του μη γραμμικού προγραμματισμού.....	xiv
0.4. Το περιεχόμενο και η δομή της παρούσας διατριβής.....	xv

ΜΕΡΟΣ Α

ΕΛΑΧΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΧΩΡΙΣ ΠΕΡΙΟΡΙΣΜΟΥΣ.....	1
--	---

<u>ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1</u> : ΤΟ ΠΡΟΒΛΗΜΑ ΤΗΣ ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗΣ ΧΩΡΙΣ ΠΕΡΙΟΡΙΣΜΟΥΣ. ΟΡΙΣΜΟΙ ΚΑΙ ΜΕΘΟΔΟΙ ΕΠΙΛΥΣΗΣ.....	3
---	---

1.1. Βασικοί ορισμοί.....	4
1.2. Ικανές και αναγκαίες συνθήκες για ακρότατα χωρίς περιορισμούς.....	5
1.3. Γνωστές μέθοδοι για βελτιστοποίηση χωρίς περιορισμούς.....	7
1.3.1. Μέθοδοι κλίσης.....	7
1.3.1.1. Μέθοδος μέγιστης μείωσης (Steepest descent).....	7
1.3.1.2. Η μέθοδος Newton.....	8
1.3.1.3. Ο τροποποιημένος steepest descent αλγόριθμος του Armijo....	9
1.3.2. Μέθοδοι συζυγών κλίσεων.....	10
1.3.3. Μέθοδοι μεταβλητής μετρικής.....	11
1.3.3.1. Μέθοδος Broyden.....	11
1.3.3.2. Μέθοδοι Pearson.....	11
1.3.3.3. Μέθοδος DFP.....	12
1.3.3.4. Μέθοδος Fletcher.....	12
1.3.4. Μη τετραγωνικά πρότυπα.....	12
1.3.4.1. Η μέθοδος των Jacobson – Oksman.....	13
1.3.5. Μέθοδοι άμεσης αναζήτησης.....	13
1.3.6. Μέθοδοι L-συναρτήσεων.....	14
1.3.7. Καμπυλόγραμμες τροχιές.....	14

<u>ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2 : Η ΜΕΘΟΔΟΣ OPT-BIS</u>	15
2.1. Εισαγωγή.....	16
2.2. Ο Αλγόριθμος.....	18
2.3. Σύγκλιση του αλγόριθμου.....	20
2.4. Αριθμητικά αποτελέσματα.....	22
<u>ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3 : ΚΩΝΙΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ ΕΛΑΧΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗΣ ΧΩΡΙΣ ΠΕΡΙΟΡΙΣΜΟΥΣ</u>	29
3.1. Γενικά.....	30
3.2. Η κωνική μέθοδος των Μπακόπουλου και Μπότσαρη.....	31
3.3. Το μήκος βήματος των Barzilai και Borwein.....	38
3.4. Μη μονότονη μέθοδος Armijo.....	38
3.5. Η Μέθοδος ελάττωσης διάστασης στην βελτιστοποίηση – Μέθοδος DROPT.....	38
3.5.1. Συμβολισμοί.....	39
3.5.2. Η μέθοδος.....	39
3.6. Η μη μονότονη κωνική μέθοδος.....	41
3.6.1. Η μέθοδος.....	41
3.6.2. Η σύγκλιση της μεθόδου.....	42
3.6.3. Αριθμητικές εφαρμογές	44
3.7. Μια κωνική μέθοδος ελάττωσης διάστασης για ελαχιστοποίηση χωρίς περιορισμούς.....	47
3.7.1. Η μέθοδος.....	47
3.7.2. Η σύγκλιση της μεθόδου.....	50
3.7.3. Αριθμητικές εφαρμογές.....	51

ΜΕΡΟΣ Β

ΕΛΑΧΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΠΕΡΙΟΡΙΣΜΟΥΣ.....	53
-------------------------------------	----

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4 : ΜΕΘΟΔΟΙ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΙΣΜΟΥ ΜΕ ΠΕΡΙΟΡΙΣΜΟΥΣ.....

55

4.1. Διατύπωση του προβλήματος.....	56
4.2. Ικανές και αναγκαίες συνθήκες.....	56
4.3. Ακρότατα με περιορισμούς ισότητας και η μέθοδος Lagrange.....	62
4.4. Μέθοδοι επίλυσης.....	66
4.4.1. Μέθοδοι γραμμικής προσέγγισης.....	67
4.4.2. Άλλες προσεγγιστικές μέθοδοι	68
4.4.3. Προβολικές μέθοδοι.....	68
4.4.4. Μέθοδοι που χρησιμοποιούν συναρτήσεις ποινής.....	68
4.4.5. Μέθοδοι ευέλικτων ανοχών.....	70

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5 : ΕΛΑΧΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΥΝΑΡΤΗΣΕΩΝ ΜΕ ΠΕΡΙΟΡΙΣΜΟΥΣ ΚΑΤΑ ΜΗΚΟΣ ΓΕΩΔΑΙΣΙΑΚΩΝ ΚΑΜΠΥΛΩΝ.....

71

5.1. Διατύπωση του προβλήματος και βασικοί ορισμοί.....	72
5.2. Οι εξισώσεις Euler.....	73
5.3. Εύρεση της γαιωδαισιακής καμπύλης.....	74
5.3.0.1. Επίλυση του συστήματος με κατά Taylor ανάλυση.....	79
5.3.1. Χρήση του Moore-Penrose γενικευμένου αντίστροφου.....	80
5.3.1.1. Επίλυση του συστήματος με κατά Taylor ανάλυση....	83
5.3.1.2. Αριθμητική επίλυση του συστήματος.....	84
5.4. Ο Αλγόριθμος.....	85
5.5. Σύγκλιση του αλγόριθμου.....	88
5.6. Αριθμητικά αποτελέσματα.....	90
5.7. Συμπεράσματα.....	91

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑΤΑ.....

93

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Α : ΕΙΔΙΚΑ ΘΕΜΑΤΑ.....

95

1.	Μέθοδοι επίλυσης εξισώσεων και συστημάτων.....	95
1.1.	Μια τροποποιημένη μέθοδος διχοτόμησης.....	95
1.2.	Μη γραμμική SOR.....	96
2.	Στοιχεία από τον Λογισμό των διαφορών.....	97
2.1.	Το πρόβλημα των γεωδαισιακών καμπυλών.....	97
2.2.	Η μέθοδος των διαφορών σε προβλήματα με σταθερά άκρα...	97
2.3.	Εξίσωση Euler.....	100
2.4.	Συναρτησιακά της μορφής $J(x(t)) = \int_{t_0}^{t_1} F(t, x_1, x_2, K, x_n, x_1', x_2', K, x_n') dt$	103
2.5.	Προβλήματα διαφορών με μεταβλητά άκρα.....	103
2.6.	Ακρότατα με περιορισμούς.....	104
2.6.1.	Περιορισμοί της μορφής $h(t, x_1, x_2, K, x_n) = 0$	104
2.7.	Ευθείες μέθοδοι επίλυσης προβλημάτων διαφορών.....	106
2.7.1.	Η μέθοδος πεπερασμένων διαφορών του Euler.....	106
2.7.2.	Η μέθοδος Ritz.....	108
3.	Γενικευμένοι αντίστροφοι.....	110
3.1.	Ορισμοί.....	110
3.2.	Ο Moore-Penrose γενικευμένος αντίστροφος.....	110
 <u>ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Β : ΣΥΝΑΡΤΗΣΕΙΣ ΕΛΕΓΧΟΥ</u>		113
 <u>ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ</u>		119

Κεφάλαιο 0

ΕΙΣΑΓΩΓΗ

0.1. Το αντικείμενο της Επιχειρησιακής Έρευνας

Όταν στις αρχές του Β΄ Παγκόσμιου Πόλεμου μια ομάδα επιστημόνων και στρατιωτικών προσπάθησαν να οργανώσουν την αεράμυνα της Βρετανίας, δεν μπορούσαν να φανταστούν την ώθηση που έδιναν σε όλους (σχεδόν) τους επιστημονικούς κλάδους.

Το 1948 η Επιχειρησιακή Έρευνα αναγνωρίστηκε ως ξεχωριστός κλάδος σπουδών με την εισαγωγή ενός μαθήματος, αφιερωμένου σε μη στρατιωτικές τεχνικές, στο Τεχνολογικό Ινστιτούτο της Μασαχουσέτης (MIT). Στην αρχή της δεκαετίας του 1950 η βιομηχανία των ΗΠΑ προσαρμοσε προγράμματα επιχειρησιακής έρευνας με σκοπό τη βελτίωση της διεύθυνσης συγκεκριμένων βιομηχανικών συστημάτων.

Η επιχειρησιακή έρευνα χαρακτηρίζεται από προσανατολισμό στη μελέτη συστημάτων, στη χρήση ομάδων ερευνητών από διάφορους επιστημονικούς κλάδους και στην προσαρμογή των επιστημονικών μεθόδων στις συνθήκες υπό τις οποίες διεξάγεται η έρευνα. Επειδή δεν είναι δυνατή η πειραματική – εργαστηριακή μελέτη μεγάλων συστημάτων, για κάθε υπό μελέτη σύστημα σχεδιάζεται ένα αντιπροσωπευτικό υπόδειγμα (μοντέλο). Το μοντέλο αποτελείται από μια εξίσωση, στο οποίο το μέτρο απόδοσης του συστήματος είναι μια συνάρτηση των ελεγχόμενων και μη ελεγχόμενων μεταβλητών, και από τη διατύπωση των συνθηκών οι οποίες καθορίζουν τη δυνατότητα χειρισμού των ελεγχόμενων μεταβλητών. Η μελέτη του

μοντέλου έχει ως στόχο τον καθορισμό των τιμών των ελεγχόμενων μεταβλητών, ώστε να βελτιστοποιείται η απόδοση του συστήματος.

Ορισμένα τυπικά προβλήματα Επιχειρησιακής Έρευνας είναι: η κατανομή πόρων (ανθρώπινου υλικού, μηχανημάτων, χρημάτων, προϊόντων ή διευκολύνσεων), ο έλεγχος αποθηκών, η αντικατάσταση και συντήρηση των πόρων, ο χειρισμός καταστάσεων αναμονής, ανθρώπων ή αντικειμένων, που αφορούν την παροχή υπηρεσιών ή τη διανομή προϊόντων, η κατάταξη, οργάνωση και λειτουργία δικτύων, ο ανταγωνισμός και η αναζήτηση ή ο καθορισμός του καλύτερου δυνατού τρόπου απόκτησης των απαιτούμενων πληροφοριών για τη λήψη αποφάσεων κ. ά.

Μιλώντας για βελτιστοποίηση, εννοούμε την μαθηματική μεθοδολογία ή διαδικασία με την οποία προσδιορίζεται η μέγιστη ή ελάχιστη τιμή μιας συνάρτησης πολλών μεταβλητών. Η ανάγκη εύρεσης τρόπων (αναλυτικών και αριθμητικών) βελτιστοποίησης, είναι εμφανής σε διάφορους τομείς της ανθρώπινης δραστηριότητας. Σχεδόν κάθε πρόβλημα σχεδιασμού, λειτουργίας και ανάλυσης των φυσικών, τεχνολογικών και επιχειρησιακών συστημάτων, καθώς και του αυτοματισμού τους, οδηγεί στη βελτιστοποίηση κατάλληλων συναρτήσεων ή συναρτησιακών που περιγράφουν την κατάσταση και την ποιότητα του προϊόντος το οποίο παράγει το σύστημα. Γι' αυτό σήμερα η βελτιστοποίηση αναπτύσσεται, αφενός μεν ως καθαρά μαθηματική τεχνική, αφετέρου δε σε συνδυασμό με την κατηγορία των συστημάτων και των εφαρμογών στις οποίες χρησιμοποιείται.

Μερικά τυπικά παραδείγματα εφαρμογών της βελτιστοποίησης είναι τα ακόλουθα:

- Ο προσδιορισμός του μικρότερου δρόμου ενός μικροπωλητή που επισκέπτεται διάφορες περιοχές.
- Ο σχεδιασμός μιας μονάδας ή ενός συστήματος για την παραγωγή δοσμένης ποσότητας υλικού επιθυμητής ποιότητας με το μικρότερο κόστος ή το μεγαλύτερο κέρδος.
- Ο προσδιορισμός του είδους της συντήρησης ή αντικατάστασης διατάξεων και οργάνων για τη μεγιστοποίηση της αξιοπιστίας και την ελαχιστοποίηση του χρόνου βλάβης ενός συστήματος.
- Η διάθεση αγαθών και υπηρεσιών μεταξύ διαφόρων μονάδων λειτουργίας για τη μεγιστοποίηση της συνολικής αποδοτικότητας και παραγωγικότητας.
- Η ρύθμιση του χρόνου αναμονής ή του νεκρού χρόνου σε γραμμές παραγωγής προς ελαχιστοποίηση του κόστους κ. ά.

Ένας κλάδος της Επιχειρησιακής Έρευνας είναι και ο Μαθηματικός Προγραμματισμός. Ο Μαθηματικός Προγραμματισμός ασχολείται με την επίλυση πολυμεταβλητών προβλημάτων μεγιστοποίησης ή ελαχιστοποίησης. Οι θεωρούμενες μεταβλητές εκφράζονται με κάποια συναρτησιακή σχέση που πρέπει να μεγιστοποιηθεί ή ελαχιστοποιηθεί. Η σχέση αυτή ονομάζεται συνήθως **αντικειμενική συνάρτηση** ή **συνάρτηση κόστους** (κέρδους) ή **δείκτης συμπεριφοράς**. Οι μεταβλητές αυτές πρέπει συνήθως να ικανοποιούν ορισμένες εξισώσεις ή ανισώσεις που ονομάζονται **περιορισμοί**. Τόσο η αντικειμενική συνάρτηση όσο και οι περιορισμοί μπορούν να είναι γραμμικές ή μη γραμμικές συναρτήσεις μερικών ή όλων των μεταβλητών. Αν δεν υπάρχουν περιορισμοί, το πρόβλημα είναι γνωστό ως πρόβλημα ελαχιστοποίησης (μεγιστοποίησης) χωρίς περιορισμούς. Κάθε σύνολο τιμών των μεταβλητών του προβλήματος που ικανοποιεί όλους τους περιορισμούς ονομάζεται

εφικτή λύση. Μια εφικτή λύση που μεγιστοποιεί (ή ελαχιστοποιεί, ανάλογα με την περίπτωση) την αντικειμενική συνάρτηση αποτελεί μια **βέλτιστη λύση** του προβλήματος του μαθηματικού προγραμματισμού.

Ουσιαστικά ο Μαθηματικός Προγραμματισμός άρχισε να αναπτύσσεται το 1947 στις ΗΠΑ. Ο Γάλλος μαθηματικός Joseph Fourier γνώριζε τις δυνατότητες του Μαθηματικού Προγραμματισμού από το 1823, αλλά ο πρώτος που δημοσίευσε επιστημονική μελέτη σχετική με τον Μαθηματικό Προγραμματισμό ήταν ο Ρώσος μαθηματικός και νομπελίστας Leonid Vitalievitch Kantorovich (1939) [54]. Ο όρος «Μαθηματικός Προγραμματισμός» χρησιμοποιήθηκε από τον Robert Dorfman γύρω στο 1950. Η γενική μέθοδος Simplex επίλυσης του προβλήματος του Γραμμικού Προγραμματισμού προγραμματίστηκε σε ηλεκτρονικό υπολογιστή SEAC για πρώτη φορά στις ΗΠΑ το 1951. Σήμερα ο Μαθηματικός Προγραμματισμός είναι ένας γενικός όρος που περιλαμβάνει τον γραμμικό προγραμματισμό, τον ακέραιο προγραμματισμό, τον κυρτό προγραμματισμό, τον μη γραμμικό προγραμματισμό, τη θεωρία ροών δικτύων, το δυναμικό προγραμματισμό και τον προγραμματισμό υπό καθεστώς αβεβαιότητας.

Τα προβλήματα του Μη Γραμμικού Προγραμματισμού ταξινομούνται σε προβλήματα χωρίς περιορισμούς, σε προβλήματα με γραμμικούς περιορισμούς και τέλος σε προβλήματα με μη γραμμικούς περιορισμούς. Επίσης διακρίνονται σε προβλήματα με κυρτή ή μη κυρτή αντικειμενική συνάρτηση. Μια συνάρτηση $f(x)$ ορισμένη στο κυρτό σύνολο S είναι κυρτή τότε, και μόνον τότε, όταν το σύνολο των σημείων που κείνται πάνω της και υπεράνω της γραφικής της παράστασης είναι κυρτό. Η $f(x)$ είναι κοίλη αν η $-f(x)$ είναι κυρτή. Οι γραμμικές συναρτήσεις είναι ταυτόχρονα κυρτές και κοίλες. Μια τετραγωνική συνάρτηση με θετικούς συντελεστές στους μεγιστοβάθμιους όρους της είναι κυρτή. Το πρόβλημα της ελαχιστοποίησης της κυρτής συνάρτησης $f(x)$ με κυρτούς περιορισμούς $h_j(x) \leq 0$, $j = 0, 1, K, m$, ονομάζεται κυρτό πρόβλημα (μη γραμμικού) προγραμματισμού. Η κυρτότητα ενός προβλήματος εξασφαλίζει το γεγονός ότι ένα οποιοδήποτε τοπικό ελάχιστο είναι ολικό ελάχιστο, πράγμα που διευκολύνει κατά πολύ τον υπολογισμό των λύσεων με τον υπολογιστή.

Ο μη γραμμικός προγραμματισμός βρίσκει εφαρμογές σε διάφορες επιστήμες (μηχανική, οικονομία, διοίκηση επιχειρήσεων, φυσικές επιστήμες, μαθηματικά) και σε αντικείμενα όπως η πρόβλεψη, ο σχεδιασμός παραγωγής, ο έλεγχος αποθεμάτων, ο ποιοτικός έλεγχος, συντήρηση και επισκευή, σχεδιασμός διαδικασιών, οικονομικά προβλήματα και σχεδιασμός χαρτοφυλακίων. Γενικότερα τα προβλήματα Μη Γραμμικού Προγραμματισμού εμφανίζονται οπουδήποτε πρέπει να ληφθούν αποφάσεις (με την ευρεία έννοια) σε κάποια σύνθετη κατάσταση που μπορεί να παρασταθεί με ένα αντίστοιχο μαθηματικό μοντέλο.

Τα περισσότερα πραγματικά προβλήματα έχουν αρκετές λύσεις, κάποια δε από αυτά άπειρο πλήθος λύσεων. Ο στόχος του προγραμματισμού είναι να βρει την καλύτερη δυνατή λύση μεταξύ όλων των πιθανών λύσεων για κάθε ξεχωριστό πρόβλημα, ως προς κάποια προκαθορισμένα κριτήρια. Ένα πρόβλημα που έχει μοναδική λύση δεν έχει νόημα να βελτιστοποιηθεί.

Τα προβλήματα του Μη Γραμμικού Προγραμματισμού ταξινομούνται σε προβλήματα χωρίς περιορισμούς και σε προβλήματα με περιορισμούς.

0.2. Μέθοδοι Μη Γραμμικού Προγραμματισμού

Δεν υπάρχει γενική μέθοδος επίλυσης μη γραμμικών προβλημάτων με την έννοια που ο αλγόριθμος SIMPLEX επιλύει προβλήματα βελτιστοποίησης όπου όλες οι συναρτήσεις είναι γραμμικές. Έτσι, ο μη γραμμικός προγραμματισμός συνεχίζει να προσφέρει ένα ευρύ πεδίο έρευνας. Προχωράει μέχρι και σήμερα προτείνοντας και εφαρμόζοντας νέους αλγορίθμους βελτιστοποίησης, εξετάζοντας και συγκρίνοντας τα αποτελέσματα των αλγορίθμων σε διάφορους τομείς ενδιαφέροντος και σχεδιάζοντας καλύτερους αλγορίθμους με βάση την αποκτηθείσα εμπειρία.

Οι διάφορες μέθοδοι βελτιστοποίησης μπορούν να ταξινομηθούν (απλοϊκά) ως εξής:

Α) **Αναλυτικές μέθοδοι**, οι οποίες χρησιμοποιούν κλασικές τεχνικές του διαφορικού λογισμού και του λογισμού των διαφορών. Οι μέθοδοι αυτές αναζητούν το ακρότατο μιας συνάρτησης $f(x)$, βρίσκοντας τις τιμές του $x \in \mathbb{R}^n$ που μηδενίζουν τις παραγώγους της $f(x)$. Όταν πρόκειται για πρόβλημα με περιορισμούς, τότε χρησιμοποιούνται τεχνικές όπως οι πολλαπλασιαστές Lagrange κ. ά. Για την εφαρμογή των αναλυτικών μεθόδων θα πρέπει το πρόβλημα να περιγραφεί με τέτοιους μαθηματικούς όρους, ώστε να μπορούμε να χειριστούμε τις συναρτήσεις και τις μεταβλητές με γνωστούς κανόνες. Για μεγάλης διάστασης, μη γραμμικά προβλήματα, οι αναλυτικές μέθοδοι αποδεικνύονται μη ικανοποιητικές. Τέτοιες μέθοδοι δεν συζητούνται στη παρούσα διατριβή.

Β) **Αριθμητικές μέθοδοι** οι οποίες χρησιμοποιούν προηγούμενη πληροφορία για να δημιουργήσουν καλύτερες λύσεις του προβλήματος βελτιστοποίησης μέσω επαναληπτικών διαδικασιών. Οι αριθμητικές μέθοδοι μπορούν να χρησιμοποιηθούν για να λύσουν προβλήματα που δεν λύνονται αναλυτικά. Τέτοιες τεχνικές είναι το αντικείμενο της διατριβής αυτής.

Άλλα είδη μεθόδων που δεν θα συζητηθούν εδώ είναι:

- Γ) Οι **γραφικές μέθοδοι** και
- Δ) οι **πειραματικές μέθοδοι**.

Στις μεθόδους επίλυσης προβλημάτων Μη Γραμμικού Προγραμματισμού συμπεριλαμβάνονται οι **μέθοδοι άμεσης ανίχνευσης** και οι **μέθοδοι κλίσης** (gradient).

Οι μέθοδοι άμεσης ανίχνευσης δεν απαιτούν τον απευθείας υπολογισμό των παραγώγων της αντικειμενικής συνάρτησης, αλλά στηρίζονται σε υπολογισμούς πάνω στη συνάρτηση $f(x)$ και σε πληροφορία που προκύπτει από τα προηγούμενα βήματα. Στις μεθόδους άμεσης ανίχνευσης περιλαμβάνονται η μέθοδος των διαδοχικών διαστημάτων, η μέθοδος ανίχνευσης Fibonacci, ο αλγόριθμος χρυσής τομής, ο αλγόριθμος Darries – Swann – Campey, ο αλγόριθμος Pavell, η μέθοδος της

διχοτόμησης (που θα περιγραφεί στο 2^ο κεφάλαιο) κ. ά. Στις περιπτώσεις συναρτήσεων πολλών μεταβλητών μπορούν να εφαρμοστούν οι παραπάνω μέθοδοι ως προς κάθε μεταβλητή σε συνδυασμό με την τεχνική πινακοποίησης ή διάφορες ακολουθιακές τεχνικές.

Οι μέθοδοι κλίσης εκλέγουν την διεύθυνση d_k στην εξίσωση

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + t_k d_k, \quad k = 1, 2, K$$

με τη βοήθεια των τιμών των μερικών παραγώγων της $f(x)$ ως προς τις ανεξάρτητες μεταβλητές $x_1, x_2, \dots, x_n$ του διανύσματος $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$ και με τη βοήθεια πληροφορίας από προηγούμενα βήματα. Στον παραπάνω τύπο το t_k συμβολίζει την απόσταση κίνησης (**μήκος βήματος**) κατά μήκος της διεύθυνσης d_k . Στις μεθόδους κλίσης συγκαταλέγονται η μέθοδος Rosenbrock, η μέθοδος των συζυγών κατευθύνσεων, η μέθοδος Pavell, η μέθοδος μέγιστης πτώσης (steepest descent), η μέθοδος Newton – Raphson κ. ά.

Η μέθοδος Steepest Descent έπαιξε πρωταρχικό ρόλο στην ανάπτυξη της θεωρίας του Μαθηματικού Προγραμματισμού και οφείλεται στον Γάλλο μαθηματικό Cauchy (19^{ος} αιώνας). Ο αλγόριθμος αυτός στηρίζεται στο γεγονός ότι «για δοσμένο μήκος $\|\delta x\|$ της μεταβολής δx της διανυσματικής ανεξάρτητης μεταβλητής x , η ελάττωση (ή αύξηση) δf της αντικειμενικής συνάρτησης είναι μέγιστη όταν το διάνυσμα δx είναι συγγραμμικό και ομόρροπο (αντίρροπο) προς το διάνυσμα της κλίσης (μερικής παραγώγου) $f_x = \frac{\partial f}{\partial x} = \nabla f$. Αν $x^{(k)}$ είναι η k -οστή προσέγγιση της βέλτιστης τιμής του x , τότε με βάση την παραπάνω ιδιότητα, η επόμενη προσέγγιση $x^{(k+1)}$ θα είναι

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} \pm \varepsilon f_x(x^{(k)}), \quad \varepsilon > 0,$$

όπου το «+» χρησιμοποιείται όταν η $f(x)$ μεγιστοποιείται και το «-» όταν η $f(x)$ ελαχιστοποιείται. Ο συντελεστής $\varepsilon > 0$ χρησιμοποιείται για να περιορίσει τη μεταβολή δf ώστε να εξασφαλιστεί η σύγκλιση στο επιθυμητό τοπικό ελάχιστο ή μέγιστο. Δυστυχώς δεν υπάρχει γενικός κανόνας προσδιορισμού του ε , γι αυτό και η εκλογή του γίνεται εμπειρικά.

Ο αλγόριθμος αυτός είναι πολύ αργός, κυρίως στα τελικά βήματα όταν έχουμε πλησιάσει πολύ στη βέλτιστη τιμή. Ο αλγόριθμος Newton – Raphson είναι πολύ ταχύτερος. Συγκεκριμένα, αν η αντικειμενική συνάρτηση είναι τετραγωνική, συγκλίνει σε ένα και μόνο βήμα. Ο αλγόριθμος Newton – Raphson έχει τη μορφή

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} \pm \varepsilon F^{-1}(x^{(k)}) f_x(x^{(k)}), \quad \varepsilon > 0, \quad (0.1)$$

όπου $F(x^{(k)})$ είναι ο πίνακας των δεύτερων μερικών παραγώγων της $f(x)$ υπολογισμένων στο σημείο $x^{(k)}$. Η αύξηση της ταχύτητας σύγκλισης σε σχέση με τη μέθοδο steepest descent οφείλεται ακριβώς στην παρουσία του παράγοντα $F^{-1}(x^{(k)})$ στην (0.1). Ο υπολογισμός όμως του $F^{-1}(x^{(k)})$ σε κάθε βήμα απαιτεί πολύ

υπολογιστικό χρόνο και γι' αυτό στην πράξη υπολογίζεται κάθε N βήματα και κρατείται σταθερό για όλα τα ενδιάμεσα βήματα.

Στην περίπτωση που υπάρχουν περιορισμοί ισότητας χρησιμοποιείται η μέθοδος Lagrange για τη μετατροπή του προβλήματος σε πρόβλημα χωρίς περιορισμούς. Όταν όλες οι συναρτήσεις του προβλήματος είναι παραγωγίσιμες, υπάρχει μια αντίστοιχη μέθοδος χειρισμού προβλημάτων μαθηματικού προγραμματισμού με περιορισμούς ανισοτήτων. Η μέθοδος αυτή στηρίζεται σε ορισμένες γενικές συνθήκες γνωστές ως συνθήκες Kuhn – Tucker [58]. Ορισμένες μέθοδοι κυρτού τετραγωνικού προγραμματισμού συνδέονται στενά με τη μέθοδο Simplex του Γραμμικού Προγραμματισμού και κάνουν χρήση των συνθηκών Kuhn – Tucker, γιατί αυτές ικανοποιούν αυτόματα τις απαιτήσεις παραγωγισιμότητας. Σε πολλές περιπτώσεις η μετατροπή του προβλήματος σε αντίστοιχο πρόβλημα χωρίς περιορισμούς είναι πολύ απλή. Ο γενικός τρόπος αναγωγής σε πρόβλημα χωρίς περιορισμούς κάνει χρήση των «συναρτήσεων ποινής» (penalty functions) και έχει ως ακολούθως: έστω το πρόβλημα ελαχιστοποίησης της $f(x)$ με τους περιορισμούς $g_i(x) \geq 0, i=1,2,K,m$. Για κάθε περιορισμό που παραβιάζεται στη θέση x αντιστοιχεί ένας όρος ποινής $[g_i(x)]^2$ και έτσι η προς βελτιστοποίηση συνάρτηση γίνεται:

$$P(x) = f(x) + \sum_{i=1}^m k_i [g_i(x)]^2, \quad k_i > 0$$

όπου οι συντελεστές k_i ονομάζονται συντελεστές ποινής. Ένας τρόπος υπολογισμού και βελτίωσης των συντελεστών ποινής περιγράφεται από τον Leitmann.

0.3. Το Γενικό πρόβλημα του Μη Γραμμικού Προγραμματισμού

Το πρόβλημα που αντιμετωπίζουμε είναι αυτό της εύρεσης του ελαχίστου μιας συνεχώς διαφορίσιμης συνάρτησης $f(x)$, $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, (αντικειμενική συνάρτηση) όπου το $x = (x_1, x_2, K, x_n)^T$ περιορίζεται σε μία συνεχή επιφάνεια:

$$S = \{x \in \mathbb{R}^n \mid h_i(x) = 0, i=1,2,K,m, m < n, g_j(x) \geq 0, j=1,2,K,p\}$$

Η τακτική που συνήθως ακολουθείται είναι εκείνη της επαγωγικής κατασκευής μιας μονότονα εξελισσόμενης ακολουθίας $\{x^k\}$, $k=0,1,2,K$ εφικτών σημείων, ξεκινώντας από ένα αρχικό εφικτό σημείο x^0 , σύμφωνα με έναν τύπο της μορφής

$$x^{k+1} = x^k + t_k d(x^k), \quad k=0,1,2,K$$

όπου $d(x^k)$ είναι μια πτωτική (descent) διεύθυνση που ορίζεται στον εφαπτόμενο υπόχωρο της S στο x^k και ορίζεται με την βοήθεια της κλίσης (gradient). Το διάνυσμα $d(x^k)$, ωστόσο, γενικά δεν είναι εφικτή διεύθυνση, αφού η επιφάνεια S γενικά είναι καμπύλη. Γι αυτό δεν είναι πάντα δυνατόν να πάρουμε το επόμενο σημείο κατά μήκος αυτού του διανύσματος. Έτσι, παίρνουμε ένα σημείο στην

διεύθυνση του $d(x^k)$, στο οποίο η τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης να είναι μικρότερη και στη συνέχεια μετακινούμαστε σε ένα κοντινό εφικτό σημείο, για παράδειγμα κατά μία διεύθυνση κάθετη στο εφαπτόμενο επίπεδο στο αρχικό σημείο.

Μια άλλη προσέγγιση θα ήταν να ορίσουμε μια καμπύλη $x(t)$ στο χώρο, η οποία να διέρχεται από το τρέχον εφικτό σημείο x^k , με αρχική διεύθυνση εκείνη του $d(x^k)$ και η οποία να παραμένει στην επιφάνεια S των περιορισμών για κάθε t , και να ελαχιστοποιήσουμε την $f(x)$ κατά μήκος αυτού του τόξου. Μια τέτοια καμπύλη δεν είναι μοναδική. Είναι φυσικό να επιλέξουμε εκείνη την καμπύλη που ελαχιστοποιεί το μήκος τόξου $\int_0^t \| \dot{x}(t) \| dt$ και $x(0) = x^k$, $\dot{x}(0) = d(x^k)$, όπου $\| \cdot \|$ είναι η Ευκλείδεια νόρμα. Αυτή η καμπύλη είναι η *γεωδαισιακή* της επιφάνειας των περιορισμών που διέρχεται από δοσμένο σημείο της επιφάνειας με δοσμένη διεύθυνση (βλ. Κεφάλαιο 5).

Θεωρούμε βεβαίως ότι οι εξισώσεις

$$h_i(x) = 0, i = 1, 2, \dots, m$$

ορίζουν επιφάνεια, δηλαδή κάνουμε την υπόθεση ότι το σύνολο $\{ \nabla h_i(x), i = 1, 2, \dots, m \}$ είναι γραμμικά ανεξάρτητο (*υπόθεση κανονικότητας*).

0.4. Το περιεχόμενο και η δομή της παρούσας διατριβής

Η παρούσα διατριβή αποτελείται από δύο μέρη.

Το Α' μέρος αφορά τα προβλήματα μη γραμμικού προγραμματισμού χωρίς περιορισμούς. Αποτελείται από τρία κεφάλαια.

Στο Κεφάλαιο 1 παρουσιάζεται το γενικό πρόβλημα του Μη Γραμμικού Προγραμματισμού χωρίς περιορισμούς, οι ικανές και αναγκαίες συνθήκες για την επίλυσή του, καθώς και κάποιες κλασικές μέθοδοι επίλυσης.

Στο Κεφάλαιο 2 παρουσιάζεται η μέθοδος OPTBIS για την ελαχιστοποίηση μη γραμμικών συναρτήσεων. Η μέθοδος αυτή χρησιμοποιεί μια βελτιωμένη τεχνική διχοτόμησης.

Στο Κεφάλαιο 3 παρουσιάζεται μια σειρά μεθόδων ελαχιστοποίησης με την βοήθεια μιας κωνικής συνάρτησης μοντέλου. Η κωνική συνάρτηση μοντέλο εισήχθη από τον Davidon [21]. Οι Μπακόπουλος και Μπότσαρης την χρησιμοποίησαν σε μια διαφορετική μορφή για την ελαχιστοποίηση μιας συνεχώς διαφορίσιμης συνάρτησης [10]. Στο βασικό κωνικό αλγόριθμο των Μπακόπουλου και Μπότσαρη, οι Μανουσάκης, Μπότσαρης, Γράψα και Σωτηρόπουλος ενσωματώσαμε άλλες τεχνικές εύρεσης βήματος και μονοδιάστατης ελαχιστοποίησης [65, 66]. Αυτό είχε ως αποτέλεσμα την σημαντική βελτίωση της μεθόδου.

Το Β' μέρος αφορά προβλήματα μη γραμμικού προγραμματισμού με περιορισμούς ισότητας.

Στο Κεφάλαιο 4 παρουσιάζεται το πρόβλημα του μη γραμμικού προγραμματισμού με περιορισμούς, οι ικανές και αναγκαίες συνθήκες για την επίλυσή του, καθώς και κάποιες κλασικές μέθοδοι.

Στο Κεφάλαιο 5 παρουσιάζεται η ελαχιστοποίηση μιας συνάρτησης με περιορισμούς ισότητας, με τη χρήση γεωδαισιακών καμπυλών αναζήτησης. Αυτές εισήχθησαν από τον Μπότσαρη [11]. Εδώ ο προσδιορισμός των γεωδαισιακών γίνεται με τη βοήθεια των κλασικών μεθόδων του Λογισμού των Διαφορών και με χρήση γενικευμένων αντίστροφων πινάκων.

ΜΕΡΟΣ Α

ΕΛΑΧΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΧΩΡΙΣ ΠΕΡΙΟΡΙΣΜΟΥΣ

Εδώ παρουσιάζεται το πρόβλημα της ελαχιστοποίησης μιας συνάρτησης ορισμένης και συνεχώς διαφορίσιμης στο $\mathbb{R}^n$. Στο κεφάλαιο 1 διατυπώνεται αυστηρά το πρόβλημα και παρουσιάζονται κάποιες κλασικές μέθοδοι επίλυσής του. Στο κεφάλαιο 2 παρουσιάζεται η μέθοδος OPTBIS που δημιουργήσαμε από κοινού με τους κ. Μ. Βραχάτη και Γ. Ανδρουλάκη. Τέλος στο κεφάλαιο 3 παρουσιάζονται μέθοδοι ελαχιστοποίησης που στηρίζονται σε μια κωνική συνάρτηση μοντέλο. Εδώ περιλαμβάνονται μια σειρά νέων μεθόδων που δημιουργήσαμε από κοινού με τους κ. Χ. Μπότσαρη, Θ. Γράψα και Δ. Σωτηρόπουλο.

Κεφάλαιο 1

ΤΟ ΠΡΟΒΛΗΜΑ ΤΗΣ ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗΣ **ΧΩΡΙΣ ΠΕΡΙΟΡΙΣΜΟΥΣ.** **ΟΡΙΣΜΟΙ ΚΑΙ ΜΕΘΟΔΟΙ ΕΠΙΛΥΣΗΣ**

Στο κεφάλαιο αυτό παρουσιάζεται το γενικό πρόβλημα της βελτιστοποίησης μιας συνάρτησης χωρίς περιορισμούς. Δίνονται οι ικανές και αναγκαίες συνθήκες για την ύπαρξη ακροτάτου και παρουσιάζονται μερικές από τις πιο γνωστές μέθοδοι επίλυσής του.

1.1. Βασικοί ορισμοί

Το γενικό πρόβλημα του μη γραμμικού προγραμματισμού χωρίς περιορισμούς είναι εκείνο της βελτιστοποίησης (ελαχιστοποίησης ή μεγιστοποίησης) μιας μη γραμμικής συνάρτησης f ορισμένης στο $\mathbb{R}^n$.

Πριν δούμε την τυπική διατύπωση του προβλήματος ας θυμηθούμε κάποιους ορισμούς.

Θεωρούμε μια πραγματική συνάρτηση f με πεδίο ορισμού $D \subseteq \mathbb{R}^n$. Λέμε ότι η f παρουσιάζει **τοπικό ελάχιστο** σε ένα σημείο $x^* \in D$ αν υπάρχει ένας πραγματικός αριθμός $\delta > 0$ τέτοιος, ώστε

$$f(x) \geq f(x^*) \quad (1.1)$$

για κάθε $x \in D$ με $\|x - x^*\| < \delta$.

Λέμε ότι η f παρουσιάζει **τοπικό μέγιστο** σε ένα σημείο $x^* \in D$ αν υπάρχει ένας πραγματικός αριθμός $\delta > 0$ τέτοιος, ώστε

$$f(x) \leq f(x^*)$$

για κάθε $x \in D$ με $\|x - x^*\| < \delta$.

Αν η ανισότητα στην (1.1) αντικατασταθεί από μία αυστηρή ανισότητα

$$f(x) > f(x^*), \quad x \in D, \quad x \neq x^* \quad (1.2)$$

έχουμε ένα γνήσιο τοπικό ελάχιστο. Αν η φορά της ανισότητας στην (1.2) αντιστραφεί, έχουμε ένα γνήσιο τοπικό μέγιστο.

Η συνάρτηση f παρουσιάζει **ολικό ελάχιστο (γνήσιο ολικό ελάχιστο)** στο $x^* \in D$ αν η (1.1) [ή η (1.2)] ισχύει για κάθε $x \in D$. Παρόμοια ορίζεται και το **ολικό μέγιστο** ή το **γνήσιο ολικό μέγιστο**. Ένα **ακρότατο** είναι είτε ελάχιστο είτε μέγιστο. Δεν έχουν όλες οι συναρτήσεις ακρότατα στο $\mathbb{R}^n$. Για παράδειγμα μια μη σταθερή γραμμική συνάρτηση δεν έχει ακρότατα στο $\mathbb{R}^n$.

Κάθε ολικό ελάχιστο (μέγιστο) της f στο D είναι επίσης τοπικό ελάχιστο (μέγιστο). Το αντίστροφο βεβαίως δεν ισχύει. Υπάρχουν βέβαια συναρτήσεις, όπως οι κυρτές, στις οποίες κάθε τοπικό ελάχιστο είναι και ολικό.

Έστω $x \in D \subseteq \mathbb{R}^n$, ένα σημείο στο οποίο η πραγματική συνάρτηση f είναι παραγωγίσιμη. Θυμίζουμε ότι αν μια πραγματική συνάρτηση f είναι παραγωγίσιμη (διαφορίσιμη) σε ένα εσωτερικό σημείο $x \in D$, τότε οι πρώτες μερικές παράγωγοι

της υπάρχουν στο x . Αν επιπλέον οι μερικές παράγωγοι είναι συνεχείς στο x , τότε η f λέγεται συνεχώς διαφορίσιμη στο x . Ομοίως, αν η f είναι δυο φορές παραγωγίσιμη στο $x \in D$, τότε οι δεύτερες μερικές παράγωγοι της υπάρχουν στο σημείο αυτό, και αν είναι συνεχείς στο x , τότε η f λέγεται συνεχώς δις διαφορίσιμη στο x .

Ορίζουμε την **κλίση** της f στο x να είναι το διάνυσμα

$$\nabla f(x) = \left(\frac{\partial f(x)}{\partial x_1}, \frac{\partial f(x)}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial f(x)}{\partial x_n} \right)^T.$$

Αν η f είναι δυο φορές παραγωγίσιμη στο x , ορίζουμε τον **Εσσιανό πίνακα** ή **Εσσιανή** της f στο x να είναι ο $n \times n$ συμμετρικός πίνακας

$$F(x) = \nabla^2 f(x) = \left[\frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_i \partial x_j} \right], \quad i, j = 1, 2, \dots, n.$$

Στη συνέχεια θα δούμε κάποιες ικανές και αναγκαίες συνθήκες ώστε μια συνεχώς διαφορίσιμη συνάρτηση f στο $\mathbb{R}^n$ να παρουσιάζει τοπικό ακρότατο στο σημείο x^* .

1.2. Ικανές και αναγκαίες συνθήκες για ακρότατα χωρίς περιορισμούς

Ένα σημείο x^* καλείται κρίσιμο σημείο της f , αν η κλίση $g(x) = \nabla f(x)$ της f υπάρχει στο x^* και είναι $g(x^*) = 0$. Αυτή είναι και μια αναγκαία συνθήκη ώστε το x^* να είναι σημείο τοπικού ελαχίστου της f .

Συγκεκριμένα ισχύουν τα παρακάτω πολύ γνωστά θεωρήματα:

Θεώρημα 1.1: (Αναγκαία Συνθήκη)

Έστω x^* ένα εσωτερικό σημείο του D στο οποίο η f παρουσιάζει τοπικό ελάχιστο ή τοπικό μέγιστο. Αν η f είναι παραγωγίσιμη στο x^* , τότε

$$g(x^*) = 0.$$

όπου $g(x) = \nabla f(x)$.

Θεώρημα 1.2: (Ικανές συνθήκες)

Έστω x^* ένα εσωτερικό σημείο του D στο οποίο η f είναι δυο φορές συνεχώς παραγωγίσιμη. Αν

$$g(x^*) = 0$$

και

$$z^T F(x^*) z > 0 \quad (1.3)$$

για όλα τα μη μηδενικά διανύσματα z , τότε η f παρουσιάζει τοπικό ελάχιστο στο x^* . Αν η φορά στην ανισότητα (1.3) αντιστραφεί, τότε η f παρουσιάζει τοπικό μέγιστο στο x^* . Επιπλέον τα ακρότατα είναι γνήσια τοπικά ακρότατα.

Απόδειξη

Η απόδειξη γίνεται με ανάπτυγμα της f κατά Taylor.

Όταν ισχύει $z^T F(x)z > 0$ για όλα τα μη μηδενικά διανύσματα z , τότε λέμε ότι ο πίνακας $F(x)$ είναι **θετικά ορισμένος**. Σ' αυτήν την περίπτωση γράφουμε $F(x) > 0$. Αν $z^T F(x)z < 0$ για όλα τα μη μηδενικά διανύσματα z , τότε λέμε ότι ο πίνακας $F(x)$ είναι **αρνητικά ορισμένος** (γράφουμε $F(x) < 0$).

Θεώρημα 1.3:

Έστω x^* ένα εσωτερικό σημείο του D και ας υποθέσουμε ότι η f είναι δυο φορές συνεχώς παραγωγίσιμη στο D . Αναγκαία συνθήκη για τοπικό ελάχιστο της f στο x^* είναι

$$g(x^*) = 0 \quad (1.4)$$

και

$$z^T F(x^*)z \geq 0 \quad (1.5)$$

για κάθε z . Ικανές συνθήκες για ένα τοπικό ελάχιστο είναι να ισχύει η (1.4) και για κάθε x σε κάποια γειτονιά $N_\delta(x^*)$ και για κάθε $z \in \mathbb{R}^n$, να έχουμε

$$z^T F(x)z \geq 0. \quad (1.6)$$

Αν η φορά των ανισοτήτων στις (1.5) και (1.6) αντιστραφεί, το θεώρημα εφαρμόζεται για τοπικό μέγιστο.

Απόδειξη

Βλέπε [3]

Θεώρημα 1.4:

Έστω x^* ένα εσωτερικό σημείο του D και ας υποθέσουμε ότι η f είναι δυο φορές συνεχώς παραγωγίσιμη. Αν

$$g(x^*) = 0$$

και

$$z^T F(x^*)z > 0 \quad (1.7)$$

για κάθε $x \neq x^*$ σε μια γειτονιά του x^* και για κάθε μη μηδενικό z , τότε η f έχει ένα γνήσιο τοπικό ελάχιστο στο x^* . Αν αντιστρέψουμε την φορά της ανισότητας στην (1.7) έχουμε ικανές συνθήκες για αυστηρό τοπικό μέγιστο.

1.3. Γνωστές μέθοδοι για βελτιστοποίηση χωρίς περιορισμούς

1.3.1. Μέθοδοι κλίσης

Οι περισσότερες από τις υπάρχουσες μεθόδους, δημιουργούν μια ακολουθία $\{x_k\}$ προσεγγίσεων του σημείου ελαχίστου μέσω ενός αναδρομικού τύπου της μορφής:

$$x_{k+1} = x_k - t_k d_k, \quad k = 0, 1, K$$

όπου x_0 είναι η αρχική εκτίμηση για το x^* . Το μήκος βήματος t_k επιλέγεται ώστε

$$f(x_{k+1}) < f(x_k), \text{ αν } \|g(x_k)\| > 0 \quad (1.8)$$

Η μείωση της συναρτησιακής τιμής σε κάθε επανάληψη (συχνά καλείται ευστάθεια) είναι μια επιθυμητή ιδιότητα για κάθε αλγόριθμο ελαχιστοποίησης. Η ύπαρξη ενός θετικού μήκους βήματος t_k που να ικανοποιεί την (1.8) εξασφαλίζεται, αν η $-d_k$ είναι μια πτωτική διεύθυνση. Η συνθήκη ώστε να συμβαίνει αυτό είναι:

$$-g^T(x_k) d_k < 0$$

Σ' αυτήν την περίπτωση, αν αναπτύξουμε την $f(x)$ κατά Taylor έχουμε:

$$f(x_{k+1}) - f(x_k) = g^T(x_k)(x_{k+1} - x_k) + \frac{1}{2}(x_{k+1} - x_k)^T F(\xi x_k + (1-\xi)x_{k+1})(x_{k+1} - x_k),$$

όπου $0 < \xi < 1$. Αφού $x_{k+1} - x_k = -t_k d_k$ έχουμε:

$$f(x_{k+1}) - f(x_k) = -t_k g^T(x_k) d_k + \frac{1}{2} t_k^2 d_k^T F(x_k - t_k d_k (1-\xi)) d_k.$$

Επιλέγουμε ένα τέτοιο θετικό t_k ώστε να κάνουμε τον πρώτο όρο στο ανάπτυγμα Taylor κυρίαρχο, κι αφού $-g^T(x_k) d_k < 0$, προκύπτει ότι $f(x_{k+1}) < f(x_k)$.

1.3.1.1. Μέθοδος μέγιστης μείωσης (Steepest descent)

Στη μέθοδο αυτή είναι

$$d_k = g_k$$

Η βασική ιδέα οφείλεται στον Cauchy (1847) και στηρίζεται στο γεγονός ότι το διάνυσμα κλίσης της $f(x)$ σε κάθε σημείο x είναι ένα διάνυσμα στη διεύθυνση της μεγαλύτερης τοπικής αύξησης της $f(x)$.

Οι τεχνικές μέγιστης μείωσης συγκλίνουν πολύ αργά σε πολλές περιπτώσεις, ιδιαίτερα όταν η γραφική παράσταση της αντικειμενικής συνάρτησης f είναι σχεδόν επίπεδη. Μπορεί να συμβεί η διεύθυνση μέγιστης μείωσης να είναι σχεδόν ορθογώνια στη βέλτιστη διεύθυνση εύρεσης του ελαχίστου. Ένας τρόπος να ξεπεράσουμε τη

δυσκολία αυτή είναι με χρήση πληροφορίας δεύτερης τάξης (δεύτερων μερικών παραγώγων).

Οι παραγόμενες μέθοδοι ελαχιστοποίησης ξεκινούν από την τετραγωνική προσέγγιση της $f(x)$, δηλαδή,

$$f(x); f(x_k) + g_k^T(x - x_k) + \frac{1}{2}(x - x_k)^T F_k(x - x_k).$$

Τότε

$$g(x); g_k + F_k(x - x_k)$$

και μια προσέγγιση της ρίζας της εξίσωσης $g(x) = 0$ μπορεί να ληφθεί, αν ο F_k δεν είναι ιδιάζων, από

$$x_{k+1} = x_k - F_k^{-1} g_k \quad (1.9)$$

Ο τύπος (1.9) αποτελεί την μέθοδο Newton – Raphson.

1.3.1.2. Η μέθοδος Newton

Δίνεται με τον αναδρομικό τύπο

$$x_{k+1} = x_k - t_k F_k^{-1} g_k,$$

όπου το μήκος βήματος t_k επιλέγεται έτσι, ώστε να μειώνεται η τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης. Αν η αντικειμενική συνάρτηση είναι τετραγωνική, τότε, προφανώς, η $-F_k^{-1} g_k$ στοχεύει στο ελάχιστο, το οποίο επιτυγχάνεται σε ένα βήμα.

Η μέθοδος απαιτεί αντιστροφή πίνακα καθώς και αναλυτική έκφραση των δεύτερων μερικών παραγώγων της αντικειμενικής συνάρτησης $f(x)$. Επίσης, αν η F_k είναι ιδιάζουσα, τότε η μέθοδος αστοχεί, ενώ αν η F_k δεν είναι θετικά ορισμένη, η $-F_k^{-1} g_k$ μπορεί να μην είναι φθίνουσα διεύθυνση.

Μια σειρά τροποποιήσεων της μεθόδου Newton έχουν προταθεί, ώστε να ξεπεραστεί η δυσκολία της ιδιάζουσας Εσσιανής. Σ' αυτές η F_k αντικαθίσταται από έναν πίνακα A_k , ο οποίος δεν είναι ιδιάζων. Παράδειγμα αποτελούν οι παρακάτω μέθοδοι.

► Levenberg (1944)

Εδώ $A_k^{-1} = [F_k + \lambda_k I]^{-1}$, όπου το λ_k εξασφαλίζει ότι ο A_k^{-1} υπάρχει, π. χ. $\lambda_k > \|F_k\|$, αν και αυτή η επιλογή του λ_k μπορεί να δώσει μεγαλύτερο λ_k από το επιθυμητό.

► Greenstadt [46]

Για να αναγκάσουμε την F_k να είναι θετικά ορισμένη, βρίσκουμε τις ιδιοτιμές και τα αντίστοιχα κανονικοποιημένα διανύσματα της F_k και θέτουμε

$$F_k = \sum_{i=1}^n |\lambda_i| u_i u_i^T, \text{ αντί για } F_k = \sum_{i=1}^n \lambda_i u_i u_i^T.$$

1.3.1.3. Ο τροποποιημένος αλγόριθμος steepest descent του Armijo

Θεωρούμε μια πραγματική συνάρτηση f ορισμένη και συνεχή παντού στο $\mathbb{R}^n$, φραγμένη κάτω στο $\mathbb{R}^n$. Έστω $x^{(0)} \in \mathbb{R}^n$ ένα σταθερό σημείο και $S(x^{(0)}) = \{x : f(x) \leq f(x^{(0)})\}$. Υποθέτουμε ότι η $f \in C^1$ στο $S(x^{(0)})$ και η ∇f είναι Lipschitz συνεχής στο $S(x^{(0)})$ με σταθερά $K > 0$.

Επίσης υποθέτουμε ότι $r > 0 \Rightarrow m(r) > 0$, όπου $m(r) = \inf_{x \in S_r(x^{(0)})} \|\nabla f(x)\|$, $S_r(x^{(0)}) = S_r \cap S(x^{(0)})$, $S_r = \{x : \|x - x^*\| \geq r\}$, και x^* να είναι ένα σημείο για το οποίο $f(x^*) = \inf_{x \in \mathbb{R}^n} f(x)$, ενώ αν το $S_r(x^{(0)})$ είναι κενό, ορίζουμε $m(r) = \infty$.

Ο Steepest descent αλγόριθμος του Cauchy [18] βεβαιώνει ότι, αν οι παραπάνω συνθήκες ικανοποιούνται, τότε η ακολουθία $\{x^{(k)}\}_{k=0}^{\infty}$, η οποία ορίζεται από τη σχέση

$$x^{k+1} = x^{(k)} - \frac{1}{2K} \nabla f(x^{(k)}), \quad k = 0, 1, 2, K,$$

συγκλίνει σε ένα σημείο x^* που ελαχιστοποιεί την f .

Ο Armijo [2] τροποποίησε την μέθοδο του Cauchy ως εξής:

Αν πληρούνται οι παραπάνω προϋποθέσεις και $\eta_m = \frac{\eta}{2^{m-1}}$, $m = 1, 2, K$, με h ένας τυχαίος θετικά σημασμένος αριθμός, τότε η ακολουθία $\{x^{(k)}\}_{k=0}^{\infty}$ που ορίζεται από τη σχέση:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \eta_{m_k} \nabla f(x^{(k)}), \quad k = 0, 1, 2, K,$$

όπου m_k είναι ο μικρότερος θετικός ακέραιος για τον οποίο

$$f(x^{(k)} - \eta_{m_k} \nabla f(x^{(k)})) - f(x^{(k)}) \leq -\frac{1}{2} \eta_{m_k} \|\nabla f(x^{(k)})\|^2,$$

συγκλίνει στο σημείο x^* που ελαχιστοποιεί την f .

Στη συνέχεια παρουσιάζουμε τον αλγόριθμο της διαδικασίας Armijo που θα χρησιμοποιήσουμε παρακάτω. Στον αλγόριθμο αυτό MAR είναι ο μέγιστος αριθμός

των επαναλήψεων της διαδικασίας Armijo που απαιτούνται, η είναι ένας αυθαίρετος θετικά σημειωμένος αριθμός, και ε η προκαθορισμένη επιθυμητή ακρίβεια.

ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ 1 (Armijo)	
<i>Βήμα 1</i>	Εισάγουμε τα δεδομένα $\{f; x^{(0)}; MAR; \eta_0; \varepsilon\}$.
<i>Βήμα 2</i>	Θέτουμε $k = -1$
<i>Βήμα 3</i>	Αν $k < MAR$, αντικαθιστούμε το k με $k+1$, θέτουμε $\eta = \eta_0$, $m = 1$ και προχωράμε στο επόμενο βήμα. Διαφορετικά, προχωράμε στο βήμα 8.
<i>Βήμα 4</i>	Αν $f(x^{(k)} - \eta_{m_k} \nabla f(x^{(k)})) - f(x^{(k)}) \leq -\frac{1}{2} \eta_{m_k} \ \nabla f(x^{(k)})\ ^2$, προχωράμε στο βήμα 6. Διαφορετικά, θέτουμε $m = m+1$ και συνεχίζουμε με το επόμενο βήμα.
<i>Βήμα 5</i>	Θέτουμε $\frac{\eta}{2^{m-1}}$ και επιστρέφουμε στο βήμα 4.
<i>Βήμα 6</i>	Θέτουμε $x^{(k+1)} = x^{(k)} - \eta_{m_k} \nabla f(x^{(k)})$.
<i>Βήμα 7</i>	Αν $\ \nabla f(x^{(k)})\ \leq \varepsilon$, προχωράμε στο βήμα 8. Διαφορετικά, πηγαίνουμε στο βήμα 3.
<i>Βήμα 8</i>	Παίρνουμε τα εξαγόμενα $\{x^{(k)}, f(x^{(k)}), \nabla f(x^{(k)})\}$.

1.3.2. Μέθοδοι συζυγών κλίσεων

Τα n διανύσματα $d_1, d_2, \dots, d_n \in \mathbb{R}^n$ λέγονται **συζυγή** ως προς έναν θετικά ορισμένο πίνακα Q αν

$$d_i^T Q d_j = 0, \quad \text{αν } i \neq j$$

Η συζυγία αποτελεί γενίκευση της ορθογωνιότητας ($Q = I$). Αν ένα σύνολο n διανυσμάτων είναι Q -συζυγή, τότε τα διανύσματα αυτά είναι γραμμικά ανεξάρτητα, κι επομένως μπορούν να χρησιμοποιηθούν σαν βάση του $\mathbb{R}^n$. Όταν μια τετραγωνική συνάρτηση $f(x) = \frac{1}{2} x^T Q x + b^T x + a$ ελαχιστοποιηθεί κατά μήκος n Q -συζυγών κλίσεων, το ελάχιστο επιτυγχάνεται το πολύ σε n επαναλήψεις.

Για την κατασκευή των συζυγών κλίσεων, οι πιο κλασικές μέθοδοι είναι των Fletcher – Reeves [33], του Partan [49] και του Zoutendijk [103]. Ειδικά οι μέθοδοι των Fletcher – Reeves και του Partan έχουν μικρές απαιτήσεις μνήμης και δεν απαιτούν αντιστροφή πίνακα. Το μειονέκτημά τους είναι ότι απαιτείται η εύρεση ελαχίστου σε κάθε επανάληψη κατά μήκος της διεύθυνσης αναζήτησης.

1.3.3. Μέθοδοι μεταβλητής μετρικής

Για να ξεπεραστεί η δυσκολία αντιστροφής της Εσσιανής, οι μέθοδοι μεταβλητής μετρικής προσεγγίζουν την Εσσιανή χρησιμοποιώντας μόνο πληροφορίες πρώτης τάξης. Υποθέτουν ότι η προσέγγιση η_{k+1}^{-1} της F_{k+1}^{-1} στο x_{k+1} ικανοποιεί τη διαφορική εξίσωση

$$\eta_{k+1}^{-1} \Delta g_k = \Delta x_k, \quad \Delta g_k = g_{k+1} - g_k, \quad \Delta x_k = x_{k+1} - x_k \quad (1.10)$$

και θέτουν

$$x_{k+1} = x_k - t_k \eta_k^{-1} g_k.$$

Η (1.10) ισχύει για μια τετραγωνική συνάρτηση, αλλά όχι για μια οποιαδήποτε συνάρτηση. Οι μέθοδοι μεταβλητής μετρικής χρησιμοποιούν την (1.10) για να δημιουργήσουν μια προσέγγιση της η_{k+1}^{-1} συναρτήσει των η_k^{-1} , Δg_k και Δx_k , δηλαδή θεωρούν

$$\eta_{k+1}^{-1} = \eta_k^{-1} + \Delta \eta_k^{-1}.$$

Η επιλογή της $\Delta \eta_k^{-1}$ καθορίζει ουσιαστικά τη μέθοδο. Συνήθως η $\Delta \eta_k^{-1}$ είναι τάξης 1 ή 2.

1.3.3.1. Μέθοδος Broyden

Η μέθοδος προτάθηκε από τον C. G. Broyden [16] και είναι τάξης 1. Εκφράζεται με τον επαναληπτικό τύπο:

$$\eta_{k+1}^{-1} = \eta_k^{-1} + \frac{(\Delta x_k - \eta_k^{-1} \Delta g_k)(\Delta x_k - \eta_k^{-1} \Delta g_k)^T}{(\Delta x_k - \eta_k^{-1} \Delta g_k) \Delta g_k}, \quad \eta_0^{-1} = P_0^{-1}.$$

όπου P_0 συμμετρικός και θετικά ορισμένος πίνακας.

Μετά από n επαναλήψεις, σε τετραγωνικές συναρτήσεις και κάτω από ορισμένες συνθήκες, $\eta_n^{-1} = Q^{-1}$ και το t_k δεν χρειάζεται να είναι η παράμετρος που ελαχιστοποιεί την $f(x)$ κατά μήκος της $-\eta_k^{-1} g_k$. Ωστόσο, σε γενικές συναρτήσεις, η η_k^{-1} μπορεί να πάψει να είναι θετικά ορισμένη, ή το $\Delta \eta_k^{-1}$ μπορεί να είναι μη φραγμένο. Επίσης αν τύχει το $\Delta x_k = -t_k \eta_k^{-1} g_k$ να είναι στην διεύθυνση της προηγούμενης επανάληψης, ο η_{k+1}^{-1} γίνεται ιδιάζων ή απροσδιόριστος.

1.3.3.2. Μέθοδοι Pearson

Πρόκειται για μια μέθοδο τάξης 1, όπου:

$$\eta_{k+1}^{-1} = \eta_k^{-1} + (\Delta x_k - \eta_k^{-1} \Delta g_k) \frac{(\eta_k^{-1} \Delta g_k)^T}{(\Delta g_k)^T \eta_k^{-1} \Delta g_k}$$

ή

$$\eta_{k+1}^{-1} = \eta_k^{-1} + \frac{(\Delta x_k - \eta_k^{-1} \Delta g_k)(\Delta x_k)^T}{(\Delta x_k)^T \Delta g_k},$$

όπου $\eta_0^{-1} = P_0^{-1}$ με P_0 συμμετρικό και θετικά ορισμένο πίνακα [11].

1.3.3.3. Μέθοδος DFP

Πρόκειται για την πιο γνωστή μέθοδο τάξης 2. Πρόκειται για έναν αναδρομικό τύπο που προτάθηκε από τον Davidon [21] και τροποποιήθηκε από τους Fletcher και Powell [32]:

$$\eta_{k+1}^{-1} = \eta_k^{-1} + \frac{\Delta x_k (\Delta x_k)^T}{(\Delta x_k)^T \Delta g_k} - \frac{\eta_k^{-1} \Delta g_k (\Delta g_k)^T \eta_k^{-1}}{(\Delta g_k)^T \eta_k^{-1} \Delta g_k},$$

όπου $\eta_0^{-1} = P_0^{-1}$ με P_0 συμμετρικό και θετικά ορισμένο πίνακα.

Η μέθοδος DFP, σε τετραγωνική συνάρτηση, παράγει συζυγείς διευθύνσεις κι επομένως, μετά από n επαναλήψεις, $\eta_n^{-1} = Q^{-1}$ κι επιτυγχάνεται το ελάχιστο. Επίσης, αν η αρχική προσέγγιση P_0 της Εσσιανής είναι ένας συμμετρικός θετικά ορισμένος πίνακας, τότε η η_k^{-1} παραμένει πάντα συμμετρική και θετικά ορισμένη. Αυτές οι ιδιότητες ισχύουν μόνο όταν το ακριβές ελάχιστο της $f(x)$ βρίσκεται κατά μήκος της διεύθυνσης αναζήτησης σε κάθε διεύθυνση, κάτι που έχει μεγάλο υπολογιστικό κόστος. Επίσης βρέθηκε ότι η μέθοδος δέχεται και αρνητικά βήματα ή μπορεί και να τερματιστεί σε μη στάσιμο σημείο [4].

1.3.3.4. Μέθοδος Fletcher

Εδώ

$$\eta_{k+1}^{-1} = \left[I - \frac{\Delta x_k (\Delta g_k)^T}{(\Delta x_k)^T \Delta g_k} \right] \eta_k^{-1} \left[I - \frac{\Delta g_k (\Delta x_k)^T}{(\Delta x_k)^T \Delta g_k} \right] + \frac{\Delta x_k (\Delta x_k)^T}{(\Delta x_k)^T \Delta g_k}.$$

Η μέθοδος αυτή δεν έχει το χαρακτηριστικό του τετραγωνικού τερματισμού, αλλά $\eta_k^{-1} \rightarrow Q^{-1}$ για τετραγωνικές συναρτήσεις, με την έννοια ότι οι ιδιοτιμές της η_k^{-1} τείνουν σε αυτές της Q^{-1} [49].

1.3.4. Μη τετραγωνικά πρότυπα

Όλες οι παραπάνω μέθοδοι που παρουσιάστηκαν στηρίζονται σε τετραγωνικές πρότυπες συναρτήσεις. Πολλοί συγγραφείς πρότειναν αλγόριθμους που στηρίζονταν σε μη τετραγωνικά πρότυπα. Τέτοια είναι η ομογενής συνάρτηση των Jacobson και Oksman καθώς και η κωνική συνάρτηση του Davidon. Παρακάτω παρουσιάζεται η μέθοδος των Jacobson και Oksman, ενώ με την κωνική συνάρτηση θα ασχοληθούμε στο κεφάλαιο 3.

1.3.4.1. Η μέθοδος των Jacobson – Oksman

Ο αλγόριθμος στηρίζεται σε μια ομογενή πρότυπη συνάρτηση

$$f(x) = \frac{1}{\gamma} (x - \beta)^T g(x) + \bar{\omega},$$

όπου β είναι η θέση του ελαχίστου, $\bar{\omega} = f(\beta)$ και γ ο βαθμός ομοιογένειας [51, 52]. Οι διαδοχικές προσεγγίσεις του σημείου ελαχίστου προκύπτουν από τον τύπο:

$$x_{k+1} = x_k + t_k \sigma_\kappa (x_k - \beta_\kappa),$$

όπου $\sigma_\kappa (x_k - \beta_\kappa)^T g_k < 0$.

Τα διαδοχικά β_κ προκύπτουν από την επαναληπτική σχέση

$$\alpha_{k+1} = \alpha_k + \frac{P_k e_j (v_{k+1} - y_{k+1}^T \alpha_k)}{y_{k+1}^T P_k e_j}, \quad 1 \leq j \leq n+2,$$

όπου

$$\alpha_{k+1} = \begin{bmatrix} \beta_k^T & \gamma_k & \omega_k \end{bmatrix}^T,$$

$$\omega_k = \gamma_k \bar{\omega},$$

$$v_{k+1} = x_{k+1}^T g_{k+1},$$

$$y_{k+1} = \begin{bmatrix} g_{k+1}^T & f_{k+1} & -1 \end{bmatrix}^T$$

και ο P_k ενημερώνεται από

$$P_{k+1} = P_k - \frac{P_k e_j (y_{k+1}^T P_k - e_j^T)}{y_{k+1}^T P_k e_j}, \quad P_0 = I,$$

όπου e_j είναι ένα μοναδιαίο διάνυσμα με μονάδα στην j συνιστώσα και μηδέν αλλού.

Ο αλγόριθμος συγκλίνει σε $n+2$ επαναλήψεις σε ομογενείς συναρτήσεις. Για τυχαίες συναρτήσεις το j πρέπει να ξανατεθεί 1 μετά από $n+2$ επαναλήψεις.

1.3.5. Μέθοδοι άμεσης αναζήτησης

Πρόκειται για μεθόδους που δεν χρησιμοποιούν καθόλου παραγώγους. Η πιο γνωστή είναι η μέθοδος του Powell [80], η οποία ελαχιστοποιεί την αντικειμενική συνάρτηση κατά μήκος συζυγών διευθύνσεων. Μια άλλη μέθοδος παρουσιάζεται στο κεφάλαιο 2.

1.3.6. Μέθοδοι L-συναρτήσεων

Οι Davison και Wong [22] όρισαν ότι η $f(x)$ είναι μια L-συνάρτηση αν $f(x) = L(\rho)$, όπου $\rho = \rho(x)$ είναι μια τετραγωνική συνάρτηση του x και $\frac{dL}{d\rho} > 0$.

Η μέθοδός τους στηρίζεται στο γεγονός ότι $\frac{\partial f(x)}{\partial x} = \frac{dL(\rho)}{d\rho} \frac{\partial \rho(x)}{\partial x}$. Η κλίση της $f(x)$ είναι η κλίση μιας τετραγωνικής συνάρτησης επί ένα θετικό βαθμωτό. Η μέθοδος χρησιμοποιεί συζυγείς κλίσεις κι έτσι τερματίζει σε πεπερασμένο αριθμό επαναλήψεων σε L-συναρτήσεις.

1.3.7. Καμπυλόγραμμες τροχιές

Πολλοί συγγραφείς στο παρελθόν επισήμαναν ότι θα έπρεπε τα διανύσματα, κατά μήκος των οποίων παίρνουμε τις διαδοχικές προσεγγίσεις, όταν ελαχιστοποιούμε μια συνάρτηση επαναληπτικά, να αντικατασταθούν με καμπυλόγραμμες τροχιές. Δηλαδή, να αντικαταστήσουμε τον αναδρομικό τύπο $x_{k+1} = x_k - t_k d_k$, από την

$$x_{k+1} = x_k + p(x_k, t_k)$$

όπου $p(x_k, t)$ δεν είναι διάνυσμα, αλλά μια καμπύλη στον x -χώρο.

Ο Μπότσαρης στα [11] και [12] ανέπτυξε μία μέθοδο παραγωγής τέτοιων καμπυλών, μέσω της επίλυσης συστημάτων διαφορικών εξισώσεων αρχικών τιμών, που αυτές οι καμπύλες ικανοποιούν. Η μη γραμμικότητα των διαφορικών εξισώσεων οδηγεί στην παραγωγή προσεγγιστικών λύσεων, όμως αν ήταν διαθέσιμη η πραγματική καμπύλη-λύση μιας διαφορικής εξίσωσης, το ελάχιστο θα βρισκόταν σε μία μόνο επανάληψη για κάθε συνάρτηση.

Κεφάλαιο 2

Η ΜΕΘΟΔΟΣ OPT-BIS

Στο κεφάλαιο αυτό παρουσιάζεται ένας αλγόριθμος για την ελαχιστοποίηση συναρτήσεων χωρίς περιορισμούς που στηρίζεται σε μια τροποποιημένη μονοδιάστατη μέθοδο διχοτόμησης. Η μέθοδος συγκλίνει σε μία επανάληψη σε τετραγωνικές συναρτήσεις n μεταβλητών, ελαχιστοποιεί γρήγορα γενικές συναρτήσεις και δεν απαιτεί υπολογισμό ή εκτίμηση Εσσιανής. Η μέθοδος αυτή εφαρμόζεται και σε προβλήματα, όπου οι τιμές της αντικειμενικής συνάρτησης και των παραγώγων της δεν είναι γνωστές με απόλυτη ακρίβεια. Στο τέλος του κεφαλαίου παρουσιάζονται αριθμητικά αποτελέσματα που προέκυψαν από την εφαρμογή της μεθόδου σε γνωστές συναρτήσεις ελέγχου και συγκρίνεται με άλλες γνωστές μεθόδους.

2.1. Εισαγωγή

Για να βρούμε ένα σημείο x^* που να ελαχιστοποιεί μια δοσμένη συνάρτηση $f: D \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ σε ένα συγκεκριμένο χωρίο D , θα προσπαθήσουμε να δημιουργήσουμε μια ακολουθία σημείων $x^{(k)}$, $k = 0, 1, K$ η οποία να συγκλίνει στο x^* .

Έτσι, χρησιμοποιώντας ένα αυθαίρετα επιλεγμένο αρχικό σημείο $x^{(0)} = (x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, \dots, x_n^{(0)}) \in D$, λύνουμε την μονοδιάστατη εξίσωση

$$f(x_1, x_2^{(0)}, \dots, x_n^{(0)}) - f(x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, \dots, x_n^{(0)}) = 0 \quad (2.1)$$

ως προς x_1 κρατώντας σταθερές τις τιμές όλων των άλλων συντεταγμένων. Αν $\hat{x}_1$ είναι η λύση της παραπάνω εξίσωσης, τότε το σημείο $(\hat{x}_1, x_2^{(0)}, \dots, x_n^{(0)})$ έχει την ίδια συναρτησιακή τιμή με το $x^{(0)}$, δηλαδή ανήκει στην ισοϋψή γραμμή του $x^{(0)}$. Αν υποθέσουμε ότι ο Εσσιανός πίνακας της f στο x^* είναι θετικά ορισμένος, μπορούμε να ισχυριστούμε ότι κάθε σημείο του ευθύγραμμου τμήματος με άκρα τα $x^{(0)}$ και $(\hat{x}_1, x_2^{(0)}, \dots, x_n^{(0)})$ έχει μικρότερη συναρτησιακή τιμή από τα άκρα αυτά. Έτσι μπορούμε να επιλέξουμε ένα τέτοιο σημείο, για παράδειγμα το

$$x_1^{(1)} = x_1^{(0)} + \gamma(\hat{x}_1 - x_1^{(0)}), \quad \gamma \in (0, 1)$$

και να λύσουμε την διάστασης ένα εξίσωση

$$f(x_1^{(1)}, x_2, x_3^{(0)}, \dots, x_n^{(0)}) - f(x_1^{(1)}, x_2^{(0)}, \dots, x_n^{(0)}) = 0 \quad (2.2)$$

ως προς x_2 κρατώντας σταθερές τις τιμές όλων των άλλων συντεταγμένων. Έστω $\hat{x}_2$ η λύση της παραπάνω εξίσωσης. Μια καλύτερη προσέγγιση της δευτέρας συντεταγμένης είναι

$$x_2^{(1)} = x_2^{(0)} + \gamma(\hat{x}_2 - x_2^{(0)}), \quad \gamma \in (0, 1)$$

Συνεχίζοντας την διαδικασία αυτή και για τις υπόλοιπες συντεταγμένες παίρνουμε το σημείο $x^{(1)} = (x_1^{(1)}, x_2^{(1)}, \dots, x_n^{(1)})$.

Αντικαθιστούμε το αρχικό σημείο $x^{(0)}$ με το $x^{(1)}$, και επαναλαμβάνουμε την όλη διαδικασία για να υπολογίσουμε το $x^{(2)}$ κ. ο. κ. μέχρι το σημείο που θα πληρεί τις προϋποθέσεις ακρίβειας που έχουμε θέσει.

Μια γεωμετρική ερμηνεία της μεθόδου φαίνεται στο σχήμα 1 παρακάτω.

ΣΧΗΜΑ 1

Στο παρακάτω σχήμα παρουσιάζεται η εξέλιξη της μεθόδου OPTBIS για $\gamma = \frac{1}{2}$ για την συνάρτηση Broyden για $n = 2$, όπου $A = (x_1^{(0)}, x_2^{(0)})$, $B = (\hat{x}_1, x_2^{(0)})$, $\Gamma = (x_1^{(1)}, x_2^{(0)})$, με $x_1^{(1)} = \frac{\hat{x}_1 + x_1^{(0)}}{2}$, $\Delta = (x_1^{(1)}, \hat{x}_2)$, $E = (x_1^{(1)}, x_2^{(1)})$, με $x_2^{(1)} = \frac{\hat{x}_2 + x_2^{(0)}}{2}$ και $Z = (x_1^{(2)}, x_2^{(2)})$.

Για να λύσουμε τις παραπάνω μονοδιάστατες εξισώσεις (2.1), (2.2) κ.λ.π., χρησιμοποιούμε την επαναληπτική διαδικασία που παρουσιάζεται στο παράρτημα, αν και αυτό δεν είναι δεσμευτικό.

Με την διαδικασία αυτή μπορούμε να βρούμε επίσης τοπικά μέγιστα. Όμως αν, κατά τη διχοτόμηση, επιλέγουμε τα άκρα a και b έτσι ώστε στο αριστερό άκρο a η i -οστή συντεταγμένη της κλίσης να έχει αρνητική τιμή ή στο δεξιό άκρο b η i -οστή συντεταγμένη της κλίσης να έχει θετική τιμή, τότε σίγουρα η νέα μέθοδος θα δώσει τοπικό ελάχιστο. Αυτό μπορεί να επιτευχθεί εύκολα παίρνοντας τα άκρα a και b από τις σχέσεις

$$a = x_1^{(k)} - \frac{1}{2} \left\{ 1 + \operatorname{sgn} \partial_i f(x^{(k)}) \right\} h_i \quad \text{και} \quad b = a + h_i \quad (2.3)$$

όπου ∂_i είναι η i -οστή συνιστώσα της κλίσης και h_i είναι το αντίστοιχο μήκος βήματος.

Η ύπαρξη των σημείων $\hat{x}_i$ μπορεί να ελεγχθεί, κοιτώντας αν το επαναληπτικό σχήμα της τροποποιημένης μεθόδου διχοτόμησης συγκλίνει στο δεξιό άκρο b , ή τα πρόσημα των συναρτησιακών τιμών στα άκρα a και b είναι τα ίδια. Αν συμβεί κάτι τέτοιο, μπορούμε να εφαρμόσουμε μερικά βήματα της μεθόδου Armijo και μετά να ξαναδοκιμάσουμε με την δική μας μέθοδο. Στην πράξη φάνηκε ότι στις περισσότερες των περιπτώσεων κάτι τέτοιο δεν είναι απαραίτητο.

2.2. Ο Αλγόριθμος

Στα παρακάτω f είναι η αντικειμενική συνάρτηση, $x^{(0)} = (x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, K, x_n^{(0)})$ το αρχικό σημείο, $h = (h_1, h_2, K, h_n)$ τα αρχικά μήκη βήματος σε κάθε συντεταγμένη, γ και ζ συντελεστές χαλάρωσης, MIT ο μέγιστος αριθμός επαναλήψεων που απαιτούνται, MAR ο μέγιστος αριθμός επαναλήψεων του αλγόριθμου Armijo που απαιτούνται, και δ, ε οι προκαθορισμένες επιθυμητές ακρίβειες.

ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ 2	OPTBIS
<i>Βήμα 1:</i>	Εισαγωγή δεδομένων $\{ f; x^{(0)}; h; \gamma; \zeta; MIT; MAR; \delta; \varepsilon \}$.
<i>Βήμα 2:</i>	Θέτουμε $k = -1$.
<i>Βήμα 3:</i>	Θέτουμε $i = 0$.
<i>Βήμα 4:</i>	Αν $k < MIT$, αντικαθιστούμε το k με το $k+1$ και συνεχίζουμε στο Βήμα 5. Αλλιώς πηγαίνουμε στο Βήμα 16.
<i>Βήμα 5:</i>	Αντικαθιστούμε το i με το $i+1$.
<i>Βήμα 6:</i>	Υπολογίζουμε τα άκρα a και b από τις σχέσεις (2.3).
<i>Βήμα 7:</i>	Υπολογίζουμε μια προσεγγιστική λύση $\hat{x}$ της $f(x_1^{(k+1)}, K, x_{i-1}^{(k+1)}, x, x_{i+1}^{(k)}, K, x_n^{(k)}) -$ $- f(x_1^{(k+1)}, K, x_{i-1}^{(k+1)}, x_i^k, x_{i+1}^{(k)}, K, x_n^{(k)}) = 0$ εφαρμόζοντας το επαναληπτικό σχήμα $x^{(p+1)} = x^{(p)} + \operatorname{sgn} f(x^{(0)}) \operatorname{sgn} f(x^{(p)}) \frac{h}{2^{p+1}}, \quad p = 0, 1, K,$ στο (a, b) με ακρίβεια δ .

- Βήμα 8:* Αν $\hat{x} \geq b - \delta$, θέτουμε $y^0 = (x_1^{(k+1)}, K, x_{i-1}^{(k+1)}, x_i^{(k)}, x_{i+1}^{(k)}, K, x_n^{(k)})$ και πηγαίνουμε στο Βήμα 14. Αλλιώς συνεχίζουμε με το επόμενο βήμα.
- Βήμα 9:* Θέτουμε $x_i^{(k+1)} = x_i^{(k)} + \gamma(\hat{x} - x_i^{(k)})$.
- Βήμα 10:* Αν $i < n$, πηγαίνουμε στο Βήμα 5.
- Βήμα 11:* Αν $\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\| \leq \varepsilon$, πηγαίνουμε στο Βήμα 16.
- Βήμα 12:* Θέτουμε $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \zeta(x^{(k+1)} - x^{(k)})$.
- Βήμα 13:* Αν $\text{sgn}(f(x^{(k+1)}) - f(x^{(k)})) \leq 0$, πηγαίνουμε στο Βήμα 3. Αλλιώς θέτουμε $y^0 = x^{(k)}$ και συνεχίζουμε με το επόμενο βήμα.
- Βήμα 14:* Εφαρμόζουμε τον αλγόριθμο Armijo με αρχική τιμή y^0 και έστω y^{MAR} το εξαγόμενο.
- Βήμα 15:* Θέτουμε $x^{(k+1)} = y^{MAR}$ και πηγαίνουμε στο Βήμα 3.
- Βήμα 16:* Έξοδος $\left\{ x^{(k)} ; f(x^{(k)}) ; \nabla f(x^{(k)}) \right\}$.

Όταν οι τιμές της αντικειμενικής συνάρτησης ή των παραγώγων είναι αρκετά ακριβείς, μπορούμε στο Βήμα 11 του αλγορίθμου να χρησιμοποιήσουμε και ένα από τα παρακάτω κριτήρια:

$$(1): \left| \frac{f(x^{(k+1)}) - f(x^{(k)})}{f(x^{(k)})} \right| \leq \varepsilon$$

$$(2): \left\| \nabla f(x^{(k+1)}) \right\| \leq \varepsilon.$$

Στον παραπάνω αλγόριθμο τα γ και ζ επιλέγονται στην αρχή και διατηρούνται σταθερά σε όλη την διάρκεια της διαδικασίας. Μπορούμε, ωστόσο να χρησιμοποιήσουμε διαφορετικούς συντελεστές χαλάρωσης γ_i^k και ζ_i^k σε κάθε επανάληψη ή ακόμα και για κάθε συντεταγμένη.

Όταν οι τιμές των παραγώγων είναι ακριβείς, μια εκτίμηση της παραμέτρου χαλάρωσης γ στο Βήμα 9 του αλγορίθμου μπορεί να ληφθεί χρησιμοποιώντας, για παράδειγμα, την i -συντεταγμένη του σημείου τομής των γραμμών που

προσδιορίζονται από τα σημεία $\hat{x}$ και $x_i^{(k)}$, και τις αντίστοιχες τιμές της i -οστής συντεταγμένης της κλίσης. Σε αυτήν την περίπτωση, ο συντελεστής γ λαμβάνεται έτσι ώστε το σημείο $x_i^{(k+1)}$ στο Βήμα 9 του αλγορίθμου να είναι το

$$x_i^{(k+1)} = \frac{x_i^{(k)} \partial_i f(p_1) - \hat{x} \partial_i f(p_2)}{\partial_i f(p_1) - \partial_i f(p_2)},$$

όπου $p_1 = (x_1^{(k+1)}, K, x_{i-1}^{(k+1)}, x_i^{(k)}, x_{i+1}^{(k)}, K, x_n^{(k)})$ και $p_2 = (x_1^{(k+1)}, K, x_{i-1}^{(k+1)}, \hat{x}, x_{i+1}^{(k)}, K, x_n^{(k)})$. Έτσι παίρνουμε μια εκτίμηση του γ σε κάθε επανάληψη και για κάθε συντεταγμένη με τη βοήθεια της σχέσης:

$$\gamma_i^k = \frac{\partial_i f(p_2)}{\partial_i f(p_2) - \partial_i f(p_1)}.$$

Ομοίως, μια εκτίμηση της παραμέτρου χαλάρωσης ζ στο Βήμα 12 του αλγορίθμου, μπορεί να ληφθεί με χρήση των τιμών της i -συντεταγμένης της κλίσης στα σημεία $x^{(k)}$ και $x^{(k+1)}$, και ελαχιστοποιώντας την μονοδιάστατη τετραγωνική συνάρτηση που προκύπτει. Σε αυτήν την περίπτωση μια εκτίμηση του συντελεστή ζ λαμβάνεται έτσι ώστε το σημείο $x_i^{(k+1)}$ στο Βήμα 12 του αλγορίθμου να είναι το

$$x_i^{(k+1)} = \frac{x_i^{(k+1)} \partial_i f(x^{(k)}) - x_i^{(k)} \partial_i f(x^{(k+1)})}{\partial_i f(x^{(k)}) - \partial_i f(x^{(k+1)})}$$

Έτσι, σε αυτήν την περίπτωση μπορούμε να έχουμε μια εκτίμηση του ζ σε κάθε επανάληψη και για κάθε συντεταγμένη χρησιμοποιώντας την παρακάτω σχέση:

$$\zeta_i^k = \frac{\partial_i f(x^{(k)})}{\partial_i f(x^{(k)}) - \partial_i f(x^{(k+1)})}.$$

2.3. Σύγκλιση του αλγόριθμου

Θεώρημα 2.1:

Ας υποθέσουμε ότι η $F = (f_1, K, f_n) : \mathcal{D} \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ είναι συνεχώς διαφορίσιμη σε μια ανοιχτή γειτονιά $\mathfrak{D}_0 \subset \mathcal{D}$ ενός σημείου $x^* \in \mathcal{D}$ για το οποίο $F(x^*) = \Theta^n$. Θεωρούμε την ανάλυση της Ιακωβιανής $F'(x)$ στα τρία μέρη της: το διαγώνιο, το αυστηρά κάτω τριγωνικό και το αυστηρά άνω τριγωνικό.

$$F'(x) = D(x) - L(x) - U(x).$$

Υποθέτουμε επιπλέον ότι ο $D(x^*)$ είναι μη ιδιάζων και $\rho(\Phi_\omega(x^*)) < 1$, όπου $\rho(A)$ είναι η φασματική ακτίνα του A και όπου το $\Phi_\omega(x)$ ορίζεται από τη σχέση

$$\Phi_\omega(x) = [D(x) - \omega L(x)]^{-1} [(1 - \omega)D(x) + \omega U(x)],$$

με $\omega > 0$. Τότε υπάρχει μια ανοιχτή σφαίρα $\mathfrak{S} = \mathfrak{S}(x^*, r)$ στην $\mathfrak{S}_0$, (όπου $\mathfrak{S}(x^*, r)$ είναι η ανοιχτή σφαίρα με κέντρο x^* και ακτίνα r), τέτοια ώστε, για κάθε $x^0 \in \mathfrak{S}$, υπάρχει μια μοναδική ακολουθία $\{x^k\} \subset \mathfrak{S}$ η οποία ικανοποιεί τις προϋποθέσεις της μη γραμμικής SOR ώστε $\lim_{k \rightarrow \infty} x^k = x^*$.

Απόδειξη

Βλ. [72] σελ. 326

Πόρισμα 2.2:

Ας υποθέσουμε ότι η $F = (f_1, K f_n): \mathfrak{D} \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ είναι συνεχώς διαφορίσιμη σε μια ανοιχτή γειτονιά $\mathfrak{S}_0 \subset \mathfrak{D}$ ενός σημείου $x^* \in \mathfrak{D}$ για το οποίο $F(x^*) = \Theta^n$. Ας υποθέσουμε, επιπλέον, ότι η Ιακωβιανή $F'(x^*)$ είναι συμμετρική και θετικά ορισμένη. Τότε υπάρχει μια ανοιχτή σφαίρα $\mathfrak{S} = \mathfrak{S}(x^*, r)$ στην $\mathfrak{S}_0$ τέτοια, ώστε το x^* να είναι σημείο συσσώρευσης του μη γραμμικού σχήματος SOR, για κάθε $x^0 \in \mathfrak{S}$ και για κάθε $\omega \in (0, 2)$.

Απόδειξη

Θεωρούμε την ανάλυση

$$F'(x) = D(x) - L(x) - U(x).$$

Αφού η $F'(x^*)$ είναι συμμετρική και θετικά ορισμένη, τότε ο $D(x^*)$ είναι μη ιδιάζων. Σύμφωνα με το θεώρημα του Ostrowski θα είναι $\rho(\Phi_\omega(x^*)) < 1$ για κάθε $\omega \in (0, 2)$. Και σύμφωνα με το προηγούμενο θεώρημα, το πόρισμα έχει αποδειχτεί.

Θεώρημα 2.3:

Έστω $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ μία συνάρτηση δύο φορές συνεχώς διαφορίσιμη σε μια ανοιχτή γειτονιά $\mathfrak{S}_0 \subset \mathfrak{D}$ ενός σημείου $x^* \in \mathfrak{D}$ για το οποίο $\nabla f(x^*) = \Theta^n$ και η $\nabla^2 f(x^*)$ είναι θετικά ορισμένη. Τότε υπάρχει μια ανοιχτή σφαίρα $\mathfrak{S} = \mathfrak{S}(x^*, r)$ στην $\mathfrak{S}_0$ τέτοια, ώστε η ακολουθία $\{x^k\}$ που γεννιέται από τον αλγόριθμό μας να συγκλίνει στο σημείο x^* που ελαχιστοποιεί την f .

Απόδειξη

Είναι φανερό ότι οι αναγκαίες και ικανές συνθήκες ώστε το σημείο x^* να είναι σημείο τοπικού ελαχίστου της συνάρτησης f ικανοποιούνται από την υπόθεση $\nabla f(x^*) = \Theta^n$ και την υπόθεση ότι η Εσσιανή είναι θετικά ορισμένη στο x^* . Η εύρεση ενός τέτοιου σημείου είναι ισοδύναμη με την εύρεση της λύσης $x^* \in \mathfrak{D}$ της εξίσωσης

$$\nabla f(x) = \Theta^n$$

ή ισοδύναμα με την επίλυση του παρακάτω συστήματος εξισώσεων:

$$\begin{aligned} \partial_1 f(x_1, x_2, K, x_n) &= 0 \\ \partial_2 f(x_1, x_2, K, x_n) &= 0 \\ &\dots\dots\dots \\ \partial_n f(x_1, x_2, K, x_n) &= 0 \end{aligned} \quad (2.4)$$

Εφαρμόζοντας την μη γραμμική SOR μέθοδο στο σύστημα (2.4), βρίσκουμε στην (k+1) επανάληψη μια λύση $\hat{x}_i$ της μονοδιάστατης εξίσωσης

$$\partial_i f(x_1^{(k+1)}, K, x_{i-1}^{(k+1)}, x, x_{i+1}^{(k)}, K, x_n^{(k)}) = 0$$

και θέτουμε

$$x_i^{(k+1)} = x_i^{(k)} + \omega(\hat{x}_i - x_i^{(k)}), \quad \omega \in (0, 2).$$

Προφανώς, η ακολουθία των παραπάνω σημείων $x^{(k)}$ μπορεί να γεννηθεί από τον αλγόριθμό μας για κάποιες τιμές των γ και ζ .

Αφού η $\nabla^2 f(x^*)$ είναι συμμετρική και θετικά ορισμένη, τότε το x^* είναι σημείο συσσώρευσης της ακολουθίας.

2.4. Αριθμητικά αποτελέσματα

Ο αλγόριθμος που παρουσιάστηκε παραπάνω εφαρμόστηκε χρησιμοποιώντας ένα πρόγραμμα FORTRAN με το όνομα OPTBIS (OPTimization BISection). Το πρόγραμμα ελέγχθηκε σε σύστημα HP-715 και σε IBM PC συμβατό υπολογιστή σε διάφορα προβλήματα διαφόρων διαστάσεων. Ο αλγόριθμος συμπεριφέρεται αξιόπιστα και τα αποτελέσματα ήταν ικανοποιητικά. Παρακάτω χρησιμοποιούνται τα παρακάτω σύμβολα:

- n : διάσταση
- $x^0 = (x_1, x_2, K, x_n)$: αρχικό σημείο
- $h = (h_1, h_2, K, h_n)$: αρχικά μήκη βήματος ανά συντεταγμένη
- $x^* = (x_1^*, x_2^*, K, x_n^*)$: προσέγγιση του σημείου τοπικού ελαχίστου
- IT : συνολικός αριθμός επαναλήψεων
- FE : συνολικός αριθμός συναρτησιακών υπολογισμών
- ASF : συνολικός αριθμός αλγεβρικών προσήμων της συνάρτησης που απαιτούνται.
- ASG : συνολικός αριθμός αλγεβρικών προσήμων των συνιστωσών της κλίσης.

Στους παρακάτω πίνακες συγκρίνουμε την απόδοση της μεθόδου OPTBIS με μεθόδους steepest descent, μεθόδους συζυγών κλίσεων και μεθόδους μεταβλητής μετρικής. Ο δείκτης α υποδεικνύει το κλασικό αρχικό σημείο. Η ένδειξη D δηλώνει απόκλιση ή μη σύγκλιση μετά από 50000 επαναλήψεις. Οι μέθοδοι με τις οποίες συγκρίνεται η OPTBIS είναι των Armijo [2], Fletcher – Reeves (FR) [33, 82], Polak – Ribiere (PR) [79, 82], και Broyden – Fletcher – Goldfarb – Shanno (BFGS) [82]. Όλες οι μέθοδοι εφαρμόστηκαν σε διάφορες συναρτήσεις ελέγχου και σε διάφορα αρχικά σημεία. Η ακρίβεια που απαιτήθηκε είναι $\varepsilon = 10^{-8}$.

Οι τύποι καθώς και τα ακρότατα των συναρτήσεων ελέγχου, παρουσιάζονται στο Παράρτημα Β.

Παράδειγμα 2.1: Τετραγωνική Συνάρτηση με $n = 4$ και $r = 100$.

x^0	Armijo		FR		PR		BFGS		OPTBIS		
	IT	FE	IT	FE	IT	FE	IT	FE	IT	ASF	ASG
(-1, 1, 1, -1)	17	123	3	93	3	170	2	67	1	29	4
(10, 20, 30, 40)	22	158	3	92	3	100	2	70	1	29	4
(-20, 40, -60, 80)	23	165	3	93	3	99	2	69	1	29	4
(-50, -25, -50, -25)	22	158	3	93	3	171	2	69	1	29	4
(80, -80, -80, 80)	23	165	3	93	3	169	2	67	1	29	4
(99.99, 99.99, 99.99, 99.99)	23	165	3	93	3	169	2	67	1	29	4

Παράδειγμα 2.2: Συνάρτηση Όλυμπος.

Σ' αυτό το παράδειγμα με TFE σημειώνουμε το πλήθος των όρων $\frac{\left(\frac{x}{2}\right)^{2k+1}}{k!(k+1)!}$ που απαιτούνται για να υπολογίσουμε τις τιμές της αντικειμενικής συνάρτησης και των παραγώγων της με την προκαθορισμένη ακρίβεια.

x^0	Armijo		FR		PR		BFGS		OPTBIS	
	IT	TFE	IT	TFE	IT	TFE	IT	TFE	IT	TFE
(-5, -5)	D		3	644	3	676	3	558	3	51
(2, 2)	29	153	3	961	3	995	3	1094	7	119
(-2, 4)	28	391	D		9	630	6	470	5	85
(-10, 10)	52	3964	3	2273	3	2489	3	2047	7	119
(50, -20)	D		D		D		D		6	102
(100, 100)	D		D		D		D		2	34

Παράδειγμα 2.3: Συνάρτηση *Watson*.

x^0	Armijo		FR		PR		BFGS		OPTBIS		
	IT	FE	IT	FE	IT	FE	IT	FE	IT	ASF	ASG
$(0, 0)^a$	14	121	9	159	7	132	6	98	4	60	8
$(-1, -1)$	17	160	9	165	7	151	6	101	3	45	6
$(-5, 1)$	21	205	12	214	8	146	7	114	3	45	6
$(2, -1)$	18	164	9	172	8	148	7	115	6	90	12
$(3, 4)$	21	216	12	230	8	184	7	129	6	90	12
$(1000, 1000)$	63	1036	17	388	11	262	10	195	5	75	10

Παράδειγμα 2.4: Συνάρτηση *Powell badly scaled*.

x^0	Armijo		FR		PR		BFGS		OPTBIS		
	IT	FE	IT	FE	IT	FE	IT	FE	IT	ASF	ASG
$(1, 1)^a$	D		D		D		D		5	75	10
$(-1, 1)$	D		D		D		D		5	75	10
$(2, 2)$	D		D		D		D		5	75	10
$(10000, 1)$	D		D		D		15	238	2	30	4
$(-1000, 1000)$	D		D		D		25	405	6	90	12
$(10^7, 1)$	D		D		D		D		2	30	4

Παράδειγμα 2.5: Ιδιάζουσα συνάρτηση *Weber – Werner*.

x^0	Armijo		FR		PR		BFGS		OPTBIS		
	IT	FE	IT	FE	IT	FE	IT	FE	IT	ASF	ASG
$(2, -1)^a$	81	284	74	942	12	192	14	216	7	105	14
$(-1, 1)$	80	266	49	649	11	185	11	178	2	30	4
$(1.1, 1.1)$	69	217	41	537	12	182	12	178	2	30	4
$(-1, -1)$	80	262	52	695	17	257	17	266	5	75	10
$(2, 0)$	88	300	79	1008	12	194	10	164	2	30	4
$(-1000, 1.1)$	117	1370	D		D		D		3	45	6

Παράδειγμα 2.6: Συνάρτηση *Kearfott*.

x^0	Armijo		FR		PR		BFGS		OPTBIS		
	IT	FE	IT	FE	IT	FE	IT	FE	IT	ASF	ASG
(1, 1)	9	72	10	138	7	101	6	82	2	30	4
(1.2, 0.6)	15	106	10	140	6	88	5	72	2	30	4
(1, 0.5)	17	120	7	104	6	93	5	76	2	30	4
(-1, -1)	9	72	10	138	7	101	6	82	2	30	4
(1.5, 1.5)	16	116	9	129	7	104	6	87	3	45	6
(100, -1000)	35	477	7	151	7	151	7	151	2	30	4

Παράδειγμα 2.7: Συνάρτηση *Broyden banded* ($n = 2$).

x^0	Armijo		FR		PR		BFGS		OPTBIS		
	IT	FE	IT	FE	IT	FE	IT	FE	IT	ASF	ASG
$(-1, -1)^a$	14	136	4	103	4	78	3	51	3	45	6
$(-1, -2)$	18	198	11	187	7	131	7	121	3	45	6
$(-3, -4)$	20	236	10	190	8	157	8	150	4	60	8
$(-1, -4)$	22	276	8	145	7	132	6	113	4	60	8
(100, 200)	42	933	D		D		D		4	60	8
(1000, -1)	53	1409	D		D		D		3	45	6

Παράδειγμα 2.8: Συνάρτηση *Broyden banded* ($n = 3$).

x^0	Armijo		FR		PR		BFGS		OPTBIS		
	IT	FE	IT	FE	IT	FE	IT	FE	IT	ASF	ASG
$(-1, -1, -1)^a$	15	162	11	183	8	137	7	120	4	88	12
(10, -10, 10)	32	468	335	5789	16	294	13	228	9	198	27
(0, 10000, 0)	62	1563	D		D		D		6	132	18
(0, 0, 500)	53	1298	D		D		D		10	220	30
(-100, -200, -300)	46	1093	D		D		D		9	198	27
(-0.4, -0.5, 1000)	55	1492	D		D		D		6	132	18

Παράδειγμα 2.9: Τριγωνομετρική συνάρτηση ($n = 3$).

x^0	Armijo		FR		PR		BFGS		OPTBIS		
	IT	FE	IT	FE	IT	FE	IT	FE	IT	ASF	ASG
$(3^{-1}, 3^{-1}, 3^{-1})^a$	50	211	167	2652	13	199	11	168	5	110	15
(1, 1, 1)	41	188	184	2741	16	241	11	175	6	132	18
(1, -1, 1)	33	166	57	864	13	211	14	229	5	110	15
(-0.25, -0.5, -0.75)	14	93	14	209	7	112	8	127	4	88	12
(-1, -1, -1)	16	109	24	357	11	182	10	168	1	22	3
(-2, 3, -4)	39	191	12	182	12	182	10	160	5	110	15

Παράδειγμα 2.10: Γραμμική συνάρτηση τάξης 1 ($n = 3$).

x^0	Armijo		FR		PR		BFGS		OPTBIS		
	IT	FE	IT	FE	IT	FE	IT	FE	IT	ASF	ASG
$(1, 1, 3^{-1})^a$	12	156	3	68	3	155	2	54	2	44	6
(-1, -1, -1)	12	156	3	68	3	144	2	54	2	44	6
(1, 2, 3)	13	168	3	69	3	153	2	53	2	44	6
(-1, 1, -1)	12	155	3	77	3	127	2	46	1	22	3
(10, 20, 30)	14	182	3	75	3	146	2	46	2	44	6
(1000, -1000, -1000)	17	220	3	61	3	112	2	40	1	22	3

Παράδειγμα 2.11: Συνάρτηση ποινής 1 ($n = 4$).

x^0	Armijo		FR		PR		BFGS		OPTBIS		
	IT	FE	IT	FE	IT	FE	IT	FE	IT	ASF	ASG
$(1, 2, 3, 4)^a$	17	150	2017	43123	82	1491	84	1468	1	29	4
(3, 3, 3, 3)	19	165	4	96	4	98	3	71	1	29	4
(2, 4, 6, 8)	19	181	30	540	22	404	21	384	1	29	4
(10, 20, 30, 40)	23	255	30	541	19	360	18	348	1	29	4
(-100, 100, -100, 100)	27	345	194	3657	55	991	57	996	1	29	4
(100, 200, 300, 400)	30	423	2015	43093	81	1478	3	86	1	29	4

Παράδειγμα 2.12: Συνάρτηση Μπότσαρη ($n = 10$).

x^0	Armijo		FR		PR		BFGS		OPTBIS		
	IT	FE	IT	FE	IT	FE	IT	FE	IT	ASF	ASG
$(-1.2, -1, \dots, -1.2, -1)^a$	1064	11854	10	334	10	331	13	359	4	284	40
$(4, 4, 4, 4, 4, 3, 3, 3, 3, 3)$	1284	14549	14	506	17	696	119	2851	5	355	50
$(-2, \dots, -2)$	1055	11835	13	439	12	412	18	498	4	284	40
$(-3, 3, \dots, -3, 3)$	866	9709	12	418	13	454	49	1199	5	355	50
$(-5, -4, \dots, -5, -4)$	1066	12257	D		D		D		5	355	50
$(-6, \dots, -6)$	1068	12405	D		D		D		5	355	50

Κεφάλαιο 3

ΚΩΝΙΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ ΕΛΑΧΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗΣ ΧΩΡΙΣ ΠΕΡΙΟΡΙΣΜΟΥΣ

Σε αυτό το κεφάλαιο παρουσιάζονται κωνικοί αλγόριθμοι για την χωρίς περιορισμούς ελαχιστοποίηση μιας συνεχώς διαφορίσιμης συνάρτησης $f(x)$ με n μεταβλητές. Αυτοί οι αλγόριθμοι είναι βασισμένοι σε μια κωνική πρότυπη συνάρτηση, η οποία δεν περιλαμβάνει την Εσσιανή της πρότυπης συνάρτησης. Παρουσιάζεται η κωνική μέθοδος των Μπακόπουλου και Μπότσαρη, και στη συνέχεια δύο νέες κωνικές μέθοδοι που βασίστηκαν σε αυτήν. Στην πρώτη, η κωνική μέθοδος συνδυάζεται με ένα μη μονότονο line search τύπου Newton και το βήμα αναζήτησης των Barzilai και Borwein. Στη δεύτερη, χρησιμοποιείται για το line search η μέθοδος ελάττωσης διάστασης DROPT. Και στις δύο περιπτώσεις η κλασική κωνική μέθοδος επιταχύνεται σημαντικά.

3.1. Γενικά

Το γενικό πρόβλημα που εξετάζουμε είναι

$$\min f(x), \quad x \in \mathbb{R}^n$$

όπου $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, είναι μια συνεχώς διαφορίσιμη συνάρτηση n μεταβλητών.

Οι τυποποιημένες μέθοδοι για ελαχιστοποίηση χωρίς περιορισμούς είναι βασισμένες σε ένα τετραγωνικό πρότυπο της μορφής:

$$q(x) = \frac{1}{2}(x - \beta)^T Q(x - \beta) + q(\beta)$$

όπου β είναι η θέση του ελάχιστου και Q είναι ένας $n \times n$ σταθερός θετικά ορισμένος πίνακας των δεύτερων μερικών παραγώγων της $q(x)$, η εσσιανή.

Κάποιοι συγγραφείς στο παρελθόν χρησιμοποίησαν μη-τετραγωνικούς αλγόριθμους για ελαχιστοποίηση συναρτήσεων. Οι Jacobson και Oksman [51] παρουσίασαν ένα ομογενές μοντέλο της μορφής

$$h(x) = \frac{1}{\gamma} \nabla h(x)(x - \beta) + h(\beta),$$

όπου γ ο βαθμός της ομογένειας. Ο Davidon [21] εισήγαγε κωνικά πρότυπα για ελαχιστοποίηση χωρίς περιορισμούς.

Μια κωνική συνάρτηση είναι της μορφής:

$$c(x) = \frac{1}{2} \frac{x^T Q x}{(1 + p^T x)^2} + \frac{b^T x}{1 + p^T x} + \alpha, \quad (3.1)$$

όπου Q είναι ένας $n \times n$ συμμετρικός πίνακας και $p \in \mathbb{R}^n$ είναι το διάνυσμα που ορίζει τον ορίζοντα της κωνικής συνάρτησης, δηλ. το υπερεπίπεδο όπου η $c(x)$ παίρνει άπειρη τιμή, και το οποίο καθορίζεται από την εξίσωση: $1 + p^T x = 0$.

Η κωνική συνάρτηση (3.1) συνδέεται με την τετραγωνική

$$q(y) = c(x(y)) = \frac{1}{2} y^T Q y + b^T y + a \quad (3.2)$$

μέσω των σχέσεων

$$y = \frac{x}{1 + p^T x}, \quad x = \frac{y}{1 + p^T y} \quad (3.3)$$

3.2. Η κωνική μέθοδος των Μπακόπουλου και Μπότσαρη

Οι Μπότσαρης και Μπακόπουλος [10] παρουσίασαν έναν αλγόριθμο βασισμένο στο κωνικό πρότυπο που είναι σημαντικά διαφορετικό από εκείνους που είχαν χρησιμοποιηθεί στις περισσότερες από τις κωνικές μεθόδους μέχρι τότε, δεδομένου ότι δεν περιελάμβανε την εσσιανή της πρότυπης συνάρτησης.

Η (3.1) γράφεται:

$$\begin{aligned}
 c(x) &= \frac{1}{2} \frac{x^T Q x}{(1 + p^T x)^2} + \frac{1}{2} \frac{b^T x}{1 + p^T x} + \frac{1}{2} \frac{x^T b}{1 + p^T x} + \frac{1}{2} b^T Q^{-1} b - \frac{1}{2} b^T Q^{-1} b + \alpha = \\
 &= \frac{1}{2} \frac{x^T Q x}{(1 + p^T x)^2} + \frac{1}{2} \frac{b^T Q^{-1} Q x}{1 + p^T x} + \frac{1}{2} \frac{x^T Q Q^{-1} b}{1 + p^T x} + \frac{1}{2} b^T Q^{-1} Q Q^{-1} b - \frac{1}{2} b^T Q^{-1} b + \alpha \Rightarrow \\
 \Rightarrow c(x) &= \frac{1}{2} \left(\frac{x}{1 + p^T x} + Q^{-1} b \right)^{-1} Q \left(\frac{x}{1 + p^T x} + Q^{-1} b \right) + \left(\alpha - \frac{1}{2} b^T Q^{-1} b \right). \quad (3.4)
 \end{aligned}$$

Η συνάρτηση $c(x)$ έχει μοναδικό ελάχιστο όταν ο Q είναι θετικά ορισμένος και τότε η θέση β του ελαχίστου προσδιορίζεται από τη λύση της εξίσωσης:

$$\frac{\beta}{1 + p^T \beta} + Q^{-1} \beta = 0, \quad (3.5)$$

ή ισοδύναμα:

$$\beta = -\frac{Q^{-1} \beta}{1 + p^T Q^{-1} \beta},$$

αρκεί μια τέτοια λύση να υπάρχει, δηλ. $1 + p^T Q^{-1} \beta \neq 0$.

Η (3.4) μπορεί να γραφεί

$$c(x) = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{1 + p^T x} \left(I - \frac{p x^T}{1 + p^T x} \right) \left(b - \frac{Q x}{1 + p^T x} \right) \right]^T (1 + p^T x) \left(I - \frac{x p^T}{1 + p^T x} \right)^{-1} \left(\frac{x}{1 + p^T x} + Q^{-1} b \right) + c(\beta) \quad (3.6)$$

Η κλίση $\nabla^T c(x)$ της $c(x)$ είναι:

$$\nabla^T c(x) = \frac{1}{1 + p^T x} \left(I - \frac{p x^T}{1 + p^T x} \right) \left(b + \frac{Q x}{1 + p^T x} \right). \quad (3.7)$$

Επίσης

$$\left(I - \frac{x p^T}{1 + p^T x} \right)^{-1} = I + x p^T \quad (3.8)$$

Επομένως οι εξισώσεις (3.5), (3.6), (3.7), (3.8) δίνουν

$$c(x) = \frac{1}{2} \nabla c(x) \left(1 + x p^T \right) \left(x - \frac{1 + p^T x}{1 + p^T \beta} \beta \right) + c(\beta)$$

Κι έτσι φέρνουμε την κωνική στη μορφή:

$$c(x) = \frac{1}{2} \frac{1 + p^T x}{1 + p^T \beta} \nabla c(x) (x - \beta) + c(\beta). \quad (3.9)$$

Όπως μπορούμε να δούμε, το κωνικό μοντέλο στη μορφή (3.9) δεν εμπεριέχει, κι επομένως δεν απαιτεί, μια εκτίμηση του πίνακα Q ή του εσσιανού πίνακα της αντικειμενικής συνάρτησης.

Ας θεωρήσουμε την τετραγωνική συνάρτηση (3.2) και το ανάπτυγμά της γύρω από το $\bar{y}$:

$$\begin{aligned} q(y) &= q(\bar{y}) + \nabla q(\bar{y})(y - \bar{y}) + \frac{1}{2} (y - \bar{y})^T Q (y - \bar{y}) \Rightarrow \\ (y - \bar{y})^T Q (y - \bar{y}) &= 2q(y) - 2q(\bar{y}) - 2\nabla q(\bar{y})(y - \bar{y}). \end{aligned}$$

Επιπλέον

$$\begin{aligned} \nabla q(y) &= \nabla q(\bar{y}) + (y - \bar{y})^T Q \Rightarrow \\ \Rightarrow \nabla q(y)(y - \bar{y}) &= \nabla q(\bar{y})(y - \bar{y}) + (y - \bar{y})^T Q (y - \bar{y}) \Rightarrow \\ \Rightarrow \nabla q(y)(y - \bar{y}) + \nabla q(\bar{y})(y - \bar{y}) &= 2q(y) - 2q(\bar{y}). \quad (3.10) \end{aligned}$$

Σημειώνουμε ότι

$$\nabla c(x) = \nabla q(y(x)) \cdot \frac{\partial y}{\partial x}, \quad (3.11)$$

όπου

$$\frac{\partial y}{\partial x} = \frac{1}{1 + p^T x} \left(I - \frac{x p^T}{1 + p^T x} \right). \quad (3.12)$$

Λύνουμε την (3.11) ως προς $\nabla q(y)$ και χρησιμοποιούμε τις (3.3), (3.8) και (3.12).

Τότε η (3.10) γράφεται:

$$\frac{1 + p^T x}{1 + p^T \bar{x}} \nabla c(x) (x - \bar{x}) + \frac{1 + p^T \bar{x}}{1 + p^T x} \nabla c(\bar{x}) (x - \bar{x}) = 2c(x) - 2c(\bar{x}). \quad (3.13)$$

Προφανώς, για $\bar{x} = \beta$, η (3.13) δίνει την (3.9), αφού σε αυτήν την περίπτωση $\nabla c(\bar{x}) = \nabla c(\beta) = 0$.

Ας υποθέσουμε ότι η αντικειμενική συνάρτηση $f(x)$ είναι κωνική. Για $\nabla c(x) = \nabla f(x) = g^T(x)$, έχουμε:

$$(3.9) \Rightarrow 2(1+p^T \beta) f(x) = (1+p^T x) g^T(x)(x-\beta) + 2(1+p^T \beta) f(\beta) \Rightarrow \\ \Rightarrow [2f(x)p^T + (1+p^T x)g^T(x)]\beta - 2(1+p^T \beta) f(\beta) = (1+p^T x)g^T(x)x - 2f(x)$$

και θέτοντας $\omega = 2(1+p^T \beta) f(\beta)$ έχουμε

$$\Rightarrow [2f(x)p^T + (1+p^T x)g^T(x)]\beta - \omega = (1+p^T x)g^T(x)x - 2f(x) \quad (3.14)$$

Αν ο ορίζοντας p είναι γνωστός, τότε υπολογίζοντας την εξίσωση (3.14) σε $n+1$ διαφορετικά σημεία $x_1, x_2, \dots, x_{n+1}$ έχουμε ένα $(n+1) \times (n+1)$ γραμμικό σύστημα:

$$A\alpha = s - \phi, \quad \alpha = \begin{bmatrix} \beta \\ \omega \end{bmatrix} \quad (3.15)$$

όπου

$$A = \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \mathbf{M} \\ f_{n+1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p^T & 0 \end{bmatrix} + G \quad (3.16)$$

$$G = \begin{bmatrix} (1+p^T x_1)g_1^T & -1 \\ (1+p^T x_2)g_2^T & -1 \\ \mathbf{M} & \mathbf{M} \\ (1+p^T x_{n+1})g_{n+1}^T & -1 \end{bmatrix} \quad (3.17)$$

$$s = \begin{bmatrix} (1+p^T x_1)g_1^T x_1 \\ (1+p^T x_2)g_2^T x_2 \\ \mathbf{M} \\ (1+p^T x_{n+1})g_{n+1}^T x_{n+1} \end{bmatrix} \quad (3.18)$$

$$\phi = 2 \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \mathbf{M} \\ f_{n+1} \end{bmatrix} \quad (3.19)$$

Το σύστημα αυτό είναι γραμμικό ως προς το $(n+1)$ -διάστατο διάνυσμα α που αποτελείται από τη θέση του ελάχιστου β και το βαθμωτό ω , υποθέτοντας ότι το διάνυσμα p είναι γνωστό.

Μια επαναληπτική μέθοδος για την επίλυση του παραπάνω συστήματος παρουσιάζεται στο [10]. Συγκεκριμένα:

Ορίζουμε:

$$\rho_i = \frac{1 + p^T x_{i+1}}{1 + p^T x_i}. \quad (3.20)$$

Για $x = x_{i+1}$ και $\bar{x} = x_i$, από την σχέση (3.13) έχουμε

$$(f_{i+1} + f_i) - \frac{1}{\rho_i} g_i^T (x_{i+1} - x_i) = (f_i - f_{i+1}) + \rho_i g_{i+1}^T (x_{i+1} - x_i) = k_i.$$

Το γεγονός ότι ο πίνακας Q είναι θετικά ορισμένος έχει σαν συνέπεια $k_i > 0$. Επομένως

$$\rho_i = \frac{(f_{i+1} - f_i) + k_i}{g_{i+1}^T (x_{i+1} - x_i)},$$

όπου

$$k_i = \sqrt{(f_{i+1} - f_i)^2 - g_{i+1}^T (x_{i+1} - x_i) g_i^T (x_{i+1} - x_i)} > 0,$$

αρκεί το υπόρριζο να είναι μη αρνητικό. Αυτό μπορεί να συμβεί πάντα για κατάλληλη επιλογή του μήκους βήματος.

$$(3.20) \Rightarrow (x_{i+1} - \rho_i x_i)^T p = \rho_i - 1. \quad (3.21)$$

Εφαρμόζοντας την (3.21) για $i = 1, 2, K, n$ ή ισοδύναμα, υπολογίζοντας την (3.13) στα x_1, x_2, K, x_{n+1} , το gauge διάνυσμα p μπορεί να προσδιορισθεί από τη λύση του γραμμικού συστήματος

$$Zp = r,$$

$$\text{όπου } z_i = x_{i+1} - \rho_i x_i, \quad Z = \begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \\ \vdots \\ z_n \end{bmatrix}, \quad \eta_i = \rho_i - 1, \quad r = \begin{bmatrix} \eta_1 \\ \eta_2 \\ \vdots \\ \eta_n \end{bmatrix}.$$

Η θέση του ελάχιστου β μπορεί να καθοριστεί μέσω της εξίσωσης:

$$p = Z^{-1}r, \quad \alpha = A^{-1}(s - \phi) \quad (3.22)$$

Πραγματοποιούμε τις αντιστροφές στις σχέσεις (3.22) επαναληπτικά καθώς τα νέα σημεία κατασκευάζονται από τον αλγόριθμο.

Επειδή στην πραγματικότητα το διάνυσμα p δεν είναι γνωστό, χρειάζεται ο προσδιορισμός του μέσα από κάποια αναδρομική σχέση. Έτσι, ορίζουμε:

$$Z_0 = I, \quad r_0 = p_0.$$

Αντικαθιστώντας διαδοχικά σε κάθε επανάληψη γραμμές του πίνακα Z και στοιχεία του διανύσματος r με τις τιμές των z_i^T και η_i που υπολογίζουμε, έχουμε:

$$Z_i = Z_{i-1} + e_l (z_i^T - e_l^T Z_{i-1})$$

και

$$r_i = r_{i-1} + e_l (\eta_i - e_l^T r_{i-1}),$$

όπου το e_l είναι ένα διάνυσμα με μονάδα στην θέση $l = i$ και μηδέν αλλού.

Χρησιμοποιώντας τον τύπο του Householder για την αντιστροφή πίνακα έχουμε ότι:

$$Z_i^{-1} = Z_{i-1}^{-1} - \frac{Z_{i-1}^{-1} e_l (z_i^T Z_{i-1}^{-1} - e_l^T)}{z_i^T Z_{i-1}^{-1} e_l} \quad (3.23)$$

και

$$p_i = p_{i-1} + \frac{Z_{i-1}^{-1} e_l (\eta_i - z_i^T p_{i-1})}{z_i^T Z_{i-1}^{-1} e_l}, \quad (3.24)$$

για $i = 1, 2, \dots, n$, αρκεί ο παρονομαστής $|z_i^T Z_{i-1}^{-1} e_l|$ να φράσσεται μακριά από το 0.

Η λύση του γραμμικού συστήματος (3.15) αποδεικνύεται ότι είναι:

$$\alpha = u - \frac{1 + q^T u}{1 + q^T v} \cdot v, \quad (3.25)$$

όπου

$$q = \begin{bmatrix} p \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (3.26)$$

$$u = G^{-1} s$$

και

$$v = G^{-1} \phi.$$

Αν G_i και G_{i+1} είναι οι εκτιμήσεις του πίνακα G στα x_i και x_{i+1} αντίστοιχα, όπου $G_0 = I$, τότε

$$G_i = (1 + p_{i-1}^T x_i) \begin{bmatrix} \frac{g_1^T}{\rho_1 \rho_2 L} & -\frac{1}{1 + p_{i-1}^T x_i} \\ M & M \\ \frac{g_{i-1}^T}{\rho_{i-1}} & -\frac{1}{1 + p_{i-1}^T x_i} \\ g_i^T & -\frac{1}{1 + p_{i-1}^T x_i} \\ M & M \end{bmatrix} = (1 + p_{i-1}^T x_i) H_i \quad (3.27)$$

και

$$G_{i+1} = (1 + p_i^T x_{i+1}) \begin{bmatrix} \frac{g_1^T}{\rho_1 \rho_2 L} & -\frac{1}{1 + p_i^T x_{i+1}} \\ M & M \\ \frac{g_{i-1}^T}{\rho_{i-1} \rho_i} & -\frac{1}{1 + p_i^T x_{i+1}} \\ \frac{g_i^T}{\rho_i} & -\frac{1}{1 + p_i^T x_{i+1}} \\ g_{i+1}^T & -\frac{1}{1 + p_i^T x_{i+1}} \\ M & M \end{bmatrix} = (1 + p_i^T x_{i+1}) H_{i+1}. \quad (3.28)$$

Σημειώνουμε ότι

$$\frac{1 + p_{i-1}^T x_{l+1}}{1 + p_{i-1}^T x_l} = \frac{1 + p_i^T x_{l+1}}{1 + p_i^T x_l} = \rho_l, \quad l = 1, 2, K, i-1,$$

αφού τα p_{i-1} και p_i ικανοποιούν την εξίσωση $(x_{l+1} - \rho_l x_l)^T p = \rho_l - 1$ για $l = 1, 2, K, i-1$. Αντικαθιστούμε την $j = i+1$ γραμμή του H_i με το διάνυσμα

$w_{i+1}^T = \left[\rho_i g_{i+1}^T - \frac{1}{1 + p_{i-1}^T x_i} \right]$ και διαιρούμε τον πίνακα που προκύπτει με ρ_i , κι έτσι έχουμε:

$$\frac{1}{\rho_i} \left[H_i + e_j (w_{i+1}^T - e_j^T H_i) \right] = H_{i+1} \Lambda_i, \quad (3.29)$$

όπου

$$\Lambda_i = \begin{bmatrix} 1 & 0 & L & 0 \\ 0 & 1 & L & 0 \\ M & M & O & M \\ 0 & 0 & L & \lambda_i \end{bmatrix}, \quad \lambda_i = \frac{1 + p_i^T x_i}{1 + p_{i-1}^T x_i}, \quad (3.30)$$

Από τις σχέσεις (3.27), (3.28), (3.29) και (3.30) έχουμε:

$$G_{i+1} = \frac{1 + p_i^T x_{i+1}}{\rho_i} \left[H_i + e_j (w_{i+1}^T - e_j^T H_i) \right] \Lambda_i^{-1} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow G_{i+1} = \lambda_i \left[G_i + e_j (y_{i+1}^T - e_j^T G_i) \right] \Lambda_i^{-1},$$

όπου

$$y_{i+1}^T = \left[\frac{1 + p_i^T x_{i+1}}{\lambda_i} g_{i+1}^T \quad -1 \right]. \quad (3.31)$$

Με χρήση του τύπου Householder βρίσκουμε ότι

$$G_{i+1}^{-1} = \frac{\Lambda_i}{\lambda_i} \left[G_i^{-1} - \frac{G_i^{-1} e_j (y_{i+1}^T G_i^{-1} - e_j^T)}{y_{i+1}^T G_i^{-1} e_j} \right], \quad (3.32)$$

αρκεί το $|y_{i+1}^T G_i^{-1} e_j|$ να φράσσεται μακριά από το 0.

Οι διαδοχικές εκτιμήσεις των διανυσμάτων s και ϕ όπως ορίζονται στις (3.18) και (3.19) δίνονται από

$$s_{i+1} = \left(1 + p_i^T x_{i+1} \right) \begin{bmatrix} \frac{g_1^T x_1}{\rho_1 \rho_2 L} \\ \frac{g_{i-1}^T x_{i-1}}{\rho_{i-1} \rho_i} \\ \frac{g_i^T x_i}{\rho_i} \\ g_{i+1}^T x_{i+1} \end{bmatrix} = \lambda_i \left[\sigma_i + e_j (\theta_{i+1} - e_j^T \sigma_i) \right]$$

και

$$\phi_{i+1} = \phi_i + e_j (\xi_{i+1} - e_j^T \phi_i),$$

όπου

$$\theta_{i+1} = \frac{1 + p_i^T x_{i+1}}{\lambda_i} g_{i+1}^T x_{i+1} s, \quad \xi_{i+1} = 2f_{i+1}.$$

Οι επαναληπτικές εξισώσεις για τα διανύσματα u και v , που απαιτούνται για τον υπολογισμό του α_{i+1} στην (3.25), βρίσκεται ότι είναι:

$$u_{i+1} = \Lambda_i \left[u_i - \frac{G_i^{-1} e_j (\theta_{i+1} - y_{i+1}^T u_i)}{y_{i+1}^T G_i^{-1} e_j} \right] \quad (3.33)$$

και

$$v_{i+1} = \frac{\Lambda_i}{\lambda_i} \left[v_i - \frac{G_i^{-1} e_j (\xi_{i+1} - y_{i+1}^T v_i)}{y_{i+1}^T G_i^{-1} e_j} \right]. \quad (3.34)$$

Για τη σύγκλιση της παραπάνω μεθόδου βλ. [10]

3.3. Το μήκος βήματος των Barzilai και Borwein

Στο [5] προτάθηκε μια μέθοδος κλίσης όπου η διεύθυνση αναζήτησης είναι όπως συνήθως η αρνητική διεύθυνση της κλίσης, αλλά η επιλογή του μήκους βήματος δεν είναι η κλασική της μεθόδου steepest descent. Το κίνητρο για αυτήν την επιλογή είναι ότι παρέχει μια προσέγγιση δύο σημείων στην εξίσωση secant που βρίσκεται πίσω από τις μεθόδους quasi-Newton (βλ. [79]). Αυτό οδηγεί στην επαναληπτική σχέση:

$$x_{i+1} = x_i - t_i g(x_i),$$

όπου το βήμα t_i δίνεται από:

$$t_i = \frac{\delta_{i-1}^T \delta_{i-1}}{\delta_{i-1}^T \psi_{i-1}},$$

όπου $\delta_{i-1} = \Delta x = x_i - x_{i-1}$, και $\psi_{i-1} = \Delta g = g_i - g_{i-1}$.

3.4. Μη μονότονη μέθοδος Armijo

Στο [48] προτάθηκε ένα μη μονότονο line search για μεθόδους τύπου Newton και στα [77, 85] επισημάνθηκαν κάποια υπολογιστικά πλεονεκτήματα αυτής της τεχνικής. Η μέθοδος επιβάλλει η τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης f σε κάθε επανάληψη να ικανοποιεί την συνθήκη Armijo ως προς τη μέγιστη τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης ενός προκαθορισμένου αριθμού M προηγούμενων επαναλήψεων. Τυπικά, η συνθήκη δίνεται από τη σχέση:

$$f(x_k - t_k \nabla f(x_k)) - \max_{0 \leq j \leq M} \{f(x_{k-j})\} \leq -\sigma t_k \|\nabla f(x_k)\|^2$$

όπου M είναι ένας μη αρνητικός ακέραιος, και $0 < \sigma < 1$. Η παραπάνω συνθήκη επιτρέπει μια αύξηση στις συναρτησιακές τιμές χωρίς να επηρεάζονται οι συνθήκες ολικής σύγκλισης [77, 85]. Η μέθοδος έχει μικρές απαιτήσεις αποθήκευσης και δεν περιλαμβάνει δύσκολους υπολογισμούς.

3.5. Η Μέθοδος ελάττωσης διάστασης στην βελτιστοποίηση – Μέθοδος DROPT

Οι Γράψα και Βραχάτης πρότειναν μια μέθοδο ελάττωσης διάστασης για βελτιστοποίηση χωρίς περιορισμούς, η οποία φέρει το όνομα DROPT (Dimension-Reducing - OPTimisation) [45]. Η μέθοδος αυτή εκμεταλλεύεται τα πλεονεκτήματα των αλγορίθμων του Newton και της SOR. Αν και η διαδικασία αυτή χρησιμοποιεί αναγωγή σε απλούστερες μονοδιάστατες μη γραμμικές εξισώσεις, παράγει μια ακολουθία στο $\mathbb{R}^{n-1}$, η οποία συγκλίνει τετραγωνικά στις $n-1$ συνιστώσες του

βέλτιστου, ενώ η εναπομείνουσα συνιστώσα υπολογίζεται χωριστά χρησιμοποιώντας τις τελικές προσεγγίσεις των άλλων. Γι αυτήν την συνιστώσα δεν είναι αναγκαία μια αρχική προσέγγιση και είναι στη διάθεση του χρήστη να επιλέξει ποια θα είναι αυτή η συνιστώσα, ανάλογα με το πρόβλημα. Η μέθοδος αυτή δεν απαιτεί άμεσα υπολογισμό παραγώγων και συγκρίνεται με επιτυχία με μεθόδους βελτιστοποίησης που έχουν τετραγωνική σύγκλιση.

3.5.1. Συμβολισμοί

- $(y; z)$: το διάνυσμα στήλη με συνιστώσες $y_1, y_2, K, y_m, z_1, z_2, K, z_k$,
- $\partial_i f(x)$: η μερική παράγωγος της $f(x)$ ως προς την i -οστή μεταβλητή x_i ,
- $\bar{A}$: η θήκη (closure) του συνόλου A ,
- $f(x_1, K, x_{i-1}, g_{x_{i+1}}, K, x_n)$:
η απεικόνιση που προκύπτει διατηρώντας τα $x_1, K, x_{i-1}, x_{i+1}, K, x_n$
σταθερά,
 $g(x) = (g_1(x), g_2(x), K, g_n(x))$:
η κλίση $\nabla f(x)$ της αντικειμενικής συνάρτησης f στο x ,
- $H = [H_{ij}]$: η Εσσιανή $\nabla^2 f(x)$ της f στο x .

3.5.2. Η μέθοδος

Για να δημιουργήσουμε μια ακολουθία $\{x^p\}$, $p = 0, 1, K$ σημείων του $\mathbb{R}^n$, η οποία συγκλίνει σε ένα σημείο τοπικού βέλτιστου (κρίσιμο σημείο) $x^* = (x_1^*, x_2^*, K, x_n^*)$ της συνάρτησης f , θεωρούμε τα σύνολα B_i , $i = 1, 2, K, n$ να είναι εκείνες οι συνεκτικές συνιστώσες της $g_i^{-1}(0)$ που περιέχουν το x^* στο οποίο $\partial_n g_i \neq 0$, για $i = 1, 2, K, n$ αντίστοιχα. Αν εφαρμόσουμε το Θεώρημα Πεπλεγμένων Συναρτήσεων σε κάθε μια από τις συνιστώσες g_i , $i = 1, 2, K, n$ μπορούμε να βρούμε ανοιχτές γειτονιές $A_1^* \subset \mathbb{R}^{n-1}$ και $A_{2,i}^* \subset \mathbb{R}$, $i = 1, 2, K, n$ των σημείων $y^* = (x_1^*, x_2^*, K, x_{n-1}^*)$ και x_n^* αντίστοιχα, τέτοιες ώστε για κάθε $y = (x_1, x_2, K, x_{n-1}) \in \bar{A}_1^*$ να υπάρχουν μοναδικές απεικονίσεις ϕ_i ορισμένες και συνεχείς στα A_1^* τέτοιες, ώστε:

$$x_n = \phi_i(y) \in \bar{A}_{2,i}^*, \quad i = 1, 2, K, n$$

και

$$g_i(y, \phi_i(y)) = 0, \quad i = 1, 2, K, n.$$

Επίσης, οι μερικές παράγωγοι $\partial_j \phi_i$, $j=1,2,K,n-1$ υπάρχουν στο A_1^* για κάθε ϕ_i , $i=1,2,K,n$, είναι συνεχείς στο $\bar{A}_1^*$ και δίνονται από τη σχέση:

$$\partial_j \phi_i(y) = -\frac{\partial_j g_i(y; \phi_i(y))}{\partial_n g_i(y; \phi_i(y))}, \quad i=1,2,K,n, \quad j=1,2,K,n-1$$

Στη συνέχεια, χρησιμοποιούμε τον τύπο του Taylor για να αναλύσουμε την $\phi_i(y)$, $i=1,2,K,n$, γύρω από το y^p . Έτσι επιτυγχάνουμε το παρακάτω επαναληπτικό σχήμα για τον υπολογισμό των $n-1$ συνιστωσών του x^* :

$$y^{p+1} = y^p + A_p^{-1} V_p, \quad p=0,1,K$$

όπου:

$$y^p = [x_i^p], \quad i=1,2,K,n-1$$

$$A_p = \left[\frac{\partial_j g_i(y^p; x_n^{p,i})}{\partial_n g_i(y^p; x_n^{p,i})} - \frac{\partial_j g_n(y^p; x_n^{p,n})}{\partial_n g_n(y^p; x_n^{p,n})} \right], \quad i,j=1,2,K,n-1$$

$$V_p = [v_i] = [x_n^{p,i} - x_n^{p,n}], \quad i=1,2,K,n-1$$

με $x_n^{p,i} = \phi_i(y^p)$. Μετά από έναν επιθυμητό αριθμό επαναλήψεων, έστω $p=m$, η n -οστή συνιστώσα του x^* μπορεί να προσεγγιστεί με την βοήθεια της παρακάτω σχέσης:

$$x_n^{m+1} = x_n^{m,n} - \sum_{j=1}^{n-1} \left\{ (x_j^{m+1} - x_j^m) \frac{\partial_j g_n(y^m; x_n^{m,n})}{\partial_n g_n(y^m; x_n^{m,n})} \right\}$$

Παρατήρηση 1 Αντίστοιχες διαδικασίες για την προσέγγιση του x^* μπορούν να κατασκευαστούν αν αντικαταστήσουμε το x_n με οποιαδήποτε άλλη συνιστώσα x_1, x_2, K, x_n , για παράδειγμα την x_{int} , και να θεωρήσουμε $y = (x_1, K, x_{\text{int}-1}, x_{\text{int}+1}, K, x_n)$.

Παρατήρηση 2 Η παραπάνω μέθοδος δεν απαιτεί τις αναλυτικές εκφράσεις των ϕ_i , παρά μόνο τις τιμές $x_n^{p,i}$, οι οποίες δίνονται από τη λύση των μονοδιάστατων εξισώσεων $g_i(x_1^p, K, x_{n-1}^p, g) = 0$. Έτσι, αν διατηρήσουμε το $y^p = (x_1^p, x_2^p, K, x_{n-1}^p)$ σταθερό, μπορούμε να λύσουμε τις εξισώσεις $g_i(y^p; r_i^p) = 0$, $i=1,2,K,n$ ως προς r_i^p στο διάστημα (a,b) με ακρίβεια δ .

Για να λύσουμε τις παραπάνω εξισώσεις μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε οποιαδήποτε μονοδιάστατη μέθοδο [72, 73, 86, 94]. Οι Βραχάτης και Γράβας χρησιμοποίησαν την τροποποιημένη μέθοδο διχοτόμησης που περιγράφεται στα [45, 96, 98].

Ο μόνος υπολογισμός που απαιτείται από αυτήν την μέθοδο διχοτόμησης είναι τα αλγεβρικά πρόσημα της συνάρτησης ψ . Επιπλέον, είναι η μόνη μέθοδος που μπορεί να εφαρμοστεί σε προβλήματα με μη ακριβείς συναρτησιακές τιμές.

3.6. Η μη μονότονη κωνική μέθοδος

Στο [65] παρουσιάστηκε μια νέα μέθοδος βελτιστοποίησης που συνδυάζει το μη μονότονο line search με την κωνική προσέγγιση της αντικειμενικής συνάρτησης. Η μέθοδος συνδυάζει τα πλεονεκτήματα και των δύο. Αυτά είναι ένας γρήγορος ρυθμός σύγκλισης με ένα σχετικά μικρό κόστος στους υπολογισμούς των τιμών της αντικειμενικής συνάρτησης και της κλίσης. Επιπλέον η μέθοδος δεν χρειάζεται δεύτερης τάξης πληροφορία, ούτε αντιστροφή πινάκων, και στις περισσότερες περιπτώσεις λειτουργεί καλύτερα από άλλες μεθόδους που χρησιμοποιούν τέτοιες πληροφορίες.

3.6.1. Η μέθοδος

Για να βρούμε το σημείο β που ελαχιστοποιεί μια δοσμένη συνάρτηση $f: D \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ με πεδίο ορισμού D , προσπαθούμε να δημιουργήσουμε μια ακολουθία σημείων x_k , $k = 0, 1, K$, η οποία να συγκλίνει στο β .

Μετά από την ίδια προσέγγιση με το [10], και υποθέτοντας ότι η f είναι μια κωνική συνάρτηση, οδηγούμαστε στο να λύσουμε το σύστημα που ορίζεται από τις (3.15), (3.16), (3.17), (3.18) και (3.19).

Έτσι μπορούμε να διατυπώσουμε τον παρακάτω αλγόριθμο:

ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ 3 (Μη μονότονη κωνική μέθοδος).	
Βήμα 1.	Δίνεται το x_0 . Θέτουμε $i = 0$.
Βήμα 2.	Θέτουμε $\alpha = 0.1$; $k = 0$; $j = 0$; $W(j) = f_0$.
Βήμα 3.	Θέτουμε $d_0 = -g_0$, και $x_1 = x_0 - t_0 d_0$, όπου το t_0 προσδιορίζεται από το μη μονότονο line search.
Βήμα 4.	Θέτουμε $\alpha_0^T = [x_1^T \ 0]$, $G_0 = I$, $Z_0 = I$, $u_0 = \alpha_0$, $v_0 = 0$, $p_0 = 0$, $\lambda_0 = 1$, $c = 1$, $l = 1$.

<i>Βήμα 5.</i>	Αν $\ g_0\ \leq \varepsilon_1 (1 + f_0)$ τότε σταματάμε; αλλιώς συνεχίζουμε με το Βήμα 6.
<i>Βήμα 6.</i>	Χρησιμοποιούμε τις (3.30), (3.31) για να υπολογίσουμε τα L_{i+1}, y_{i+1} .
<i>Βήμα 7.</i>	Αν $ y_{i+1}^T G_i^{-1} e_c < \varepsilon_3$, τότε θέτουμε $x_0 = x_{i+1}$ και πηγαίνουμε στο Βήμα 3. Αλλιώς συνεχίζουμε με το Βήμα 8.
<i>Βήμα 8.</i>	Χρησιμοποιούμε τις (3.24), (3.25), (3.26), (3.32), (3.33), (3.34) για να υπολογίσουμε τα $G_{i+1}^{-1}, u_{i+1}, v_{i+1}, \alpha_{i+1}$.
<i>Βήμα 9.</i>	Αν $ (x_i - \beta_i)^T g_i < \varepsilon_4$ τότε θέτουμε $x_0 = x_{i+1}$ και πηγαίνουμε στο Βήμα 3. Αλλιώς συνεχίζουμε με το Βήμα 10.
<i>Βήμα 10.</i>	Αν $f(\beta_{i+1}) \leq f_{\max}$, τότε αποθηκεύουμε την τιμή της συνάρτησης στο αρχείο, θέτουμε $x_{i+1} = \beta_{i+1}$ και συνεχίζουμε με το Βήμα 11. Αλλιώς πηγαίνουμε στο Βήμα 3.
<i>Βήμα 11.</i>	Θέτουμε $i = i + 1$; Αν $c = n + 1$, τότε θέτουμε $c = 1$, αλλιώς $c = c + 1$.
<i>Βήμα 12.</i>	Θέτουμε $d_i = \mu_i (x_i - \beta_i)$, όπου $\mu_i = -\text{sign}\{g_i^T (x_i - \beta_i)\}$.
<i>Βήμα 13.</i>	Αν $\ d_i\ + \gamma_i \leq M$, τότε προσδιορίζουμε το βήμα Barzilai t_i , θέτουμε $x_{i+1} = x_i + t_i d_i$ και συνεχίζουμε με το Βήμα 14. Αλλιώς θέτουμε $x_0 = x_i$ και πηγαίνουμε στο Βήμα 3.
<i>Βήμα 14.</i>	Αν $\delta_i = (f_{i+1} - f_i)^2 - g_{i+1}^T (x_{i+1} - x_i) g_i^T (x_{i+1} - x_i) < 0$, τότε, χρησιμοποιούμε το μη μονότονο line search και κάνουμε ένα βήμα από το x_{i+1} κατά μήκος της d_i και επαναλαμβάνουμε αυτήν την διαδικασία μέχρι το νέο x_{i+1} να ικανοποιεί τη συνθήκη $\delta_i > 0$.
<i>Βήμα 15.</i>	Αν $ z_i^T Z_{i-1} e_l < \varepsilon_3$, τότε θέτουμε $x_0 = x_{i+1}$ και πηγαίνουμε στο Βήμα 3. Αλλιώς συνεχίζουμε με το Βήμα 16.
<i>Βήμα 16.</i>	Χρησιμοποιούμε την (3.23) για να υπολογίσουμε τα Z_{i+1}^{-1}, p_{i+1} .
<i>Βήμα 17.</i>	Αν $l = n$, τότε θέτουμε $l = 1$. Αλλιώς θέτουμε $l = l + 1$.
<i>Βήμα 18.</i>	Πηγαίνουμε στο Βήμα 5.

3.6.2. Η σύγκλιση της μεθόδου

Η σύγκλιση του αλγορίθμου μας μπορεί να αποδειχθεί χρησιμοποιώντας τον ακόλουθο πρότυπο αλγόριθμο, ο οποίος ψάχνει για ένα σημείο με μια επιθυμητή ιδιότητα, και δύο θεωρήματα από τους Polak [79] και Μπότσαρη [10].

Πρότυπος αλγόριθμος

Έστω A μια συνάρτηση που απεικονίζει ένα κλειστό υποσύνολο T ενός χώρου Banach B στο σύνολο όλων των μη κενών υποσυνόλων του T (δηλ. $A: T \rightarrow 2^T$) και έστω $h = T \rightarrow \mathbb{R}^1$.

ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ 4 (Polak)	
<i>Βήμα 1.</i>	Υπολόγισε το $x_0 \in T$.
<i>Βήμα 2.</i>	Θέσε $i = 0$.
<i>Βήμα 3.</i>	Υπολόγισε ένα σημείο $y_i \in A(x_i)$.
<i>Βήμα 4.</i>	Θέσε $x_{i+1} = y_i$.
<i>Βήμα 5.</i>	Αν $h(x_{i+1}) \geq h(x_i)$, τότε σταμάτα; αλλιώς θέσε $i = i + 1$ και πήγαινε στο Βήμα 3.

Θεώρημα 3.1 :

Έστω ότι:

(i) $h(x)$ είτε είναι συνεχής σε όλα τα μη επιθυμητά σημεία $x \in T$ είτε η $h(x)$ είναι φραγμένη κάτω για $x \in T$; και

(ii) για κάθε $x \in T$ το οποίο είναι μη επιθυμητό υπάρχει ένα $\varepsilon(x)$ και ένα $\delta(x) < 0$ τέτοιο ώστε $h(x'') - h(x') \leq \delta(x) < 0$ για κάθε $x' \in T$ τέτοιο ώστε $|x' - x| \leq \varepsilon(x)$ και για κάθε $x'' \in A(x')$.

Τότε είτε η ακολουθία $\{x_i\}$ που κατασκευάζεται από τον παραπάνω πρότυπο αλγόριθμο είναι πεπερασμένη και το τελευταίο στοιχείο της είναι επιθυμητό, είτε η ακολουθία είναι άπειρη και κάθε σημείο συσσώρευσης της $\{x_i\}$ είναι επιθυμητό.

Απόδειξη:

Βλέπε [79].

Θεωρούμε την ακολουθία $\{x_i\}$ που παράγεται από τον αλγόριθμό μας. Κάνουμε τις ακόλουθες υποθέσεις:

(a) Το x_i είναι επιθυμητό αν και μόνο αν $\|g(x_i)\| = 0$.

(b) Η $f(x)$ είναι μια συνεχώς διαφορίσιμη συνάρτηση στο $\mathbb{R}^n$.

(c) Υπάρχει ένα $x_0 \in \mathbf{R}^n$ τέτοιο ώστε το σύνολο $L_0 = \{x : f(x) \leq f(x_0)\}$ να είναι συμπαγές. Θεωρούμε την ακολουθία $\{\bar{x}_i\}$ που είναι τέτοια ώστε $f(\bar{x}_i) = f_{\max}$ στην i επανάληψη. Η υπόθεση της συμπαγείας, μαζί με το γεγονός ότι είναι $f(\bar{x}_{i+1}) \leq f(\bar{x}_i)$, επάγει ότι η υπακολουθία $\{\bar{x}_i\}$ που γεννιέται από τον αλγόριθμό μας είναι φραγμένη κι επομένως έχει σημεία συσσώρευσης. Επομένως και η ακολουθία $\{x_i\}$ θα έχει σημεία συσσώρευσης.

(d) Έστω $M > 0$ τέτοιο ώστε $M - 2 \geq \sup \|g(x)\|$, $x \in L_0$.

(e) Ο αλγόριθμος σταματάει αν $\|g(x_i)\| = 0$.

Τότε είτε η ακολουθία είναι πεπερασμένη και τελειώνει σε ένα επιθυμητό σημείο, ειδάλλως είναι άπειρη και κάθε σημείο συσσώρευσης x^* της $\{x_i\}$ είναι επιθυμητό.

Θεώρημα 3.2:

Η ακολουθία $\{x_i\}$ που παράγεται από τον αλγόριθμό μας είναι πεπερασμένη και τελειώνει σε έναν επιθυμητό σημείο, ειδάλλως είναι άπειρη και κάθε σημείο συσσώρευσης x^* της $\{x_i\}$ είναι επιθυμητό.

Απόδειξη

Βλέπε [10].

3.6.3. Αριθμητικές εφαρμογές

Ο αλγόριθμος που περιγράφεται στην παράγραφο έχει εφαρμοστεί χρησιμοποιώντας το νέο πρόγραμμα σε FORTRAN90 που ονομάζεται MONCON. Το MONCON δοκιμάστηκε σε Pentium IV PC συμβατό σε τυχαία προβλήματα ποικίλων διαστάσεων. Η εμπειρία μας είναι ότι ο αλγόριθμος συμπεριφέρθηκε προβλέψιμα και τα αποτελέσματα ήταν αρκετά ικανοποιητικά. Μερικά χαρακτηριστικά υπολογιστικά αποτελέσματα δίνονται στους πίνακες που ακολουθούν.

Για τα ακόλουθα προβλήματα, οι αναφερόμενες παράμετροι είναι:

- n : η διάσταση του προβλήματος,
- $x_0 = (x_1, x_2, \dots, x_n)$: το αρχικό σημείο,
- $x^* = (x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)$: Η προσέγγιση του σημείου τοπικού ελαχίστου, που έχει υπολογιστεί με ακρίβεια τουλάχιστον $\varepsilon = 10^{-4}$,

► IT : ο συνολικός αριθμός των επαναλήψεων του αλγόριθμου που απαιτήθηκαν για να πάρουμε το x^* ,

► TE : ο συνολικός αριθμός των συναρτησιακών υπολογισμών (της αντικειμενικής συνάρτησης και της κλίσης της).

Στους παρακάτω πίνακες συγκρίνουμε τα αριθμητικά αποτελέσματα που επιτυγχάνονται, για διάφορα αρχικά σημεία, με άλλες μεθόδους (τετραγωνική μέθοδο του Armijo [2], OPTBIS [100], Fletcher-Reeves [33], Polak-Ribiere [82, 83], DFP [82, 83]) συμπεριλαμβανομένης και της κλασικής κωνικής μεθόδου, με τα αντίστοιχα αριθμητικά αποτελέσματα της μεθόδου που παρουσιάζεται σε αυτήν την παράγραφο. Σε αυτούς τους πίνακες x^0 είναι το αρχικό σημείο, ενώ με το δείκτη α υποδεικνύεται το κλασικό αρχικό σημείο. Για όλες τις μεθόδους χρησιμοποιήσαμε ακρίβεια $\varepsilon_1 = 10^{-8}$ και αρχικό βήμα 10. Επίσης είναι $\varepsilon_3 = \varepsilon_4 = 10^{-15}$. Στη μέθοδό μας θέτουμε το μέγεθος του αρχείου του line search να είναι $M = n$. Επιπλέον, με D σημειώνουμε την απόκλιση ή τη μη σύγκλιση μετά από 10000 επαναλήψεις. Οι τύποι και τα τοπικά ακρότατα των συναρτήσεων βρίσκονται στο παράρτημα.

Παράδειγμα 1. Συνάρτηση Rosenbrock.

x^0	Armijo		OPTBIS			FR		PR		DFP		Conic		MONCON	
	IT	TE	IT	TE	AS	IT	TE	IT	TE	IT	TE	IT	TE	IT	TE
$(-1.2, 1)^a$	794	8901	957	5303	19700	193	3211	19	364	23	355	20	97	33	118
$(-1.2, -1)$	745	8283	485	2800	13584	39	615	15	278	15	235	80	341	35	117
$(0, -1.2)$	778	8697	484	2807	15258	31	469	17	315	16	233	41	181	40	156
$(3, 3)$	1325	15824	519	2989	14195	134	2992	26	509	26	395	D		133	675
$(10, 10)$	782	8750	711	3983	16166	31	511	16	308	18	271	64	278	27	114

Παράδειγμα 2. Ιδιάζουσα γενικευμένη συνάρτηση Powell.

x^0	Armijo		OPTBIS			FR	
	IT	TE	IT	TE	AS	IT	TE
$(3, -1, 0, 1)^a$	1197	16515	710	6799	23237	8660	122575
$(1, -1, 1, -1)$	1184	16316	598	5712	20062	6105	86593
$(0, 10, 20, 30)$	1319	18379	794	7246	27109	9884	139879
$(0, 1, 2, 3)$	1262	17505	635	6194	24992	9943	140655
$(100, 100, 100, 100)$	1230	17016	D			5913	84033

x^0	PR		DFP		Conic		MONCON	
	IT	TE	IT	TE	IT	TE	IT	TE
$(3, -1, 0, 1)^a$	5361	76052	32	548	648	2799	405	1536
$(1, -1, 1, -1)$	5234	74220	28	475	529	2227	471	1821
$(0, 10, 20, 30)$	542	8668	34	601	751	3221	300	1120
$(0, 1, 2, 3)$	262	4456	27	478	939	4086	111	389
$(100, 100, 100, 100)$	5090	72243	36	638	1090	4686	388	1415

Παράδειγμα 3. Συνάρτηση Watson ($n = 2$).

x^0	Armijo		OPTBIS			FR		PR		DFP		Conic		MONCON	
	IT	TE	IT	TE	AS	IT	TE	IT	TE	IT	TE	IT	TE	IT	TE
$(0, 0)^a$	48	352	20	119	510	25	476	10	157	11	219	12	38	12	38
$(1, -1)$	56	421	3	15	159	27	542	12	211	12	230	11	36	11	36
$(10^6, 0)$	1361	16300	D			D		D		D		96	341	80	255
$(1.5, 0.5)$	209	1946	4	20	210	11	211	14	246	14	229	12	39	15	47
$(1, -2)$	110	927	3	15	162	21	354	15	266	14	219	11	38	18	51

Παράδειγμα 4. Συνάρτηση Brown and Dennis.

x^0	Armijo		OPTBIS			FR		PR		DFP		Conic		MONCON	
	IT	TE	IT	TE	AS	IT	TE	IT	TE	IT	TE	IT	TE	IT	TE
$(25, 5, -5, -1)^a$	57	544	10	98	1020	35	605	35	602	54	893	90	454	51	177
$(0, 0, 0, 0)$	54	511	10	98	960	20	363	19	338	30	480	82	325	43	153
$(1, 2, 4, 8)$	72	709	15	146	1496	30	523	18	316	24	418	93	403	45	160
$(-5, -1, 1, 5)$	72	708	13	126	1407	33	565	30	516	20	349	D		45	163
$(-100, 0, 100, 1)$	113	118 2	15	147	2050	36	652	36	665	33	578	D		71	239

3.7. Μια κωνική μέθοδος ελάττωσης διάστασης για ελαχιστοποίηση χωρίς περιορισμούς

Στο [66] παρουσιάσαμε έναν νέο αλγόριθμο για την ελαχιστοποίηση χωρίς περιορισμούς μιας δύο φορές συνεχώς παραγωγίσιμης συνάρτησης $f(x)$, n μεταβλητών. Ο αλγόριθμος αυτός είναι επίσης βασισμένος στην κωνική συνάρτηση μοντέλο. Η βασική ιδέα εδώ είναι να επιταχύνουμε την σύγκλιση της κωνικής μεθόδου, επιλέγοντας πιο κατάλληλα σημεία x_1, x_2, K, x_{n+1} όπου θα εφαρμόσουμε το κωνικό μοντέλο. Για να το επιτύχουμε, εφαρμόζουμε στην κλίση της f την μέθοδο ελάττωσης διάστασης (DR) που παρουσιάστηκε παραπάνω, η οποία χρησιμοποιεί αναγωγή σε κατάλληλες απλούστερες μονοδιάστατες μη γραμμικές εξισώσεις, συγκλίνει τετραγωνικά και εκμεταλλεύεται τα πλεονεκτήματα των αλγορίθμων του Newton και της Μη Γραμμικής SOR. Η νέα μέθοδος έχει εφαρμοστεί και έχει εξεταστεί σε γνωστές συναρτήσεις. Συγκλίνει σε $n+1$ επαναλήψεις σε κωνικές συναρτήσεις και, όπως φανερώνουν τα αριθμητικά αποτελέσματα, ελαχιστοποιεί γρήγορα γενικές συναρτήσεις.

3.7.1. Η μέθοδος

Θυμίζουμε ότι για να βρούμε το σημείο β , το οποίο ελαχιστοποιεί μια δοσμένη συνάρτηση $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, προσπαθούμε να δημιουργήσουμε μια ακολουθία σημείων $x^{(k)}$, $k = 0, 1, K$ η οποία συγκλίνει στο β . Σύμφωνα με την κωνική μέθοδο, και αν υποθέσουμε ότι η f είναι κωνική συνάρτηση, αυτό επιτυγχάνεται με τη λύση του συστήματος (3.15). Το σύστημα αυτό προκύπτει αν υπολογίσουμε την εξίσωση

(3.14) σε $n+1$ διαφορετικά σημεία x_1, x_2, K, x_{n+1} . Στην εργασία των Μπακόπουλου και Μπότσαρη [10] τα σημεία παράγονταν με εφαρμογή του αλγόριθμου του Armijo [2]. Στο [66] χρησιμοποιήσαμε την μέθοδο DR. Η μέθοδος DR καταλήγει σε καλύτερο σύνολο σημείων κι έτσι η κωνική μέθοδος επιταχύνεται.

ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ 5: Διαδικασία DROPT (Dimension-Reducing Optimization)	
<i>Βήμα 1.</i>	Είσοδος $\{x^0, a, b, \delta, MIT, \varepsilon_1, \varepsilon_2\}$.
<i>Βήμα 2.</i>	Θέτουμε $p = -1$.
<i>Βήμα 3.</i>	Αν $p < MIT$ αντικαθιστούμε το p με $p+1$ και συνεχίζουμε με το Βήμα 4. Αλλιώς, πηγαίνουμε στο Βήμα 14.
<i>Βήμα 4.</i>	Αν $\ g(x^p)\ \leq \varepsilon_1$ πηγαίνουμε στο Βήμα 14.
<i>Βήμα 5.</i>	Βρίσκουμε μια συντεταγμένη int τέτοια ώστε: $\operatorname{sgn} g_i(x_1^p, K, x_{int-1}^p, a_{int}, x_{int+1}^p, K, x_n^p) \cdot \operatorname{sgn} g_i(x_1^p, K, x_{int-1}^p, b_{int}, x_{int+1}^p, K, x_n^p) = -1$ για κάθε $i = 1, 2, K, n$. Αν αυτό δεν είναι δυνατό, εφαρμόζουμε την μέθοδο Armijo και πηγαίνουμε στο Βήμα 4.
<i>Βήμα 6.</i>	Υπολογίζουμε τις προσεγγιστικές λύσεις r_i της εξίσωσης $g_i(x_1^p, K, x_{int-1}^p, r_i, x_{int+1}^p, K, x_n^p) = 0$ για κάθε $i = 1, 2, K, n$ εφαρμόζοντας την τροποποιημένη μέθοδο διχοτόμησης στο διάστημα (a_{int}, b_{int}) με ακρίβεια δ . Θέτουμε $x_{int}^{p,i} = r_i$.
<i>Βήμα 7.</i>	Θέτουμε $y^p = (x_1^p, K, x_{int-1}^p, x_{int+1}^p, K, x_n^p)$.
<i>Βήμα 8.</i>	Βρίσκουμε τα στοιχεία του πίνακα A_p χρησιμοποιώντας το x_{int} αντί του x_n .
<i>Βήμα 9.</i>	Βρίσκουμε τα στοιχεία του διανύσματος V_p χρησιμοποιώντας το x_{int} αντί του x_n .
<i>Βήμα 10.</i>	Λύνουμε το $(n-1) \times (n-1)$ γραμμικό σύστημα $A_p s^p = -V_p$ ως προς s^p .
<i>Βήμα 11.</i>	Θέτουμε $y^{p+1} = y^p + s^p$.
<i>Βήμα 12.</i>	Υπολογίζουμε το x_{int} και θέτουμε $x^p = (y^p; x_{int})$.
<i>Βήμα 13.</i>	Αν $\ s^p\ \leq \varepsilon_2$ συνεχίζουμε με το Βήμα 14. Αλλιώς πηγαίνουμε στο Βήμα 3.

Βήμα 14. Έξοδος $\{x^p\}$.

ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ 6: Κωνική μέθοδος ελάττωσης διάστασης.

- Βήμα 1.** Δίνεται το x^0 . Θέτουμε $i = 0$.
- Βήμα 2.** Θέτουμε $d_0 = -g_0$.
- Βήμα 3.** Βρίσκουμε το σημείο x_1 χρησιμοποιώντας τη μέθοδο DR.
- Βήμα 4.** Θέτουμε $\alpha_0^T = \begin{bmatrix} x_1^T & 0 \end{bmatrix}$, $G_0 = I$, $Z_0 = I$, $u_0 = \alpha_0$, $v_0 = 0$, $p_0 = 0$, $\lambda_0 = 1$, $j = 1$, $l = 1$.
- Βήμα 5.** Αν $\|g_0\| \leq \varepsilon_1 (1 + |f_0|)$ τότε σταματάμε. Αλλιώς συνεχίζουμε με το Βήμα 6.
- Βήμα 6.** Υπολογίζουμε τα L_{i+1} , y_{i+1} .
- Βήμα 7.** Αν $|y_{i+1}^T G_i^{-1} e_c| < \varepsilon_3$, τότε θέτουμε $x_0 = x_{i+1}$ και πηγαίνουμε στο Βήμα 3. Αλλιώς συνεχίζουμε με το Βήμα 8.
- Βήμα 8.** Υπολογίζουμε το a_{i+1} .
- Βήμα 9.** Αν $|(x_i - \beta_i)^T g_i| < \varepsilon_4$ τότε θέτουμε $x_0 = x_{i+1}$ και πηγαίνουμε στο Βήμα 3, αλλιώς συνεχίζουμε με το Βήμα 10.
- Βήμα 10.** Αν $f(\beta_{i+1}) \leq f(x_i)$, τότε θέτουμε $x_{i+1} = \beta_{i+1}$, και συνεχίζουμε με το Βήμα 11, αλλιώς πηγαίνουμε στο Βήμα 3.
- Βήμα 11.** Θέτουμε $i = i + 1$. Αν $j = n + 1$, τότε θέτουμε $j = 1$, αλλιώς $j = j + 1$.
- Βήμα 12.** Θέτουμε $d_i = \mu_i (x_i - \beta_i)$, όπου $\mu_i = -\text{sgn } g_i^T (x_i - \beta_i)$.
- Βήμα 13.** Αν $\|d_i\| + |\gamma_i| \leq M$, τότε πηγαίνουμε στο Βήμα 14, αλλιώς θέτουμε $x_0 = x_i$ και πηγαίνουμε στο Βήμα 3.
- Βήμα 14.** Αν $\delta_i = (f_{i+1} - f_i)^2 - g_{i+1}^T (x_{i+1} - x_i) g_i^T (x_{i+1} - x_i) < 0$ τότε χρησιμοποιώντας τη μέθοδο DR βρίσκουμε ένα x_{i+1} και επαναλαμβάνουμε τη διαδικασία αυτή μέχρι το νέο x_{i+1} να ικανοποιεί την $\delta_i > 0$.
- Βήμα 15.** Αν $|z_i^T Z_{i-1} e_l| < \varepsilon_3$ τότε θέτουμε $x_0 = x_{i+1}$ και πηγαίνουμε στο Βήμα 3. Αλλιώς συνεχίζουμε με το Βήμα 16
- Βήμα 16.** Υπολογίζουμε τα Z_{i+1}^{-1} , p_{i+1} .

Βήμα 17. Αν $l = n$, τότε θέτουμε $l = 1$. Αλλιώς θέτουμε $l = l + 1$.

Βήμα 18. Πηγαίνουμε στο Βήμα 5.

3.7.2. Η σύγκλιση της μεθόδου

Η σύγκλιση του νέου αλγόριθμου μπορεί να αποδειχθεί χρησιμοποιώντας τα θεωρήματα σύγκλισης των Polak [79], Γράψα—Βραχάτη [42], και Μπακόπουλου—Μπότσαρη [10].

Θεωρούμε την ακολουθία $\{x_i\}$, που γεννιέται από τον αλγόριθμό μας.

Κάνουμε τις παρακάτω υποθέσεις:

(a) Το x_i είναι επιθυμητό αν και μόνο αν $\|g(x_i)\| = 0$.

(b) Η $f(x)$ είναι μία δις-συνεχώς διαφορίσιμη συνάρτηση στο $\mathbb{R}^n$, της οποίας η Εσσιανή είναι μη ιδιάζουσα σε κάθε επιθυμητό σημείο.

(c) Υπάρχει ένα $x_0 \in \mathbb{R}^n$ τέτοιο ώστε το σύνολο $L_0 = \{x \mid f(x) \leq f(x_0)\}$ να είναι συμπαγές. Η υπόθεση της συμπαγείας, μαζί με το γεγονός ότι $f(x_{i+1}) < f(x_i)$, το οποίο εξασφαλίζεται με τη χρήση της μεθόδου DR, έχει σαν αποτέλεσμα η ακολουθία $\{x_i\}$, η οποία γεννιέται από τον αλγόριθμό μας, να είναι φραγμένη κι επομένως να έχει σημεία συσσώρευσης.

(d) Έστω $M > 0$ τέτοιο, ώστε $M - 2 \geq \sup \|g(x)\|$, $x \in L_0$.

(e) Ο αλγόριθμος τερματίζεται αν $\|g(x_i)\| = 0$.

Τότε η ακολουθία που γεννιέται από τον αλγόριθμό μας ικανοποιεί τις υποθέσεις των τριών θεωρημάτων σύγκλισης που αναφέρθηκαν παραπάνω, και συνεπώς είτε η ακολουθία είναι πεπερασμένη και τερματίζει σε ένα επιθυμητό

σημείο, είτε είναι άπειρη και κάθε σημείο συσσώρευσης x^* της $\{x_i\}$ είναι επιθυμητό.

3.7.3. Αριθμητικές εφαρμογές

Η μέθοδος που περιγράφηκε σε αυτήν την παράγραφο εφαρμόστηκε με τη χρήση ενός νέου προγράμματος σε FORTRAN90, με την ονομασία DRCON (Dimension—Reducing Conic). Το DRCON ελέγχθηκε σε Pentium IV PC συμβατό, με διάφορα προβλήματα σε διαφορετικές διαστάσεις. Φάνηκε ότι ο αλγόριθμος συμπεριφέρεται αξιόπιστα και τα αποτελέσματα υπήρξαν πολύ ικανοποιητικά.

Στη συνέχεια συγκρίνουμε τα αριθμητικά αποτελέσματα που πήραμε, σε διάφορα αρχικά σημεία, εφαρμόζοντας τις μεθόδους steepest descent του Armijo [2], Fletcher – Reeves (FR) [33], Polak – Ribiere (PR) [82, 83] and Broyden - Fletcher - Goldfarb - Shanno (BFGS) [82, 83] με τα αντίστοιχα αριθμητικά αποτελέσματα της δικιάς μας μεθόδου.

Στους παρακάτω πίνακες ο δείκτης α υποδεικνύει το κλασικό αρχικό σημείο και το D υποδεικνύει απόκλιση ή μη σύγκλιση. Η προσέγγιση του βέλτιστου σημείου x^* υπολογίστηκε με ακρίβεια $\varepsilon = 10^{-15}$.

Παράδειγμα 1: Συνάρτηση Rosenbrock ($m = n = 2$)

	Armijo		FR		PR		BFGS		DRCON		
x^0	IT	FE	IT	FE	IT	FE	IT	FE	IT	FE	ASG
$(-1.2, 1)^a$	1881	21396	142	2545	19	364	22	343	7	30	100
$(-3, 6)$	5960	74560	194	4462	23	455	28	436	7	29	100
$(-2, 2)$	1828	20852	29	480	15	290	20	305	6	27	100
$(3, 3)$	5993	74364	130	2939	26	509	25	384	13	48	140
$(1, 20)$	D	D	259	5732	32	689	32	689	1	6	20
$(10, 10)$	18416	251611	310	7469	26	526	32	505	4	21	80
$(100, 100)$	D	D	D	D	33	746	54	822	3	16	60
$(-2000, -2000)$	2542	35743	D	D	93	2466	173	2667	5	25	100

Παράδειγμα 2: Συνάρτηση Freudenstein και Roth ($m = n = 2$)

x^0	Armijo		FR		PR		BFGS		DRCON		
	IT	FE	IT	FE	IT	FE	IT	FE	IT	FE	ASG
$(0.5, -2)^a$	1827	24155	18	356	8	187	7	138	23	111	460
$(0.5, 1000)$	1380	18770	D	D	D	D	D	D	22	110	440
$(-2, -2)$	1119	14625	19	336	8	180	7	121	23	110	460
$(-20, 20)$	1851	24986	24	451	10	211	9	149	11	55	220
$(4.5, 4.5)$	1239	16289	18	342	9	196	8	129	5	25	100
$(10, 100)$	1845	24664	10	200	9	194	9	170	16	80	320
$(12, 2)$	2027	26886	70	1145	8	130	7	103	24	115	480
$(4, -1000)$	1886	25597	D	D	D	D	D	D	37	181	470

Παράδειγμα 3: Σχεδόν γραμμική συνάρτηση Brown ($m = n = 3$)

x^0	Armijo		FR		PR		BFGS		DRCON		
	IT	FE	IT	FE	IT	FE	IT	FE	IT	FE	ASG
$(0.5, 0.5, 0.5)^a$	177	1330	12	177	6	93	6	91	7	36	150
$(0, 0, 3)$	221	1612	27	389	9	143	9	131	1	7	30
$(-1, 0, 3)$	233	1691	34	491	42	612	12	180	4	26	120
$(0.1, 0.1, -2)$	181	1349	52	742	9	149	9	145	16	76	330
$(1.2, 1.2, 0)$	183	1368	23	334	9	138	8	121	7	43	210
$(0.8, 0.7, -2)$	193	1446	70	996	23	336	14	216	7	31	120
$(-0.1, -0.1, -0.1)$	173	1295	20	290	7	109	6	92	6	25	90
$(1.2, 1.2, 10)$	64	563	47	711	10	165	9	139	6	29	120

ΜΕΡΟΣ Β

ΕΛΑΧΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕ ΠΕΡΙΟΡΙΣΜΟΥΣ

Εδώ παρουσιάζεται το πρόβλημα της ελαχιστοποίησης μιας συνάρτησης ορισμένης και συνεχώς διαφορίσιμης σε ένα υποσύνολο του $\mathbb{R}^n$, κάτω από μια σειρά περιορισμών ισότητας. Στο κεφάλαιο 4 διατυπώνεται το πρόβλημα και παρουσιάζονται οι ικανές και αναγκαίες συνθήκες για την ύπαρξη λύσης. Επίσης παρουσιάζονται και κάποιες κλασικές μέθοδοι επίλυσής του. Στο κεφάλαιο 5 παρουσιάζεται η επίλυση του προβλήματος ελαχιστοποίησης με περιορισμούς με τη βοήθεια γεωδαισιακών καμπυλών, δηλαδή καμπυλών ελαχίστου μήκους.

Κεφάλαιο 4

ΜΕΘΟΔΟΙ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΙΣΜΟΥ ΜΕ **ΠΕΡΙΟΡΙΣΜΟΥΣ**

Σε αυτό το κεφάλαιο παρουσιάζεται το γενικό πρόβλημα της ελαχιστοποίησης μιας πραγματικής συνάρτησης σε ένα υποσύνολο του πεδίου ορισμού της, το οποίο περιγράφεται από ένα πεπερασμένο σύνολο εξισώσεων, που καλούνται περιορισμοί. Διατυπώνονται ικανές και αναγκαίες συνθήκες για την ύπαρξη λύσης στο πρόβλημα. Παρουσιάζονται κάποιες κλασικές μέθοδοι επίλυσης, με έμφαση στην μέθοδο των πολλαπλασιαστών Lagrange.

4.1. Διατύπωση του προβλήματος

Το γενικό πρόβλημα (Π) του μη γραμμικού μαθηματικού προγραμματισμού με περιορισμούς είναι το εξής:

$$\min f(x)$$

υπό τους περιορισμούς

$$g_i(x) \geq 0, \quad i = 1, 2, K, p \quad (4.1)$$

$$h_j(x) = 0, \quad j = 1, 2, K, m \quad (4.2)$$

Οι συναρτήσεις $f, g_1, K, g_p, h_1, K, h_m$ είναι ορισμένες και διαφορίσιμες σε κάποιο ανοικτό σύνολο $D \subset \mathbb{R}^n$. Έστω $S \subset D$ ο **εφικτός χώρος** του προβλήματος, δηλαδή το σύνολο όλων των $x \in D$ που ικανοποιούν τους περιορισμούς (4.1) και (4.2). Τα στοιχεία του εφικτού χώρου καλούνται **εφικτά σημεία**. Με $N_\delta(x^0)$ συμβολίζουμε μια σφαιρική γειτονιά του σημείου x^0 με ακτίνα δ .

Ένα σημείο $x^* \in S$ καλείται **τοπικό ελάχιστο** ή **τοπική λύση** του προβλήματος, αν υπάρχει ένας θετικός αριθμός δ τέτοιος, ώστε

$$f(x) \geq f(x^*) \quad (4.3)$$

για κάθε $x \in S \cap N_\delta(x^*)$. Αν η (4.3) ισχύει για κάθε $x \in S$, τότε το x^* καλείται **ολικό ελάχιστο (ολική λύση)** του προβλήματος.

Κάθε σημείο x σε μια γειτονιά του x^* μπορεί να γραφεί σαν $x^* + z$, όπου z είναι μη μηδενικό διάνυσμα αν και μόνο αν $x \neq x^*$. Ένα διάνυσμα $z \neq 0$ καλείται **εφικτό διάνυσμα** από το x^* αν υπάρχει ένας αριθμός $\delta_1 > 0$ τέτοιος, ώστε $(x^* + \theta z) \in S \cap N_{\delta_1}(x^*)$ για κάθε $0 \leq \theta \leq \frac{\delta_1}{\|z\|}$.

Αν το x^* είναι μια τοπική λύση και το z είναι ένα εφικτό διάνυσμα, τότε πρέπει να ισχύει $f(x^* + \theta z) \geq f(x^*)$ για αρκετά μικρό θετικό θ .

4.2. Ικανές και αναγκαίες συνθήκες

Ορίζουμε:

$$I(x^*) = \{i : g_i(x^*) = 0\}$$

και υποθέτουμε ότι $z^T \nabla g_k(x^*) < 0$ για κάποιο $k \in I(x^*)$ και z ένα εφικτό διάνυσμα από το x^* . Αναπτύσσοντας κατά Taylor έχουμε:

$$g_k(x^* + \theta z) = g_k(x^*) + \theta z^T \nabla g_k(x^*) + \theta \varepsilon_k(\theta),$$

όπου το $\varepsilon_k(\theta)$ τείνει στο μηδέν καθώς $\theta \rightarrow 0$. Αν το θ είναι αρκετά μικρό, τότε $z^T \nabla g_k(x^*) + \varepsilon_k(\theta) < 0$, και αφού $g_k(x^*) = 0$, παίρνουμε $g_k(x^* + \theta z) < 0$ για όλα τα $\theta > 0$ που είναι αρκετά μικρά, κάτι που αντιβαίνει στο γεγονός ότι το z είναι εφικτό διάνυσμα. Επομένως θα πρέπει να είναι $z^T \nabla g_i(x^*) \geq 0$ για κάθε $i \in I(x^*)$. Ανάλογα αποδεικνύεται ότι ισχύει $z^T \nabla h_j(x^*) = 0$ για $j = 1, 2, K, m$.

Ορίζουμε:

$$Z^1(x^*) = \{z : z^T \nabla g_i(x^*) \geq 0, i \in I(x^*), z^T \nabla h_j(x^*) = 0, j = 1, 2, K, m\}.$$

Αν το z είναι εφικτό διάνυσμα από το x^* , τότε $z \in Z^1(x^*)$.

Ένα σύνολο $K \subset \mathbb{R}^n$ καλείται **κώνος** αν $x \in K \Rightarrow \alpha x \in K$ για κάθε μη αρνητικό αριθμό α .

Το σύνολο $Z^1(x^*)$ είναι προφανώς κώνος, και μάλιστα καλείται και **γραμμικοποιημένος κώνος** του S στο x^* , αφού παράγεται με γραμμικοποίηση των συναρτήσεων των περιορισμών στο x^* [1], [39].

Ορίζουμε:

$$Z^2(x^*) = \{z : z^T \nabla f(x^*) < 0\}.$$

Αν $z \in Z^2(x^*)$, υπάρχει ένα σημείο $x = x^* + \theta z$, αρκετά κοντά στο x^* τέτοιο, ώστε $f(x^*) > f(x)$.

Λήμμα 4.1 (Farkas):

Έστω A ένας $m \times n$ πραγματικός πίνακας και b ένα δοσμένο διάνυσμα διάστασης n . Η ανισότητα $b^T y \geq 0$ ισχύει για όλα τα διανύσματα y για τα οποία $Ay \geq 0$ αν και μόνο αν υπάρχει ένα διάνυσμα $\rho \geq 0$ διάστασης m τέτοιο ώστε $A^T \rho = b$.

Ορίζουμε τη συνάρτηση Lagrange του προβλήματος (Π) να είναι η συνάρτηση:

$$L(x, \lambda, \mu) = f(x) - \sum_{i=1}^p \lambda_i g_i(x) - \sum_{j=1}^m \mu_j h_j(x).$$

Θεώρημα 4.2:

Έστω $x^0 \in S$. Τότε $Z^1(x^0) \cap Z^2(x^0) = \emptyset$ αν και μόνο αν υπάρχουν διανύσματα λ^0, μ^0 τέτοια, ώστε

$$\begin{aligned} \nabla_x L(x^0, \lambda^0, \mu^0) &= \nabla f(x^0) - \sum_{i=1}^p \lambda_i^0 g_i(x^0) - \sum_{j=1}^m \mu_j^0 h_j(x^0) = 0, \\ \lambda_i^0 g_i(x^0) &= 0, \quad i = 1, 2, K, p, \\ \lambda^0 &\geq 0. \end{aligned}$$

Οι συνθήκες του θεωρήματος 4.2 θα μπορούσαν να αποτελέσουν αναγκαίες συνθήκες αριστότητας αν μπορούσαμε να εξασφαλίσουμε ότι $Z^1(x^*) \cap Z^2(x^*) = \emptyset$ στην τοπική λύση x^* του προβλήματος (Π), κάτι όμως που δεν ισχύει πάντα [58].

Μπορούμε να δημιουργήσουμε πιο ασθενείς συνθήκες αριστότητας χωρίς την απαίτηση το σύνολο $Z^1(x^*) \cap Z^2(x^*)$ να είναι κενό στη λύση. Ορίζουμε την **ασθενή συνάρτηση Lagrange** $\mathcal{L}$ να είναι:

$$\mathcal{L}(x, \lambda, \mu) = \lambda_0 f(x) - \sum_{i=1}^p \lambda_i g_i(x) - \sum_{j=1}^m \mu_j h_j(x).$$

Θεώρημα 4.3:

Έστω A ένας $m \times n$ πραγματικός πίνακας. Τότε είτε υπάρχει ένα διάνυσμα x διάστασης n τέτοιο, ώστε

$$Ax < 0$$

ή υπάρχει ένα μη μηδενικό διάνυσμα u διάστασης m τέτοιο, ώστε

$$u^T A = 0, \quad u \geq 0$$

αλλά όχι και τα δύο.

Θεώρημα 4.4:

Υποθέτουμε ότι οι $f, g_1, K, g_p, h_1, K, h_m$ είναι συνεχώς διαφορίσιμες σε ένα ανοιχτό σύνολο που περιέχει το S . Αν το x^* είναι μια λύση του προβλήματος (Π), τότε υπάρχουν διανύσματα $\lambda^* = (\lambda_0^*, \lambda_1^*, K, \lambda_p^*)^T$ και $\mu^* = (\mu_0^*, \mu_1^*, K, \mu_m^*)^T$ τέτοια, ώστε

$$\begin{aligned} \nabla_x \mathcal{L}(x^*, \lambda^*, \mu^*) &= \lambda_0^* \nabla f(x^*) - \sum_{i=1}^p \lambda_i^* \nabla g_i(x^*) - \sum_{j=1}^m \mu_j^* \nabla h_j(x^*) = 0, \\ \lambda_i^* g_i(x^*) &= 0, \quad i = 1, 2, K, p, \\ (\lambda^*, \mu^*) &\neq 0, \quad \lambda^* \geq 0. \end{aligned}$$

Οι συνθήκες του θεωρήματος 4.4 είναι ίδιες με αυτές του θεωρήματος 4.2 για λ_0^* θετικό, ενώ και οι συνθήκες του θεωρήματος 4.2 είναι ίδιες με αυτές του θεωρήματος 4.4 για $\lambda_0^* = 1$.

Είναι εύκολο να μετατρέψουμε ένα πρόβλημα με περιορισμούς και ισότητα και ανισότητας σε ένα άλλο ισοδύναμο πρόβλημα με περιορισμούς είτε μόνο ισότητας είτε μόνο ανισότητας. Πράγματι, αν έχουμε την ανισότητα $g(x) \geq 0$, θεωρούμε την πρόσθετη μεταβλητή y , η ανισότητα μπορεί να αντικατασταθεί με την αντίστοιχη ισότητα $g(x) - (y)^2 = 0$. Αντίστροφα, αν έχουμε τον περιορισμό ισότητας $h(x) = 0$, τότε αυτός μπορεί να αντικατασταθεί από δύο ανισότητες $h(x) \geq 0$ και $h(x) \leq 0$. Όπως βλέπουμε μια μετατροπή του προβλήματος σε ένα ισοδύναμο με ενός τύπου περιορισμούς, αν και χρήσιμη σε κάποια προβλήματα, θα είχε σαν αποτέλεσμα την αύξηση του αριθμού των μεταβλητών ή/και του αριθμού των περιορισμών.

Ορισμός:

Έστω $\mathcal{C}(A, x)$ η τομή όλων των κλειστών κώνων που περιέχουν το σύνολο $\{\alpha - x : \alpha \in A\}$. Ο κλειστός κώνος των εφαπτομένων του συνόλου A στο x ορίζεται να είναι

$$C(A, x) = \bigcap_{k=1}^{\infty} \mathcal{C}\left(A \cap N_{\frac{1}{k}}(x), x\right),$$

όπου $N_{\frac{1}{k}}(x)$ είναι μια σφαιρική γειτονιά του x και $k \in \mathbb{N}^*$.

Λήμμα 4.5:

Ένα διάνυσμα z περιέχεται $C(A, x)$ αν και μόνο αν υπάρχει μια ακολουθία διανυσμάτων $\{x^k\} \subset A$ που συγκλίνει στο x και μια ακολουθία μη αρνητικών αριθμών $\{\alpha^k\}$ τέτοια, ώστε η ακολουθία $\{\alpha^k(x^k - x)\}$ να συγκλίνει στο z .

Ο **θετικά κανονικός κώνος** ενός συνόλου $A \subset \mathbb{R}^n$, σημειώνεται με A' , και αποτελείται από όλα τα διανύσματα $x \in \mathbb{R}^n$ για τα οποία

$$x^T y \geq 0 \text{ για κάθε } y \in A. \quad (4.4)$$

Αν η φορά της ανισότητας (4.4) αντιστραφεί έχουμε τον αρνητικά κανονικό ή **πολικό** κώνο. Για δύο σύνολα $A_1 \subset \mathbb{R}^n$, $A_2 \subset \mathbb{R}^n$ ισχύει

$$A_1 \subset A_2 \Rightarrow A_2' \subset A_1'.$$

Λήμμα 4.6:

Έστω $x^0 \in S$. Τότε $Z^1(x^0) \cap Z^2(x^0) = \emptyset$ αν και μόνο αν

$$\nabla f(x^0) \in (Z^1(x^0))'.$$

Λήμμα 4.7:

Έστω x^0 μια λύση του προβλήματος (Π). Τότε

$$\nabla f(x^0) \in (C(S, x^0))'$$

Θεώρημα 4.8: (Γενικευμένες αναγκαίες συνθήκες Kuhn – Tucker)

Έστω x^* μια λύση του προβλήματος (Π) και ας υποθέσουμε ότι:

$$(Z^1(x^*))' = (C(S, x^*))'.$$

τότε υπάρχουν διανύσματα $\lambda^* = (\lambda_0^*, \lambda_1^*, K, \lambda_p^*)^T$ και $\mu^* = (\mu_0^*, \mu_1^*, K, \mu_m^*)^T$

τέτοια, ώστε

$$\begin{aligned} \nabla f(x^*) - \sum_{i=1}^p \lambda_i^* g_i(x^*) - \sum_{j=1}^m \mu_j^* h_j(x^*) &= 0, \\ \lambda_i^* g_i(x^*) &= 0, \quad i = 1, 2, K, p, \\ \lambda^* &\geq 0. \end{aligned}$$

Για την παραγωγή δεύτερης τάξης συνθηκών αριστότητας, πρέπει να υποθέσουμε ότι οι $f, g_1, K, g_p, h_1, K, h_m$ είναι δύο φορές συνεχώς διαφορίσιμες.

Έστω $x \in S$. Ορίζουμε:

$$\hat{Z}^1(x) = \{z : z^T \nabla g_i(x) = 0, i \in I(x), z^T \nabla h_j(x) = 0, j = 1, 2, K, m\}.$$

Λέμε ότι το $x^0 \in S$ πληρεί τις συνθήκες δεύτερης τάξης αν κάθε μη μηδενικό $z \in \hat{Z}^1(x^0)$ είναι εφαπτόμενο σε ένα δις διαφορίσιμο τόξο που περιέχεται στο σύνορο του S . Δηλαδή, για κάθε $z \in \hat{Z}^1(x^0)$ υπάρχει μια δις διαφορίσιμη συνάρτηση $\alpha : \mathbb{R} \supset [0, \varepsilon] \rightarrow \mathbb{R}^n$ τέτοια, ώστε $\alpha(0) = x^0$,

$$g_i(\alpha(\theta)) = 0, i \in I(x^0), \quad h_j(\alpha(\theta)) = 0, j = 1, 2, K, m$$

για $0 \leq \theta \leq \varepsilon$ και

$$\frac{d\alpha(0)}{d\theta} = \lambda z$$

για κάποιο θετικό αριθμό λ .

Θεώρημα 4.9 (Αναγκαίες συνθήκες δεύτερης τάξης):

Έστω x^* μια λύση του προβλήματος (Π) και ας υποθέσουμε ότι υπάρχουν διανύσματα $\lambda^* = (\lambda_0^*, \lambda_1^*, K, \lambda_p^*)^T$ και $\mu^* = (\mu_0^*, \mu_1^*, K, \mu_m^*)^T$ που ικανοποιούν τις συνθήκες του θεωρήματος 4.8. Αν επιπλέον υποθέσουμε ότι το x^* πληρεί τις συνθήκες δεύτερης τάξης, τότε για $z \neq 0$ με $z \in \hat{Z}^1(x^*)$, έχουμε

$$z^T \left[\nabla^2 f(x^*) - \sum_{i=1}^p \lambda_i^* \nabla^2 g_i(x^*) - \sum_{j=1}^m \mu_j^* \nabla^2 h_j(x^*) \right] z \geq 0.$$

Αποδεικνύεται ότι αν τα διανύσματα $\nabla g_i(x)$, $i \in I(x^0)$, $\nabla h_j(x)$, $j=1,2,K,m$ είναι γραμμικά ανεξάρτητα, τότε το $x \in S$ πληρεί τις συνθήκες δεύτερης τάξης [70].

Σημειώνουμε με $\hat{I}(x^*)$ το σύνολο των δεικτών i για τους οποίους $g_i(x^*)=0$ και ικανοποιούνται οι συνθήκες του θεωρήματος 4.8 για θετικό λ_i^* . Προφανώς $\hat{I}(x^*) \subset I(x^*)$. Έστω

$$\hat{Z}^1(x) = \left\{ z : z^T \nabla g_i(x^*) = 0, i \in \hat{I}(x^*), z^T \nabla g_i(x^*) \geq 0, i \in I(x^*), \right. \\ \left. z^T \nabla h_j(x^*) = 0, j=1,2,K,m \right\}$$

Παρατηρούμε ότι $\hat{Z}^1(x^*) \subset Z^1(x^*)$.

Θεώρημα 4.10:

Έστω x^* ένα εφικτό σημείο του προβλήματος (Π). Αν υπάρχουν διανύσματα λ^*, μ^* που ικανοποιούν τις σχέσεις:

$$\nabla_x L(x^*, \lambda^*, \mu^*) = \nabla f(x^*) - \sum_{i=1}^p \lambda_i^* \nabla g_i(x^*) - \sum_{j=1}^m \mu_j^* \nabla h_j(x^*) = 0, \\ \lambda_i^* g_i(x^*) = 0, \quad i=1,2,K,p, \\ \lambda^* \geq 0$$

και για κάθε $z \neq 0$ με $z \in \hat{Z}^1(x^*)$, έχουμε

$$z^T \left[\nabla^2 f(x^*) - \sum_{i=1}^p \lambda_i^* \nabla^2 g_i(x^*) - \sum_{j=1}^m \mu_j^* \nabla^2 h_j(x^*) \right] z > 0, \quad (4.5)$$

τότε το x^* είναι ένα γνήσιο τοπικό ελάχιστο του προβλήματος (Π).

Παρατηρούμε ότι η ποσότητα μέσα στις αγκύλες στην σχέση (4.5) είναι ο πίνακας των δευτέρων παραγώγων της $L(x, \lambda, \mu)$ ως προς x .

Σημείωση:

Για τις αποδείξεις των λημάτων και θεωρημάτων της παρούσας παραγράφου παραπέμπουμε στα [3, 58, 67, 70]. Επίσης για άλλες συνθήκες αριστότητας, εκτός αυτών των Kuhn – Tucker παραπέμπουμε στα [1, 5, 6, 39, 40, 53], σημειώνοντας ωστόσο ότι η αντίστοιχη βιβλιογραφία είναι αρκετά μεγάλη.

4.3. Ακρότατα με περιορισμούς ισότητας και η μέθοδος Lagrange

Θεωρούμε το πρόβλημα της εύρεσης του ελαχίστου (ή του μεγίστου) μιας πραγματικής συνάρτησης f με πεδίο ορισμού $D \subset \mathbb{R}^n$, κάτω από τους περιορισμούς

$$h_i(x) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, m \quad (m < n) \quad (4.6)$$

όπου καθένα από τα h_i είναι μια πραγματική συνάρτηση ορισμένη στο D . Η υπόθεση ότι ο αριθμός των περιορισμών ισότητας είναι μικρότερος από τον αριθμό των μεταβλητών απλουστεύει την μελέτη. Το πρόβλημα λοιπόν είναι να βρούμε ένα ακρότατο της f στο χωρίο που προσδιορίζεται από τις εξισώσεις (4.6). Η πρώτη και πιο διαισθητική μέθοδος επίλυσης τέτοιων προβλημάτων, αφορά την απαλοιφή m μεταβλητών του προβλήματος, χρησιμοποιώντας τις εξισώσεις (4.6). Οι συνθήκες για μια τέτοια απαλοιφή καθορίζονται από το Θεώρημα Πεπλεγμένων Συναρτήσεων [89]. Το θεώρημα αυτό υποθέτει την διαφορισιμότητα των συναρτήσεων h_i και ότι ο

$m \times n$ Ιακωβιανός πίνακας $\left[\frac{\partial h_i}{\partial x_j} \right]$ έχει τάξη m . Η επίλυση των εξισώσεων των περιορισμών ως προς m μεταβλητές συναρτήσεων των $n - m$ υπόλοιπων, μπορεί στην πράξη να αποδειχθεί πολύ δύσκολη, αν όχι αδύνατη.

Μια άλλη μέθοδος, στηρίζεται στην ιδέα να μετατρέψουμε το πρόβλημα με περιορισμούς σε ένα άλλο χωρίς περιορισμούς, και προτάθηκε από τον Lagrange. Πολλά αποτελέσματα στον μαθηματικό προγραμματισμό είναι στην πραγματικότητα μια ευθεία επέκταση και γενίκευση της μεθόδου Lagrange, κυρίως σε προβλήματα με περιορισμούς ανισότητας.

Θεώρημα 4.11 (Θεώρημα Πεπλεγμένων Συναρτήσεων):

Υποθέτουμε ότι οι ϕ_i είναι πραγματικές συναρτήσεις ορισμένες στο D και συνεχώς διαφορίσιμες σε ένα ανοιχτό σύνολο $D^1 \subset D \subset \mathbb{R}^{m+p}$, όπου $p > 0$ και $\phi_i(x^0, y^0) = 0$ για $i = 1, 2, \dots, m$ και $(x^0, y^0) \in D^1$. Υποθέτουμε ότι ο

Ιακωβιανός πίνακας $\left[\frac{\partial \phi_i(x^0, y^0)}{\partial x_j} \right]$ έχει τάξη m . Τότε υπάρχει μια γειτονιά

$N_\delta(x^0, y^0) \subset D^1$, ένα ανοιχτό σύνολο $D^2 \subset \mathbb{R}^p$ που περιέχει το y^0 και πραγματικές συναρτήσεις ψ_k , $k = 1, 2, \dots, m$, συνεχώς διαφορίσιμες στο D^2 , τέτοιες ώστε να ικανοποιούνται οι παρακάτω συνθήκες:

$$x_k^0 = \psi_k(y^0), \quad k = 1, 2, \dots, m.$$

Για κάθε $y \in D^2$, έχουμε

$$\phi_i(\psi(y), y) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, m$$

όπου $\psi(y) = (\psi_1(y), \psi_2(y), \dots, \psi_m(y))$ και για κάθε $(x, y) \in N_\delta(x^0, y^0)$ ο Ιακωβιανός πίνακας $\left[\frac{\partial \phi_i(x, y)}{\partial x_j} \right]$ έχει τάξη m . Επιπλέον, για $y \in D^2$, οι μερικές παράγωγοι των $\psi_k(y)$ είναι οι λύσεις του συστήματος των γραμμικών εξισώσεων

$$\sum_{k=1}^m \frac{\partial \phi_i(\psi(y), y)}{\partial x_k} \frac{\partial \psi_k(y)}{\partial y_j} = - \frac{\partial \phi_i(\psi(y), y)}{\partial y_j}, \quad i = 1, 2, \dots, m.$$

Θεώρημα 4.12:

Έστω f και h_i , $i = 1, 2, \dots, m$, πραγματικές συναρτήσεις στο $D \subset \mathbb{R}^n$ και συνεχώς διαφορίσιμες σε μια γειτονιά $N_\varepsilon(x^*) \subset D$. Υποθέτουμε ότι το x^* είναι ένα τοπικό ελάχιστο ή τοπικό μέγιστο της f για όλα τα σημεία $x \in N_\varepsilon(x^*)$ που ικανοποιούν επίσης τις

$$h_i(x) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, m.$$

Υποθέτουμε επίσης ότι ο Ιακωβιανός πίνακας των $h_i(x^*)$ έχει τάξη m . Κάτω από αυτές τις υποθέσεις η κλίση της f στο x^* είναι ένας γραμμικός συνδυασμός των κλίσεων των h_i στο x^* . Δηλαδή, υπάρχουν πραγματικοί αριθμοί λ_i^* τέτοιοι ώστε

$$\nabla f(x^*) = \sum_{i=1}^m \lambda_i^* \nabla h_i(x^*).$$

Η σχέση ανάμεσα στην κλίση της προς ελαχιστοποίηση ή μεγιστοποίηση συνάρτησης και των κλίσεων των συναρτήσεων των περιορισμών στο τοπικό ακρότατο, όπως εκφράζεται στο προηγούμενο θεώρημα, οδηγεί στην δημιουργία της συνάρτησης Lagrange, $L(x, \lambda)$ που ορίζεται από την σχέση

$$L(x, \lambda) = f(x) - \sum_{i=1}^m \lambda_i h_i(x),$$

όπου τα λ_i καλούνται **πολλαπλασιαστές Lagrange**.

Η μέθοδος Lagrange συνίσταται στο μετασχηματισμό ενός προβλήματος ελαχιστοποίησης με περιορισμούς στο πρόβλημα εύρεσης ενός στάσιμου σημείου της συνάρτησης Lagrange. Αυτό φαίνεται κι από το παρακάτω θεώρημα:

Θεώρημα 4.13:

Υποθέτουμε ότι οι f , h_i , $i = 1, 2, \dots, m$, ικανοποιούν τις υποθέσεις του θεωρήματος 4.2. Τότε υπάρχει ένα διάνυσμα πολλαπλασιαστών $\lambda^* = (\lambda_1^*, \lambda_2^*, \dots, \lambda_m^*)^T$ τέτοιο ώστε

$$\nabla L(x^*, \lambda^*) = 0.$$

Για τις αποδείξεις των θεωρημάτων 4.2 και 4.3 βλέπε [3, 9, 70, 74].

Το θεώρημα 4.3 παρέχει αναγκαίες συνθήκες για ακρότατο της f με περιορισμούς ισότητας. Ικανές συνθήκες για τέτοιο ακρότατο παρέχονται από το επόμενο θεώρημα. Το σύμβολο $\nabla_{\xi}^j \phi(\xi, \eta)$ δηλώνει ότι η ϕ παραγωγίζεται j φορές μόνο ως προς ξ (Για $j=1$ ο εκθέτης παραλείπεται). Τότε έχουμε:

Θεώρημα 4.14:

Έστω f , h_i , $i=1,2,K,m$, δύο φορές συνεχώς διαφορίσιμες πραγματικές συναρτήσεις στο $\mathbb{R}^n$. Αν υπάρχουν διάνυσματα $x^* \in \mathbb{R}^n$, $\lambda^* \in \mathbb{R}^m$ τέτοια ώστε

$$\nabla L(x^*, \lambda^*) = 0$$

και για κάθε μη μηδενικό διάνυσμα $z \in \mathbb{R}^n$, το οποίο ικανοποιεί την σχέση

$$z^T \nabla h_i(x^*) = 0, \quad i=1,2,K,m$$

τότε

$$z^T \nabla_x^2 L(x^*, \lambda^*) z > 0, \quad (4.7)$$

τότε η f παρουσιάζει αυστηρό τοπικό ελάχιστο στο x^* , κάτω από τους περιορισμούς $h_i(x) = 0$, $i=1,2,K,m$. Αν αντιστραφεί η φορά της ανισότητας στην (4.7), τότε η f παρουσιάζει αυστηρό τοπικό μέγιστο στο x^* .

Απόδειξη

Βλέπε [70]

Οι ικανές συνθήκες που διατυπώνονται στο προηγούμενο θεώρημα περιλαμβάνουν τον προσδιορισμό του προσήμου μιας τετραγωνικής μορφής, που υπόκειται σε γραμμικούς περιορισμούς. Αυτό μπορεί να προσδιοριστεί χάρη σε ένα αποτέλεσμα του Mann στο [64]. Έστω $A = [a_{ij}]$ ένας $n \times n$ συμμετρικός πραγματικός πίνακας και $B = [\beta_{ij}]$ ένας $n \times m$ πραγματικός πίνακας. Έστω M_{pq} ο πίνακας που προκύπτει αν από έναν πίνακα M κρατήσουμε μόνο τα στοιχεία των p πρώτων γραμμών και των q πρώτων στηλών.

Θεώρημα 4.15:

Υποθέτουμε ότι $\det[B_{mm}] \neq 0$. Τότε η τετραγωνική μορφή

$$\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \alpha_{ij} \xi_i \xi_j \quad (4.8)$$

είναι θετική για όλα τα μη μηδενικά ξ που ικανοποιούν την σχέση:

$$\sum_{i=1}^n \beta_{ij} \xi_i = 0, \quad j=1,2,K,m \quad (4.9)$$

αν και μόνο αν

$$(-1)^m \det \begin{bmatrix} A_{pp} & B_{pm} \\ B_{pm}^T & 0 \end{bmatrix} > 0$$

για $p = m+1, K, n$. Όμοια η (4.8) είναι αρνητική για όλα τα μη μηδενικά ξ που ικανοποιούν την (4.9) αν και μόνο αν

$$(-1)^p \det \begin{bmatrix} A_{pp} & B_{pm} \\ B_{pm}^T & 0 \end{bmatrix} > 0$$

για $p = m+1, K, n$.

Ας υποθέσουμε τώρα ότι ο $n \times m$ Ιακωβιανός πίνακας $\left[\frac{\partial h_i(x^*)}{\partial x_j} \right]$ έχει τάξη m

και ότι οι μεταβλητές έχουν διαταχθεί έτσι ώστε

$$\det \begin{bmatrix} \frac{\partial h_1(x^*)}{\partial x_1} & L & \frac{\partial h_m(x^*)}{\partial x_1} \\ M & O & M \\ \frac{\partial h_1(x^*)}{\partial x_m} & L & \frac{\partial h_m(x^*)}{\partial x_m} \end{bmatrix} \neq 0.$$

Τότε ισχύει:

Πόρισμα 4.16:

Έστω $f, h_i, i = 1, 2, K, m$, δύο φορές συνεχώς διαφορίσιμες πραγματικές συναρτήσεις. Αν υπάρχουν διανύσματα $x^* \in \mathbb{R}^n, \lambda^* \in \mathbb{R}^m$ τέτοια ώστε

$$\nabla L(x^*, \lambda^*) = 0$$

και αν

$$(-1)^m \det \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 L(x^*, \lambda^*)}{\partial x_1 \partial x_1} & L & \frac{\partial^2 L(x^*, \lambda^*)}{\partial x_1 \partial x_p} & \frac{\partial h_1(x^*)}{\partial x_1} & L & \frac{\partial h_m(x^*)}{\partial x_1} \\ M & O & M & M & O & M \\ \frac{\partial^2 L(x^*, \lambda^*)}{\partial x_p \partial x_1} & L & \frac{\partial^2 L(x^*, \lambda^*)}{\partial x_p \partial x_p} & \frac{\partial h_1(x^*)}{\partial x_p} & L & \frac{\partial h_m(x^*)}{\partial x_p} \\ \frac{\partial h_1(x^*)}{\partial x_1} & L & \frac{\partial h_m(x^*)}{\partial x_1} & 0 & L & 0 \\ M & O & M & M & O & M \\ \frac{\partial h_1(x^*)}{\partial x_p} & L & \frac{\partial h_m(x^*)}{\partial x_p} & 0 & L & 0 \end{bmatrix} > 0 \quad (4.10)$$

για $p = m+1, K, n$, τότε η f παρουσιάζει γνήσιο τοπικό ελάχιστο στο x^* , έτσι ώστε

$$h_i(x^*) = 0, \quad i = 1, 2, K, m.$$

Παρόμοιο αποτέλεσμα ισχύει για αυστηρά μέγιστα, αν αντικαταστήσουμε το $(-1)^m$ στην (4.10) με $(-1)^p$.

Δεύτερης τάξης αναγκαίες συνθήκες παρόμοιες με εκείνες του θεωρήματος 1.3, στην περίπτωση προβλημάτων με περιορισμούς ισότητας, προκύπτουν με ευθεία γενίκευση των ικανών και αναγκαίων συνθηκών δεύτερης τάξης για προβλήματα χωρίς περιορισμούς.

Στο θεώρημα 4.2 υποθέσαμε ότι ο Ιακωβιανός πίνακας $\left[\frac{\partial h_i(x^*)}{\partial x_j} \right]$ έχει τάξη m ($< n$), ίση με τον αριθμό των περιορισμών. Το επόμενο θεώρημα γενικεύει το θεώρημα 4.2 χωρίς την υπόθεση για την τάξη της Ιακωβιανής.

Θεώρημα 4.17:

Έστω f , h_i , $i=1,2,K,m$, συνεχώς διαφορίσιμες πραγματικές συναρτήσεις με πεδίο ορισμού $D \subset \mathbb{R}^n$. Αν το x^* είναι σημείο τοπικού ακροτάτου της f για όλα τα x σε μια περιοχή του x^* που ικανοποιούν την

$$h_i(x^*) = 0, \quad i=1,2,K,m$$

τότε υπάρχουν $m+1$ πραγματικοί αριθμοί $\lambda_0^*, \lambda_1^*, K, \lambda_m^*$, όχι όλοι μηδέν, τέτοιοι ώστε

$$\lambda_0^* \nabla f(x^*) - \sum_{i=1}^m \lambda_i^* \nabla h_i(x^*) = 0.$$

4.4. Μέθοδοι επίλυσης

Τα προβλήματα μη γραμμικού προγραμματισμού με περιορισμούς είναι πιο δύσκολο να επιλυθούν από ότι τα προβλήματα χωρίς περιορισμούς με συγκρίσιμο αριθμό ανεξάρτητων μεταβλητών και βαθμό μη γραμμικότητας, εξαιτίας της απαίτησης η λύση να ικανοποιεί τους περιορισμούς. Η πλειοψηφία των μεθόδων που έχουν προταθεί μέχρι σήμερα στη βιβλιογραφία επικεντρώνονται γύρω από τρεις κυρίως ιδέες:

1. Επέκταση της γραμμικής μεθοδολογίας σε μη γραμμικά προβλήματα, μέσω γραμμικών προσεγγίσεων.
2. Μετασχηματισμό του προβλήματος με περιορισμούς σε μια ακολουθία προβλημάτων χωρίς περιορισμούς με τη χρήση συναρτήσεων ποινών (penalty functions).
3. Χρήση ευέλικτων ανοχών (tolerances) για να χειριζόμαστε και εφικτά και μη εφικτά διανύσματα $\mathbb{R}^n$.

4.4.1. Μέθοδοι γραμμικής προσέγγισης

Οι μέθοδοι γραμμικού προγραμματισμού έχουν με επιτυχία εφαρμοστεί σε πολυδιάστατα προβλήματα με γραμμικούς περιορισμούς και ισότητα και ανισότητα, κι έτσι η γραμμικοποίηση ενός μη γραμμικού προβλήματος είναι μια από τις πιο προφανείς προσεγγίσεις για την επίλυση μη γραμμικών προβλημάτων. Οι δύο αποτελεσματικές μέθοδοι που θα παρουσιαστούν εδώ, αφορούν τη γραμμικοποίηση των περιορισμών, αφήνοντας την αντικειμενική συνάρτηση μη γραμμική. Μια από τις μεθόδους χρησιμοποιεί πίνακες προβολής, για να προβάλουν την διεύθυνση αναζήτησης σε ένα περιορισμένο σύνολο ενεργών περιορισμών. Η άλλη χρησιμοποιεί την reduced gradient.

Η γραμμική προσέγγιση των μη γραμμικών συστημάτων επιτυγχάνεται με αντικατάσταση των μη γραμμικών συναρτήσεων του προβλήματος (Π)

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x), \quad x \in \mathbb{R}^n \\ \text{υπό τους περιορισμούς} \quad & \begin{cases} h_j(x) = 0, & j = 1, 2, \dots, m \\ g_j(x) \geq 0, & j = m+1, \dots, p \end{cases} \end{aligned}$$

με τις πρώτης τάξης προσεγγίσεις τους με σειρές Taylor γύρω από το σημείο $x^{(k)}$. Με επαναλαμβανόμενες γραμμικοποιήσεις των μη γραμμικών συναρτήσεων σε κάθε ενδιάμεση λύση, γεννιέται μια ακολουθία $x^{(0)}, x^{(1)}, \dots, x^{(k)}$, η οποία, κάτω από κατάλληλες προϋποθέσεις, συγκλίνει σε μια βέλτιστη λύση x^* του αρχικού μη γραμμικού προβλήματος.

Έτσι το πρόβλημα (Π) μετατρέπεται στο παρακάτω:

$$\min \quad f(x^{(k)}) + \nabla^T f(x^{(k)})(x - x^{(k)}), \quad x \in \mathbb{R}^n$$

υπό τους περιορισμούς:

$$\begin{aligned} h_i(x^{(k)}) + \nabla^T h_i(x^{(k)})(x - x^{(k)}) &= 0, & i = 1, \dots, m \\ g_i(x^{(k)}) + \nabla^T g_i(x^{(k)})(x - x^{(k)}) &\geq 0, & i = m+1, \dots, p \end{aligned}$$

Οι συνθήκες που εγγυούνται τη σύγκλιση είναι:

1. Όλες οι συναρτήσεις να είναι συνεχείς και διαφορίσιμες.
2. η $f(x)$ είναι κυρτή και η $\sum h_j^2(x)$ είναι κυρτή στον εφικτό χώρο.
3. Οι $g_{m+1}(x), \dots, g_p(x)$ είναι κοίλες.
4. Ο εφικτός χώρος είναι μη κενός.

5. Ο εφικτός χώρος είναι κλειστός και κυρτός.
6. Υπάρχει ένα $\varepsilon > 0$ τέτοιο, ώστε $|h_j(x)| \leq \varepsilon$, $j = 1, 2, K, m$, και $g_j(x) \geq -\varepsilon$, $j = m+1, K, p$, δηλαδή, οι συναρτήσεις των περιορισμών είναι φραγμένες.

Βέβαια, στην πράξη οι περισσότεροι αλγόριθμοι συγκλίνουν σε ένα τοπικό ελάχιστο, ακόμα κι αν κάποιες από τις παραπάνω συνθήκες δεν ικανοποιούνται [3, 8, 20, 47, 49, 93].

4.4.2. Άλλες προσεγγιστικές μέθοδοι

Αντί να προσεγγίσουμε την αντικειμενική συνάρτηση με μία γραμμική συνάρτηση, μπορούμε να την προσεγγίσουμε με μία τετραγωνική. Αρχικά οι σχετικές μέθοδοι δεν ήταν αποτελεσματικές, ωστόσο η εξέλιξη των μεθόδων του μη γραμμικού προγραμματισμού, οδήγησε σε καλύτερους αλγόριθμους [3, 8, 34, 35, 49, 60, 69, 81].

4.4.3. Προβολικές μέθοδοι

Οι προβολικές μέθοδοι ή μέθοδοι εφικτών διανυσμάτων ή μέθοδοι κλίσης μεγάλου βήματος στηρίζονται στο γεγονός ότι οι γραμμικοί ή γραμμικοποιημένοι περιορισμοί ορίζουν έναν γραμμικό υπόχωρο, και μια κατάλληλη διεύθυνση αναζήτησης s μπορεί να προβληθεί σε αυτόν τον υπόχωρο.

Όλες οι προβολικές μέθοδοι ακολουθούν τα παρακάτω γενικά βήματα σε κάθε επανάληψη k :

1. Ο αλγόριθμος ξεκινά σε ένα εφικτό σημείο $x^{(k)}$.
2. Καθορίζεται ένα εφικτό διάνυσμα $s^{(k)}$.
3. Βρίσκουμε ένα μήκος βήματος t_k στην εφικτή διεύθυνση που ελαχιστοποιεί την $f(x)$ έτσι ώστε το $x^{(k+1)} = x^{(k)} + t_k s^{(k)}$ να είναι εφικτό σημείο.

Οι αλγόριθμοι διαφοροποιούνται κυρίως ως προς την επιλογή της διεύθυνσης $s^{(k)}$. Πρόκειται ουσιαστικά σε επέκταση των μεθόδων για προβλήματα χωρίς περιορισμούς. Για περισσότερες λεπτομέρειες παραπέμπουμε στα [3, 37, 38, 49, 78, 79, 87, 88, 103, 104].

4.4.4. Μέθοδοι που χρησιμοποιούν συναρτήσεις ποινής

Η φιλοσοφία των μεθόδων αυτών είναι να μετασχηματίσουν ένα πρόβλημα μη γραμμικού προγραμματισμού με περιορισμούς σε ένα άλλο χωρίς περιορισμούς ή μια ακολουθία προβλημάτων χωρίς περιορισμούς. Το πλεονέκτημα που προσφέρει η

ελαχιστοποίηση ενός προβλήματος χωρίς περιορισμούς είναι ότι μπορούν να χρησιμοποιηθούν πιο απλοί αλγόριθμοι. Οι μέθοδοι συναρτήσεων ποινής εκμεταλλεύονται ένα διαρκές «πάρε-δώσε» μεταξύ της ικανοποίησης των περιορισμών και την ελαχιστοποίηση της $f(x)$, αποδίδοντας κατάλληλους συντελεστές βαρύτητας (βάρη) στην $f(x)$ και τους περιορισμούς.

Οι μέθοδοι συναρτήσεων ποινής μπορούν να χωριστούν σε δύο κατηγορίες: τις παραμετρικές και τις μη παραμετρικές.

Οι παραμετρικές μέθοδοι χαρακτηρίζονται από μια ή περισσότερες ρυθμίσιμες παραμέτρους που ζυγίζουν (weight) την συνάρτηση ποινής που σχηματίζεται από τους περιορισμούς. Τέτοιες μέθοδοι είναι η παραμετρική μέθοδος των Fiacco και McCormick [30] και ο αλγόριθμος του Zangwill [102]. Οι παραμετρικές μέθοδοι χωρίζονται σε τρεις κατηγορίες:

- (1) τις μεθόδους εσωτερικού σημείου, στις οποίες σκοπός είναι να διατηρηθούμε μακριά από το σύνορο του εφικτού χώρου (να περιορίσουμε το $x^{(k)}$ στο εσωτερικό του εφικτού χώρου) προσθέτοντας την συνάρτηση ποινής.
- (2) τις μεθόδους εξωτερικού σημείου, στις οποίες δημιουργείται μια ακολουθία μη εφικτών σημείων που συγκλίνουν σε μία εφικτή λύση. Η ποινή εμποδίζει το x να απομακρυνθεί από τον εφικτό χώρο.
- (3) τις μικτές μεθόδους (που χρησιμοποιούνται ιδιαίτερα όταν έχουμε περιορισμούς ισότητας), στις οποίες κάποιοι περιορισμοί ικανοποιούνται κατά την ελαχιστοποίηση και κάποιοι όχι. Όλοι όμως οι περιορισμοί ικανοποιούνται (με κάποια ανοχή) στην λύση.

Οι μη παραμετρικές μέθοδοι αντιμετωπίζουν την αντικειμενική συνάρτηση σαν έναν πρόσθετο τεχνητό περιορισμό, ο οποίος μεταβάλλεται καθώς λαμβάνονται νέες πληροφορίες από τον αλγόριθμο. Τέτοιες είναι η μη παραμετρική μέθοδος των Fiacco και McCormick [31] και η μέθοδος του Huard [50].

Γενικά, λοιπόν, στις μεθόδους συναρτήσεων ποινής, το πρόβλημα (Π) μετασχηματίζεται στο πρόβλημα:

$$\min P(x^{(k)}, \rho^{(k)}) = f(x^{(k)}) + \sum_{i=1}^m \rho_i^{(k)} H(h_i(x^{(k)})) + \sum_{i=m+1}^p \rho_i^{(k)} G(g_i(x^{(k)})).$$

Η $P(x^{(k)}, \rho^{(k)})$ καλείται συνάρτηση ποινής και τα $\rho_i^{(k)} \geq 0$ συντελεστές βαρύτητας.

Τυπικές επιλογές για το συναρτησιακό $G(g_i(x^{(k)}))$ είναι:

- (1) $G(g_i(x)) \rightarrow +\infty$ καθώς $g_i(x) \rightarrow 0^+$ (μέθοδοι εσωτερικού σημείου)
- (2) $G(g_i(x)) \rightarrow 0$ καθώς $g_i(x) \rightarrow 0^-$ (μέθοδοι εξωτερικού σημείου)

$$(3) \quad G(g_i(x)) > 0 \text{ για } g_i(x) < 0 \text{ και } G(g_i(x)) = 0 \text{ για } g_i(x) \geq 0.$$

Τυπική επιλογή για το συναρτησιακό $H(h_i(x^{(k)}))$ είναι: $H(g_i(x)) \rightarrow 0$ καθώς $h_i(x) \rightarrow 0$, π.χ. $H(h_i(x)) = h_i^2(x)$.

Επιπλέον απαιτείται να ισχύουν:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \sum_{i=m+1}^p \rho_i^{(k)} G(g_i(x^{(k)})) = \lim_{k \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^m \rho_i^{(k)} H(h_i(x^{(k)})) = \lim_{k \rightarrow \infty} |P(x^{(k)}, \rho^{(k)}) - f(x^{(k)})| = 0,$$

δηλαδή η επίδραση των περιορισμών στην συνάρτηση ποινής σταδιακά μειώνεται και οριακά μηδενίζεται.

Μέθοδος ποινής είναι και η μέθοδος των πολλαπλασιαστών Lagrange που είδαμε παραπάνω. Για άλλες μεθόδους, βλέπε [3, 15, 17, 27, 28, 29, 30, 31, 49, 50, 57, 61, 62, 102].

4.4.5. Μέθοδοι ευέλικτων ανοχών

Οι μέθοδοι αυτές βελτιώνουν την τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης χρησιμοποιώντας πληροφορία που λαμβάνεται στα εφικτά σημεία, αλλά και σε κάποια μη εφικτά σημεία, που όμως βρίσκονται «κοντά» στον εφικτό χώρο. Η έννοια της εγγύτητας μεταβάλλεται καθώς εξελίσσεται ο αλγόριθμος [49].

Κεφάλαιο 5

ΕΛΑΧΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΣΥΝΑΡΤΗΣΕΩΝ ΜΕ ΠΕΡΙΟΡΙΣΜΟΥΣ ΚΑΤΑ ΜΗΚΟΣ ΓΕΩΔΑΙΣΙΑΚΩΝ ΚΑΜΠΥΛΩΝ

Στο κεφάλαιο αυτό παρουσιάζεται μια οικογένεια μεθόδων ελαχιστοποίησης, οι οποίες χρησιμοποιούν αντί για ένα διάνυσμα αντίχρευσσης, μια καμπύλη αντίχρευσσης και συγκεκριμένα μια γεωδαισιακή καμπύλη της επιφάνειας των περιορισμών. Αρχικά διατυπώνεται το πρόβλημα, δίνεται ο ορισμός της γεωδαισιακής και παρουσιάζεται ο τρόπος προσδιορισμού της. Στη συνέχεια παρουσιάζεται η οικογένεια των νέων μεθόδων.

5.1. Διατύπωση του προβλήματος και βασικοί ορισμοί

Θεωρούμε το γενικό πρόβλημα (Γ) της ελαχιστοποίησης μιας συνεχώς διαφορίσιμης συνάρτησης $f(x)$, η οποία υπόκειται σε περιορισμούς ισότητας. Συγκεκριμένα:

$$\min f(x)$$

υπό τους περιορισμούς

$$h(x) = 0 \quad (5.1)$$

όπου $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$, $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, $h: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ με $h = (h_1, h_2, \dots, h_m)^T$.

Υποθέτουμε ότι το σύνολο $\{\nabla h_i(x), i = 1, 2, \dots, m\}$ είναι γραμμικά ανεξάρτητο, οπότε οι εξισώσεις (5.1) ορίζουν μια επιφάνεια S

$$S = \{x \in \mathbb{R}^n \mid h(x) = 0, h: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m, m < n\}$$

Για την επίλυση του προβλήματος (Γ) θα δημιουργήσουμε μια ακολουθία σημείων $x^{(0)}, x^{(1)}, \dots, x^{(k)}$, η οποία συγκλίνει σε μια βέλτιστη λύση x^* του προβλήματος. Η ακολουθία θα δημιουργείται μέσω μιας σχέσης της μορφής

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + s(x^{(k)}, t_k),$$

όπου $s(x^{(k)}, t_k)$ είναι ένα τόξο της επιφάνειας S .

Θεωρούμε την οικογένεια

$$X = \{x: [0, t_f] \rightarrow \mathbb{R}^n \mid x \in S\}$$

των ομαλών καμπυλών της S που συνδέουν δύο σημεία $x(0)$ και $x(t_f)$ της S .

Μια **γεωδαισιακή καμπύλη** που συνδέει δύο σημεία $x(0)$ και $x(t_f)$ της S είναι η καμπύλη της οικογένειας X που ελαχιστοποιεί το μήκος του τόξου

$$l = \int_0^{t_f} \|\dot{x}(t)\| dt \quad (5.2)$$

όπου $\|\dot{x}(t)\| = \left[\sum_{i=1}^n \dot{x}_i^2(t) \right]^{\frac{1}{2}}$.

Είναι λογικό το τόξο $s(x^{(k)}, t_k)$ όπου θα αναζητηθεί το σημείο $x^{(k+1)}$, να ανήκει στην γεωδαισιακή καμπύλη της επιφάνειας S , η οποία διέρχεται από το σημείο $x^{(k)}$, κι έχει κλίση στο $x^{(k)}$ την προβολή της αρνητικής κλίσης της αντικειμενικής συνάρτησης στο εφαπτόμενο επίπεδο της επιφάνειας S .

Επομένως το πρώτο βήμα της επίλυσης του προβλήματος (Γ) , αφορά την εύρεση της γεωδαισιακής αυτής καμπύλης.

5.2. Οι εξισώσεις Euler

Αναζητούμε τη γεωδαισιακή η οποία ξεκινά από το σημείο $x(0) = x^{(0)}$ με αρχική διεύθυνση $\dot{x}(0) = d_0$ την προβολή της $-\nabla f(x^{(0)})$ στην S .

Από τον Λογισμό των Διαφορών γνωρίζουμε (βλέπε παράρτημα) ότι αν έχουμε να λύσουμε το πρόβλημα

$$\min_{t_0}^{t_1} \int F(x) dt$$

τότε η λύση πρέπει να ικανοποιεί τις εξισώσεις Euler:

$$F_{x_i} - \frac{d}{dt} F_{\dot{x}_i} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, K, n,$$

ενώ αν έχουμε να λύσουμε το πρόβλημα

$$\min_{t_0}^{t_1} \int F(x) dt$$

$$\text{υπό τις συνθήκες} \quad h(x) = 0$$

τότε ορίζουμε μια συνάρτηση $F^*(x) = F(x) + \lambda^T(t)h(x)$, όπου $\lambda^T(t) = (\lambda_1(t), \lambda_2(t), \dots, \lambda_m(t))^T$ το διάνυσμα των πολλαπλασιαστών Lagrange και ελαχιστοποιούμε το συναρτησιακό

$$\int_{t_0}^{t_1} F^*(x) dt = \int_{t_0}^{t_1} [F(x) + \lambda^T(t)h(x)] dt$$

Έτσι οι εξισώσεις Euler γίνονται

$$F_{x_i}^* - \frac{d}{dt} F_{\dot{x}_i}^* = 0$$

5.3. Εύρεση της γεωδαισιακής καμπύλης

Εφαρμόζοντας τα παραπάνω έχουμε το πρόβλημα

$$\min \int_{t_0}^{t_1} \left[\sum_{i=1}^n \dot{x}_i^2(t) \right]^{\frac{1}{2}} dt$$

υπό τις συνθήκες $h(x) = 0$ ή
$$\begin{cases} h_1(x_1(t), x_2(t), K, x_n(t)) = 0 \\ h_2(x_1(t), x_2(t), K, x_n(t)) = 0 \\ \vdots \\ h_m(x_1(t), x_2(t), K, x_n(t)) = 0 \end{cases}$$

Τότε είναι:

$$F^*(x) = \left[\sum_{i=1}^n \dot{x}_i^2(t) \right]^{\frac{1}{2}} + \lambda^T(t) h(x)$$

$$\frac{\partial F^*}{\partial x_j} = \lambda^T(t) \frac{\partial h}{\partial x_j} \quad \text{ή} \quad \frac{\partial F^*}{\partial x} = \lambda^T(t) \nabla h(x)$$

$$\frac{\partial F^*}{\partial \dot{x}_j} = \frac{\dot{x}_j}{\|\dot{x}\|}$$

και

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial F^*}{\partial \dot{x}_j} = \frac{\frac{\dot{x}_j}{\|\dot{x}\|} \|\dot{x}\| - \dot{x}_j \frac{\sum_{i=1}^n \dot{x}_i \dot{x}_i}{\|\dot{x}\|^2}}{\|\dot{x}\|^2}$$

Έτσι οι εξισώσεις Euler γράφονται:

$$\lambda^T(t) \frac{\partial h}{\partial x_j} - \frac{\frac{\dot{x}_j}{\|\dot{x}\|} \|\dot{x}\| - \dot{x}_j \frac{\sum_{i=1}^n \dot{x}_i \dot{x}_i}{\|\dot{x}\|^2}}{\|\dot{x}\|^2} = 0, \quad j = 1, 2, K, m$$

Μπορούμε να παραμετριοποιήσουμε το γεωδαισιακό $x(t)$, $0 \leq t \leq t_f$, έτσι ώστε $\|\dot{x}(t)\| = 1$. Σ' αυτήν την περίπτωση το μήκος τόξου είναι $t_1 - t_0$ και το γεωδαισιακό καλείται παραμετριοποιημένο.

Παρατήρηση:

Η συνάρτηση $\|x(t)\| = \left[\sum_{i=1}^n \dot{x}_i^2(t) \right]^{\frac{1}{2}}$ δεν εξαρτάται άμεσα από το t και είναι μια πρώτης τάξης θετικά ομογενής συνάρτηση ως προς τα $\dot{x}_i$, $i=1,2,\dots,n$. Επομένως το συναρτησιακό που ορίζει το μήκος, εξαρτάται μόνο από την καμπύλη $x(t)$ και όχι από την επιλογή της παραμετρικής αναπαράστασης της καμπύλης.

Πράγματι, είναι $\|k \cdot x(t)\| = k \cdot \|x(t)\|$ για $k > 0$.

Μπορούμε να περάσουμε σε μια άλλη παραμετρική αναπαράσταση, θέτοντας

$$\tau = \phi(t), \text{ όπου } \phi'(t) > 0, \\ x = x(\tau), \quad y = y(\tau).$$

Τότε $\int_0^{t_1} \|x(t)\| dt = \int_0^{\tau_1} \|x(\tau)\| \phi'(t) \frac{d\tau}{\phi'(t)}$

Αφού η $\|x(t)\|$ είναι ομογενής πρώτης τάξης ως προς $\dot{x}$ θα έχουμε:

$$\|x \phi'\| = \phi' \|x\|$$

και συνεπώς $\int_0^{t_1} \|x(t)\| dt = \int_0^{\tau_1} \|x(\tau)\| d\tau$.

■

Με βάση τα παραπάνω, οι εξισώσεις Euler τελικά γράφονται:

$$\lambda^T(t) \frac{\partial h}{\partial x_j} - \dot{\lambda}_j + \dot{x}_j \sum_{i=1}^n \dot{x}_i \frac{\partial h}{\partial \dot{x}_i} = 0$$

ή σε διανυσματική μορφή:

$$\begin{aligned} \nabla^T h(x(t)) \lambda(t) - \dot{\lambda}(t) + \dot{x}(t) [\dot{x}^T(t) \lambda(t)] &= 0 \Rightarrow \\ \Rightarrow \dot{\lambda}(t) - \dot{x}(t) [\dot{x}^T(t) \lambda(t)] &= \nabla^T h(x(t)) \lambda(t) \Rightarrow \\ \Rightarrow \dot{\lambda}(t) - [\dot{x}(t) \dot{x}^T(t)] \lambda(t) &= \nabla^T h(x(t)) \lambda(t) \Rightarrow \\ \Rightarrow [I - \dot{x}(t) \dot{x}^T(t)] \dot{\lambda}(t) &= \nabla^T h(x(t)) \lambda(t) \end{aligned} \quad (5.3)$$

Σημειώσεις:

- 1) Ο πίνακας $I - \dot{x}(t) \dot{x}^T(t)$ είναι μη αντιστρέψιμος κι έτσι το σύστημα (5.3) το οποίο είναι γραμμικό ως προς $\dot{\lambda}(t)$ έχει άπειρες λύσεις (αποδεικνύεται ότι και οι δευτερεύουσες ορίζουσες του συστήματος είναι ταυτοτικά μηδέν κάτω από τις συνθήκες που έχουν τεθεί και λαβαίνοντας υπόψη ότι $\nabla h \cdot \dot{x} = 0$) κάτι που είναι φυσιολογικό, αφού σε μια επιφάνεια υπάρχουν άπειρες γεωδαισιακές καμπύλες.

- 2) Το (5.3) αποτελεί ένα σύστημα αρχικών τιμών αν θεωρήσουμε τις συνθήκες $x(0) = x^{(k)}, \mathcal{X}(0) = d^k$.

Για να λύσουμε την (5.3) θα χρησιμοποιήσουμε έναν γενικευμένο αντίστροφο του πίνακα $I - \mathcal{X}(t) \cdot \mathcal{X}^T(t)$. Αν B είναι ένας γενικευμένος αντίστροφος του $I - \mathcal{X}(t) \cdot \mathcal{X}^T(t)$ τότε

$$(5.3) \Rightarrow \mathcal{X}(t) = B \nabla^T h(x(t)) \lambda(t) + [I - B(I - \mathcal{X}(t) \cdot \mathcal{X}^T(t))] z \quad (5.4)$$

όπου z αυθαίρετο διάνυσμα

Για $z = 0$ έχουμε

$$(5.3) \Rightarrow \mathcal{X}(t) = B \nabla^T h(x(t)) \lambda(t) \quad (5.5)$$

Στη συνέχεια θα απαλείψουμε το λ από την (5.4) και την (5.5).

Γνωρίζουμε ότι ισχύει $\nabla h \cdot \mathcal{X} = 0$. Παραγωγίζοντας τη σχέση αυτή ως προς t , έχουμε ότι:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \nabla h \cdot \mathcal{X} + \nabla h \cdot \dot{\mathcal{X}} &= 0 \Rightarrow \\ (\nabla [\nabla h(x)] \cdot \mathcal{X}) \cdot \mathcal{X} + \nabla h(x) \cdot \dot{\mathcal{X}} &= 0 \Rightarrow \\ \nabla [\nabla h(x)] \cdot \mathcal{X} \cdot \mathcal{X} + \nabla h(x) \cdot \dot{\mathcal{X}} &= 0 \end{aligned} \quad (5.6)$$

όπου $\nabla [\nabla h(x)] \cdot \mathcal{X}(t)$ είναι ένας $m \times n$ πίνακας του οποίου η i σειρά είναι $\mathcal{X}^T(t) H_i(x)$, $i = 1, 2, \dots, m$, όπου H_i είναι η Εσσιανή του h_i . Είναι δηλαδή:

$$\nabla [\nabla h(x)] \cdot \mathcal{X}(t) \cdot \mathcal{X}(t) = \mathcal{X}^T(t) \cdot \begin{bmatrix} H_1(x) \\ H_2(x) \\ \vdots \\ H_m(x) \end{bmatrix} \cdot \mathcal{X}(t), \quad (5.7)$$

Χρησιμοποιώντας τη σχέση (5.5), έχουμε:

$$\begin{aligned} (5.6) \Rightarrow \nabla [\nabla h(x)] \cdot \mathcal{X} \cdot \mathcal{X} + \nabla h(x) \cdot B \cdot \nabla^T h(x(t)) \cdot \lambda(t) &= 0 \Rightarrow \\ \Rightarrow \nabla h(x) \cdot B \cdot \nabla^T h(x(t)) \cdot \lambda(t) &= -\nabla [\nabla h(x)] \cdot \mathcal{X} \cdot \mathcal{X} \end{aligned}$$

και από την σχέση (5.7), έχουμε:

$$\Rightarrow \nabla h(x) \cdot B \cdot \nabla^T h(x(t)) \cdot \lambda(t) = -\mathfrak{X}(t) \cdot \begin{bmatrix} H_1(x) \\ H_2(x) \\ \mathbf{M} \\ H_m(x) \end{bmatrix} \cdot \mathfrak{X}(t) \quad (5.8)$$

Επιλύουμε την (5.8) ως προς $\lambda(t)$. Έχουμε:

$$\Rightarrow \nabla^T h(x) \cdot \nabla h(x) \cdot B \cdot \nabla^T h(x(t)) \cdot \lambda(t) = -\nabla^T h(x) \cdot \mathfrak{X}(t) \cdot \begin{bmatrix} H_1(x) \\ H_2(x) \\ \mathbf{M} \\ H_m(x) \end{bmatrix} \cdot \mathfrak{X}(t) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \|\nabla h(x)\| \cdot B \cdot \nabla^T h(x(t)) \cdot \lambda(t) = -\nabla^T h(x) \cdot \mathfrak{X}(t) \cdot \begin{bmatrix} H_1(x) \\ H_2(x) \\ \mathbf{M} \\ H_m(x) \end{bmatrix} \cdot \mathfrak{X}(t) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow B \cdot \nabla^T h(x(t)) \cdot \lambda(t) = -\frac{1}{\|\nabla h(x)\|} \nabla^T h(x) \cdot \mathfrak{X}(t) \cdot \begin{bmatrix} H_1(x) \\ H_2(x) \\ \mathbf{M} \\ H_m(x) \end{bmatrix} \cdot \mathfrak{X}(t) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \nabla^T h(x(t)) \cdot \lambda(t) = -\frac{1}{\|\nabla h(x)\|} B^- \cdot \nabla^T h(x) \cdot \mathfrak{X}(t) \cdot \begin{bmatrix} H_1(x) \\ H_2(x) \\ \mathbf{M} \\ H_m(x) \end{bmatrix} \cdot \mathfrak{X}(t) \quad (5.9)$$

$$\Rightarrow \nabla h(x) \cdot \nabla^T h(x(t)) \cdot \lambda(t) = -\frac{1}{\|\nabla h(x)\|} \nabla h(x) \cdot B^- \cdot \nabla^T h(x) \cdot \mathfrak{X}(t) \cdot \begin{bmatrix} H_1(x) \\ H_2(x) \\ \mathbf{M} \\ H_m(x) \end{bmatrix} \cdot \mathfrak{X}(t) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \lambda(t) = -\frac{1}{\|\nabla h(x)\|} \left[\nabla h(x) \cdot \nabla^T h(x(t)) \right]^{-1} \cdot \nabla h(x) \cdot B^- \cdot \nabla^T h(x) \cdot \mathfrak{X}(t) \cdot \begin{bmatrix} H_1(x) \\ H_2(x) \\ \mathbf{M} \\ H_m(x) \end{bmatrix} \cdot \mathfrak{X}(t)$$

όπου B^- ένας γενικευμένος αντίστροφος του B .

Σχόλιο:

Αν ο αριστερός ψευδο-αντίστροφος του B είναι ο $I - \mathcal{X}(t)\mathcal{X}^T(t)$, από την σχέση (5.9) προκύπτει ότι:

$$\begin{aligned} \nabla^T h(x(t)) \cdot \lambda(t) &= -\frac{1}{\|\nabla h(x)\|} (I - \mathcal{X}(t)\mathcal{X}^T(t)) \cdot \nabla^T h(x) \cdot \mathcal{X}^T(t) \cdot \begin{bmatrix} H_1(x) \\ H_2(x) \\ \mathbf{M} \\ H_m(x) \end{bmatrix} \cdot \mathcal{X}(t) \Rightarrow \\ &\Rightarrow \nabla^T h(x(t)) \cdot \lambda(t) = -\frac{1}{\|\nabla h(x)\|} \nabla^T h(x) \cdot \mathcal{X}^T(t) \cdot \begin{bmatrix} H_1(x) \\ H_2(x) \\ \mathbf{M} \\ H_m(x) \end{bmatrix} \cdot \mathcal{X}(t) \Rightarrow \\ &\Rightarrow \nabla h(x) \cdot \nabla^T h(x(t)) \cdot \lambda(t) = -\frac{1}{\|\nabla h(x)\|} \nabla h(x) \cdot \nabla^T h(x) \cdot \mathcal{X}^T(t) \cdot \begin{bmatrix} H_1(x) \\ H_2(x) \\ \mathbf{M} \\ H_m(x) \end{bmatrix} \cdot \mathcal{X}(t) \Rightarrow \\ &\Rightarrow \lambda(t) = -\frac{1}{\|\nabla h(x)\|} \mathcal{X}^T(t) \cdot \begin{bmatrix} H_1(x) \\ H_2(x) \\ \mathbf{M} \\ H_m(x) \end{bmatrix} \cdot \mathcal{X}(t) \quad (5.10) \end{aligned}$$

Αν λοιπόν προσεγγίσουμε το $\lambda(t)$ από τη σχέση (5.10), η (5.5) γράφεται:

$$\begin{aligned} \Rightarrow \mathcal{X}(t) &= -\frac{1}{\|\nabla h(x)\|} B \cdot \nabla^T(h(x)) \cdot \mathcal{X}^T(t) \cdot \begin{bmatrix} H_1(x) \\ H_2(x) \\ \mathbf{M} \\ H_m(x) \end{bmatrix} \cdot \mathcal{X}(t) \\ \mathcal{X}(t) &= -\frac{1}{\|\nabla h(x)\|} B \cdot \nabla^T(h(x)) \cdot \mathcal{X}^T(t) \cdot \begin{bmatrix} H_1(x) \\ H_2(x) \\ \mathbf{M} \\ H_m(x) \end{bmatrix} \cdot \mathcal{X}(t) \quad (5.11) \end{aligned}$$

Το πρόβλημά μας, λοιπόν, ανάγεται στην επίλυση του διαφορικού συστήματος (5.11), με αρχικές συνθήκες:

$$x(0) = x^{(k)}, \quad \dot{x}(0) = -\frac{d(x^{(k)})}{\|d(x^{(k)})\|}$$

5.3.0.1. Επίλυση του συστήματος με κατά Taylor ανάλυση

Αν αναπτύξουμε το $x(t)$ κατά Taylor γύρω από το $t = 0$ έχουμε:

$$x(t) = x(0) + t \cdot \dot{x}(0) + \frac{1}{2} t^2 \cdot \ddot{x}(0) \Rightarrow$$

$$x(t) = x^{(k)} - t \frac{d(x^{(k)})}{\|d(x^{(k)})\|} - \frac{1}{2\|\nabla h(x)\|} t^2 B \nabla^T h(x^{(k)}) \frac{d^T(x^{(k)})}{\|d(x^{(k)})\|} \cdot \begin{bmatrix} H_1(x^{(k)}) \\ H_2(x^{(k)}) \\ \text{M} \\ H_m(x^{(k)}) \end{bmatrix} \cdot \frac{d(x^{(k)})}{\|d(x^{(k)})\|}$$

Κάνουμε την αλλαγή μεταβλητής $t \|d(x^{(k)})\| \rightarrow t$ και έχουμε:

$$x(t) = x^{(k)} - t d(x^{(k)}) - \frac{1}{2\|\nabla h(x)\|} t^2 B \nabla^T h(x^{(k)}) d^T(x^{(k)}) \cdot \begin{bmatrix} H_1(x^{(k)}) \\ H_2(x^{(k)}) \\ \text{M} \\ H_m(x^{(k)}) \end{bmatrix} \cdot d(x^{(k)})$$

κι επειδή $d(x^{(k)}) = P(x^{(k)}) \nabla^T f(x^{(k)})$ είναι:

$$x(t) = x^{(k)} - t P(x^{(k)}) \nabla^T f(x^{(k)}) - \frac{1}{2\|\nabla h(x)\|} t^2 B \nabla^T h(x^{(k)}) \nabla f(x^{(k)}) P(x^{(k)}) \cdot \begin{bmatrix} H_1(x^{(k)}) \\ H_2(x^{(k)}) \\ \text{M} \\ H_m(x^{(k)}) \end{bmatrix} \cdot P(x^{(k)}) \nabla^T f(x^{(k)})$$

αφού ο $P(x^{(k)})$ είναι συμμετρικός.

5.3.1. Χρήση του Moore-Penrose γενικευμένου αντίστροφου

Δεδομένου ότι ο πίνακας $I - \mathfrak{X}(t)\mathfrak{X}^T(t)$ είναι συμμετρικός, απ' το φασματικό θεώρημα θα γράφεται $I - \mathfrak{X}(t)\mathfrak{X}^T(t) = O^T D O$, όπου D ο διαγώνιος πίνακας με στοιχεία τις ιδιοτιμές του $I - \mathfrak{X}(t)\mathfrak{X}^T(t)$ και O ο ορθογώνιος πίνακας των αντίστοιχων ιδιοδιανυσμάτων του.

$$\text{Av } D = \left[\begin{array}{cccc|cccc} \lambda_1 & & & & & & & \\ & \lambda_2 & & & & & & \\ & & 0 & & & & 0 & \\ & & & \lambda_r & & & & \\ - & - & - & - & - & - & - & \\ & & & & 0 & & & \\ & & 0 & & & 0 & & \\ & & & & & & 0 & \end{array} \right] = \begin{bmatrix} D_r & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \lambda_i \neq 0,$$

τότε ο μοναδικός Moore-Penrose αντίστροφος του $I - \mathfrak{X}(t)\mathfrak{X}^T(t)$ είναι ο

$$B_p = O^T \begin{bmatrix} D_r^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} O$$

Ο πίνακας $I - \mathfrak{X}(t)\mathfrak{X}^T(t)$ έχει μια μηδενική ιδιοτιμή με αντίστοιχο ιδιοδιάνυσμα το $\mathfrak{X}$ και όλες τις άλλες ίσες με 1, διότι:

$$|I - \mathfrak{X}(t)\mathfrak{X}^T(t) - 0 \cdot I| = |I - \mathfrak{X}(t)\mathfrak{X}^T(t)| = 0,$$

άρα το 0 είναι ιδιοτιμή, με αντίστοιχο διάνυσμα $\mathfrak{X}$, αφού

$$(I - \mathfrak{X}\mathfrak{X}^T)\mathfrak{X} = \mathfrak{X} - \mathfrak{X}(\mathfrak{X}^T\mathfrak{X}) = \mathfrak{X} - \mathfrak{X} = 0 = 0 \cdot \mathfrak{X}.$$

Επίσης, αν u είναι οποιοδήποτε διάνυσμα κάθετο στο $\mathfrak{X}$, θα είναι:

$$(I - \mathfrak{X}\mathfrak{X}^T)u = u - \mathfrak{X}(\mathfrak{X}^T u) = u - 0 = u = 1 \cdot u$$

Άρα τα $n-1$ γραμμικώς ανεξάρτητα ιδιοδιανύσματα του $I - \mathfrak{X}(t)\mathfrak{X}^T(t)$ θα αποτελούν μια βάση του υπόχωρου $\langle \mathfrak{X} \rangle^\perp$.

Θα αναζητήσουμε λοιπόν, μία ορθοκανονική βάση του $\langle \mathcal{X} \rangle^\perp$. Αν κατασκευάσουμε μία ορθοκανονική βάση του $\tilde{\mathcal{X}}$ που να περιέχει το $\mathcal{X}$, τότε τα υπόλοιπα διανύσματα της βάσης, εκτός του $\mathcal{X}$ θα είναι βάση του $\langle \mathcal{X} \rangle^\perp$.

Για να βρούμε τον πίνακα O χρειαζόμαστε μια ορθοκανονική βάση του $\tilde{\mathcal{X}}$. Μια βάση του $\tilde{\mathcal{X}}$ που περιέχει τα διανύσματα $\mathcal{X}$ και ∇h είναι η

$$\{\mathcal{X}, \nabla h_1, \nabla h_2, K, \nabla h_m, e_{m+2}, e_{m+3}, K, e_n\}.$$

Έστω:

- $\xi_1 = \mathcal{X}$
- $p_1 = (\nabla^T h_1 \cdot \mathcal{X}) \mathcal{X} = 0$

$$\xi_2 = \frac{\nabla h_1 - p_1}{\|\nabla h_1 - p_1\|} = \frac{\nabla h_1}{\|\nabla h_1\|}$$
- $p_2 = (\nabla^T h_2 \cdot \mathcal{X}) \mathcal{X} + \left(\nabla^T h_2 \cdot \frac{\nabla h_1}{\|\nabla h_1\|} \right) \frac{\nabla h_1}{\|\nabla h_1\|} = \left(\nabla^T h_2 \cdot \frac{\nabla h_1}{\|\nabla h_1\|} \right) \frac{\nabla h_1}{\|\nabla h_1\|}$

$$\xi_3 = \frac{\nabla h_2 - p_2}{\|\nabla h_2 - p_2\|}$$
- ...
- $p_m = (\nabla^T h_m \cdot \xi_1) \xi_1 + (\nabla^T h_m \cdot \xi_2) \xi_2 + \dots + (\nabla^T h_m \cdot \xi_m) \xi_m$

$$\xi_{m+1} = \frac{\nabla h_m - p_m}{\|\nabla h_m - p_m\|}$$
- $p_{m+1} = (e_{m+2}^T \cdot \xi_1) \xi_1 + (e_{m+2}^T \cdot \xi_2) \xi_2 + \dots + (e_{m+2}^T \cdot \xi_m) \xi_m$

$$\xi_{m+2} = \frac{e_{m+2} - p_{m+1}}{\|e_{m+2} - p_{m+1}\|}$$
- ...
- $p_{n-1} = (e_n^T \cdot \xi_1) \xi_1 + (e_n^T \cdot \xi_2) \xi_2 + \dots + (e_n^T \cdot \xi_{n-1}) \xi_{n-1}$

$$\xi_n = \frac{e_n - p_{n-1}}{\|e_n - p_{n-1}\|}$$

Τότε η $\{\xi_1, \xi_2, K, \xi_n\}$ είναι μια ορθοκανονική βάση του $\tilde{\mathcal{X}}$.

Αν $O = \{\xi_1 = \mathcal{X}, \xi_2, K, \xi_n\}$ τότε

$$B_p = O^T \begin{bmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & 0 & \\ & & & 1 \\ & & & & 0 \end{bmatrix} \quad O = I - \mathcal{X}^T.$$

Έτσι η εξίσωση γράφεται:

$$\begin{aligned} \mathcal{X}(t) &= B_p \nabla^T h(x(t)) \lambda(t) + [I - B_p (I - \mathcal{X}^T)] z \Leftrightarrow \\ \mathcal{X}(t) &= (I - \mathcal{X}^T) \nabla^T h(x(t)) \lambda(t) + [I - (I - \mathcal{X}^T)^2] z \\ &\quad \text{ή} \\ \mathcal{X}(t) &= B_p \nabla^T h(x(t)) \lambda(t) = (I - \mathcal{X}^T) \nabla^T h(x(t)) \lambda(t) = \\ &= \nabla^T h(x(t)) \lambda(t) - \mathcal{X}^T \nabla^T h(x(t)) \lambda(t) = \\ &= \nabla^T h(x(t)) \lambda(t) - \mathcal{X} [\nabla h(x(t)) \cdot \mathcal{X}]^T \lambda(t) \Rightarrow \\ \mathcal{X}(t) &= \nabla^T h(x(t)) \lambda(t) \quad (5.12) \end{aligned}$$

Έτσι, στην ειδική περίπτωση, όπου ο B είναι ο Moore-Penrose γενικευμένος αντίστροφος του $I - \mathcal{X}(t) \mathcal{X}^T(t)$, καταλήγουμε σε μια εξίσωση της μορφής $\mathcal{X}(t) = \nabla^T h(x(t)) z(t)$, την οποία πραγματεύθηκε και ο Μπότσαρης στο [Botsaris5].

Αν αντικαταστήσουμε στη σχέση (5.6) έχουμε:

$$\begin{aligned} \mathcal{X}^T(t) \cdot \begin{bmatrix} H_1(x) \\ H_2(x) \\ \mathbf{M} \\ H_m(x) \end{bmatrix} \cdot \mathcal{X}(t) + \nabla h(x) \cdot \nabla^T h(x) \cdot \lambda(t) &= 0 \Rightarrow \\ \nabla h(x) \cdot \nabla^T h(x) \cdot \lambda(t) &= -\mathcal{X}^T(t) \cdot \begin{bmatrix} H_1(x) \\ H_2(x) \\ \mathbf{M} \\ H_m(x) \end{bmatrix} \cdot \mathcal{X}(t) \quad (5.13) \end{aligned}$$

κι επειδή ο πίνακας $\nabla h(x) \cdot \nabla^T h(x)$ είναι αντιστρέψιμος, λόγω της συνθήκης κανονικότητας, η (5.13) γράφεται:

$$\lambda(t) = -(\nabla h(x) \cdot \nabla^T h(x))^{-1} \mathcal{X}^T(t) \cdot \begin{bmatrix} H_1(x) \\ H_2(x) \\ \mathbf{M} \\ H_m(x) \end{bmatrix} \cdot \mathcal{X}(t) \quad (5.14)$$

και η (5.12) με την βοήθεια της (5.14) γίνεται:

$$\dot{x}(t) = -\nabla^T h(x) \cdot (\nabla h(x) \cdot \nabla^T h(x))^{-1} \cdot \dot{x}(t) \cdot \begin{bmatrix} H_1(x) \\ H_2(x) \\ \mathbf{M} \\ H_m(x) \end{bmatrix} \cdot \dot{x}(t) \quad (5.15)$$

Έτσι το πρόβλημα ανάγεται στην επίλυση του διαφορικού συστήματος (5.15) με αρχικές συνθήκες

$$x(0) = x^{(k)}, \quad \dot{x}(0) = -\frac{d(x^{(k)})}{\|d(x^{(k)})\|}.$$

5.3.1.1. Επίλυση του συστήματος με κατά Taylor ανάλυση

Αν αναπτύξουμε το $x(t)$ κατά Taylor γύρω από το $t = 0$ έχουμε:

$$\begin{aligned} x(t) &= x(0) + t \cdot \dot{x}(0) + \frac{1}{2} t^2 \cdot \ddot{x}(0) \Rightarrow \\ x(t) &= x^{(k)} - t \frac{d(x^{(k)})}{\|d(x^{(k)})\|} - \\ &\quad - \frac{1}{2} t^2 \nabla^T h(x^{(k)}) \cdot (\nabla h(x^{(k)}) \cdot \nabla^T h(x^{(k)}))^{-1} \frac{d^T(x^{(k)})}{\|d(x^{(k)})\|} \cdot \begin{bmatrix} H_1(x^{(k)}) \\ H_2(x^{(k)}) \\ \mathbf{M} \\ H_m(x^{(k)}) \end{bmatrix} \cdot \frac{d(x^{(k)})}{\|d(x^{(k)})\|} \end{aligned}$$

Κάνουμε την αλλαγή μεταβλητής $t \|d(x^{(k)})\| \rightarrow t$ και έχουμε:

$$x(t) = x^{(k)} - t d(x^{(k)}) - \frac{1}{2} t^2 \nabla^T h(x^{(k)}) \cdot \left(\nabla h(x^{(k)}) \cdot \nabla^T h(x^{(k)}) \right)^{-1} d^T(x^{(k)}) \cdot \begin{bmatrix} H_1(x^{(k)}) \\ H_2(x^{(k)}) \\ \vdots \\ H_m(x^{(k)}) \end{bmatrix} \cdot d(x^{(k)})$$

κι επειδή $d(x^{(k)}) = P(x^{(k)}) \nabla^T f(x^{(k)})$ είναι:

$$x(t) = x^{(k)} - t P(x^{(k)}) \nabla^T f(x^{(k)}) - \frac{1}{2} t^2 \nabla^T h(x^{(k)}) \cdot \left(\nabla h(x^{(k)}) \cdot \nabla^T h(x^{(k)}) \right)^{-1} \cdot \nabla f(x^{(k)}) P(x^{(k)}) \cdot \begin{bmatrix} H_1(x^{(k)}) \\ H_2(x^{(k)}) \\ \vdots \\ H_m(x^{(k)}) \end{bmatrix} \cdot P(x^{(k)}) \nabla^T f(x^{(k)})$$

αφού ο $P(x^{(k)})$ είναι συμμετρικός.

5.3.1.2. Αριθμητική επίλυση του συστήματος

Το σύστημά μας είναι της μορφής

$$\dot{x}(t) = A(x),$$

όπου $A(x) = B_p \nabla^T h(x(t)) \lambda(t)$ με αρχικές συνθήκες

$$x(0) = x^{(k)}, \quad \lambda(0) = d^k.$$

Το μετατρέπουμε σε σύστημα πρώτης τάξης:

$$y(t) = x(t)$$

$$\dot{y}(t) = A(x)$$

$$\text{με } x(0) = x^{(k)} \text{ και } \lambda(0) = d^k.$$

Το παραπάνω σύστημα μπορεί να επιλυθεί αριθμητικά, χρησιμοποιώντας οποιαδήποτε μέθοδο επίλυσης τέτοιων συστημάτων.

5.4. Ο αλγόριθμος

Θεωρούμε το πρόβλημα

$$\min f(x), \quad f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$$

$$x \in S = \{x \in \mathbb{R}^n \mid h(x) = 0, \quad h: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m, \quad m < n\}$$

Κάθε επανάληψη του αλγόριθμου αποτελείται από δύο φάσεις.

Ξεκινάμε από ένα εφικτό σημείο $x^{(k)}$, $k = 0, 1, \dots$ και κινούμαστε κατά μήκος της καμπύλης

$$-td(x^{(k)}) - \frac{1}{2\|\nabla h(x)\|} t^2 B \nabla^T h(x^{(k)}) \nabla f(x^{(k)}) P(x^{(k)}) \cdot \begin{bmatrix} H_1(x^{(k)}) \\ H_2(x^{(k)}) \\ \vdots \\ H_m(x^{(k)}) \end{bmatrix} \cdot d(x^{(k)})$$

όπου

$$d(x^{(k)}) = P(x^{(k)}) \nabla^T f(x^{(k)})$$

$$P(x^{(k)}) = I - \nabla^T h(x^{(k)}) [\nabla h(x^{(k)}) \nabla^T h(x^{(k)})]^{-1} \nabla h(x^{(k)})$$

Στην συνέχεια ακολουθεί μια επανορθωτική κίνηση έτσι ώστε το νέο σημείο που λαμβάνεται να ανήκει στον εφικτό χώρο (να ικανοποιεί τους περιορισμούς). Αυτό απαιτείται επειδή η καμπύλη που ακολουθήθηκε είναι μόνο μια προσέγγιση της γεωδαισιακής που διέρχεται από το $x^{(k)}$ κι έχει διεύθυνση την προβολή της αρνητικής κλίσης στο σημείο αυτό. Έτσι το σημείο $y^{(k)}$ που λαμβάνεται γενικά δεν θα ανήκει στην επιφάνεια των περιορισμών. Για να διατηρηθεί η εφικτότητα πρέπει να επιλύσουμε το παρακάτω σύστημα μη γραμμικών εξισώσεων:

$$h(y) = 0, \quad h: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m.$$

Έστω $\bar{y}$ μια λύση. Αν αναπτύξουμε το $h(\bar{y})$ κατά Taylor γύρω από το $y^{(k)}$ έχουμε (με προσέγγιση πρώτης τάξης):

$$h(\bar{y}) = h(y^{(k)}) + \nabla h(y^{(k)}) (\bar{y} - y^{(k)}) = 0$$

Αν επιστρέψουμε στην επιφάνεια των περιορισμών σε διεύθυνση ορθογώνια με το εφαπτόμενο επίπεδο στο $x^{(k)}$, και ότι το $\|y^{(k)} - x^{(k)}\|$ είναι αρκετά μικρό, παίρνουμε:

$$\bar{y} = y^{(k)} - \nabla^T h(x^{(k)}) \left[\nabla h(x^{(k)}) \nabla^T h(x^{(k)}) \right]^{-1} h(y^{(k)}) = y^{(k)} - W(x^{(k)}) h(y^{(k)})$$

Κι έτσι έχουμε την επαναληπτική διαδικασία:

$$y_{j+1} = y_j - W(x^{(k)}) h(y_j), \quad j = 0, 1, 2, \dots, \quad y_0 = y^{(k)},$$

η οποία, όταν εκκινήσει αρκετά κοντά στο $x^{(k)}$ και την επιφάνεια των περιορισμών, συγκλίνει σε ένα σημείο $x^{(k+1)}$ που ικανοποιεί την $h(x^{(k+1)}) = 0$. Μπορεί βεβαίως να χρειαστεί να μειώσουμε το μήκος βήματος t_k κατά έναν παράγοντα $\beta \in (0, 1)$, ίσως και αρκετές φορές, μέχρι να ολοκληρωθεί επιτυχώς η φάση της επαναφοράς.

Η επαρκής πτώση της τιμής της αντικειμενικής συνάρτησης σε κάθε επανάληψη επιτυγχάνεται, αν μειώσουμε το μήκος βήματος t_k κατά έναν παράγοντα $\rho \in (0, 1)$, ώσπου να ικανοποιείται η παρακάτω συνθήκη:

$$f(x^{(k+1)}) - f(x^{(k)}) \leq -\sigma t_k \left\| d(x^{(k)}) \right\|^2, \quad \text{όπου } \sigma \in \left(0, \frac{1}{2}\right).$$

Έτσι έχουμε τον παρακάτω αλγόριθμο:

ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ 5:	
<i>Βήμα 1:</i>	Επιλέγουμε ένα εφικτό σημείο $x^{(0)}$ τέτοιο ώστε το σύνολο $L_0 = \{x \in S \mid f(x) \leq f(x^{(0)})\}$ να είναι συμπαγές.
<i>Βήμα 2:</i>	Έστω $k = 0$. Επιλέγουμε τα $\sigma, \beta, \rho \in (0, 1)$. Επιλέγουμε την ακρίβεια ε και τον μέγιστο αριθμό των επαναλήψεων M για την φάση της επαναφοράς.
<i>Βήμα 3:</i>	Υπολογίζουμε τα $\nabla^T f(x^{(k)}), \nabla h(x^{(k)}),$ $H(x^{(k)}) = [H_1(x^{(k)}), K, H_i(x^{(k)}), K, H_m(x^{(k)})], W(x^{(k)}),$ $P(x^{(k)}), d(x^{(k)}).$
<i>Βήμα 4:</i>	Αν $d(x^{(k)}) = 0$, τότε ΤΕΛΟΣ, αλλιώς πηγαινε στο βήμα 4.
<i>Βήμα 5:</i>	Βρες το μικρότερο σημείο τοπικού ελαχίστου τ_k της $f(x^{(k)} + s(x^{(k)}, t)), t \geq 0$, όπου $s(x^{(k)}, t)$, είναι η καμπυλόγραμμη τροχιά. Θέσε $t_k = \tau_k$.
<i>Βήμα 6:</i>	Θέτω $y^{(k)} = x^{(k)} + s(x^{(k)}, t_k)$
<i>Βήμα 7:</i>	Θέσε $j = 0, y_0 = y^{(k)}.$

- Βήμα 8:** Αν $\|h(y_j)\| < \varepsilon$ ή $j = M$ πήγαινε στο βήμα 8, αλλιώς θέσε $y_{j+1} = y_j - W(x^{(k)})h(y_j)$, $j = j+1$ και επανέλαβε το βήμα 8.
- Βήμα 9:** Αν $\|h(y_f)\| \geq \varepsilon$, τότε θέσε $t_k = \beta t_k$ και πήγαινε στο βήμα 6, αλλιώς θέσε $x^{(k+1)} = y_f$.
- Βήμα 10:** Αν $f(x^{(k+1)}) - f(x^{(k)}) \leq -\sigma t_k \|d(x^{(k)})\|^2$, τότε θέσε $t_k = \rho t_k$ και πήγαινε στο βήμα 6, αλλιώς πήγαινε στο βήμα 11
- Βήμα 11:** Θέσε $k = k+1$, πήγαινε στο βήμα 3.

ΣΧΗΜΑ 2

Στο παρακάτω σχήμα παρουσιάζεται η εξέλιξη του νέου αλγόριθμου για την συνάρτηση Chamberlain για $n=2$, όπου $A = (x_1^{(0)}, x_2^{(0)})$, $B = (x_1^{(1)}, x_2^{(1)})$, $\Gamma = (x_1^{(2)}, x_2^{(2)})$ και $\Delta = (x_1^{(3)}, x_2^{(3)})$

5.5. Σύγκλιση του αλγόριθμου

Μια αναγκαία συνθήκη ώστε το x^* να είναι σημείο τοπικού ελαχίστου είναι να υπάρχει ένας πολλαπλασιαστής $u^* \in \mathbb{R}^m$ τέτοιος, ώστε το (x^*, u^*) να είναι ένα στάσιμο σημείο της συνάρτησης Lagrange

$$l(x, u) = f(x) - u^T h(x)$$

δηλαδή,

$$\begin{aligned} \nabla l(x^*, u^*) &= \nabla f(x^*) - (u^*)^T \nabla h(x^*) = 0 \Rightarrow \\ \Rightarrow \nabla f(x^*) \nabla^T h(x^*) - (u^*)^T \nabla h(x^*) \nabla^T h(x^*) &= 0 \Rightarrow \\ \Rightarrow u^* &= [\nabla h(x^*) \nabla^T h(x^*)]^{-1} \nabla h(x^*) \nabla^T f(x^*) \Rightarrow \\ \Rightarrow \nabla l(x^*, u^*) &= \nabla f(x^*) \left[I - \nabla^T h(x^*) [\nabla h(x^*) \nabla^T h(x^*)]^{-1} \nabla h(x^*) \right] = 0 \\ \text{ή} \\ d(x^*) &= P(x^*) \nabla^T f(x^*) = 0 \end{aligned}$$

Δηλαδή, αν το x^* είναι σημείο τοπικού ελαχίστου, και η κλίση της συνάρτησης Lagrange και η προβολή της κλίσης στο x^* πρέπει να είναι μηδέν.

Ένα σημείο καλείται *επιθυμητό* αν και μόνο αν $d(x) = P(x) \nabla^T f(x) = 0$.

Θεώρημα 5.1:

Αν η f είναι φραγμένη κάτω, τότε κάθε σημείο συσσώρευσης της ακολουθίας $\{x^{(k)}\}$, η οποία κατασκευάζεται από τον αλγόριθμο είναι επιθυμητό.

Αν αναπτύξουμε την $f(x^{(k)} + s(x^{(k)}, t))$ γύρω από το $x^{(k)}$ μέχρι τον όρο δεύτερης τάξης έχουμε:

$$\begin{aligned} f(x^{(k)} + s(x^{(k)}, t)) - f(x^{(k)}) &= \\ &= \nabla f(x^{(k)}) s(x^{(k)}, t) + \frac{1}{2} s^T(x^{(k)}, t) F(x^{(k)}) s(x^{(k)}, t) + 0 \left(\|s(x^{(k)}, t)\|^3 \right) = \\ &= -t \nabla f(x^{(k)}) d(x^{(k)}) - \frac{t^2}{2} \nabla f(x^{(k)}) W(x^{(k)}) \left[L, d^T(x^{(k)}) H_i(x^{(k)}) d(x^{(k)}), L \right] + \end{aligned}$$

$$+\frac{t^2}{2}d^T(x^{(k)})F(x^{(k)})d(x^{(k)})+0\left(\|d(x^{(k)})\|^3\right) \quad (5.16)$$

όπου $F(x)$ είναι η εσσιανή της αντικειμενικής συνάρτησης. Είναι

$$\nabla f(x^{(k)})W(x^{(k)})=\nabla f(x^{(k)})\nabla^T h(x^{(k)})\left[\nabla h(x^{(k)})\nabla^T h(x^{(k)})\right]^{-1}=u^T(x^{(k)})$$

όπου $u(x^{(k)})$ είναι μια εκτίμηση του πολλαπλασιαστή Kuhn – Tucker στο $x^{(k)}$. Έτσι η (5.16) γράφεται:

$$\begin{aligned} f(x^{(k)}+s(x^{(k)},t))-f(x^{(k)}) &= -t\nabla f(x^{(k)})P(x^{(k)})\nabla^T f(x^{(k)})+ \\ &+ \frac{t^2}{2}d^T(x^{(k)})F(x^{(k)})d(x^{(k)})-\frac{t^2}{2}d^T(x^{(k)})H(x^{(k)})u(x^{(k)})+0\left(\|d(x^{(k)})\|^3\right)= \\ &= -t\|d(x^{(k)})\|^2+\frac{t^2}{2}d^T(x^{(k)})\left[F(x^{(k)})-H(x^{(k)})u(x^{(k)})\right]d(x^{(k)})+0\left(\|d(x^{(k)})\|^3\right)= \\ &= -t\|d(x^{(k)})\|^2+\frac{t^2}{2}d^T(x^{(k)})L(x^{(k)},u(x^{(k)}))d(x^{(k)})+0\left(\|d(x^{(k)})\|^3\right), \end{aligned}$$

όπου $L(x,u(x))=F(x)-H(x)u(x)$, με $u(x)=W^T(x)\nabla^T f(x)$ να είναι η Εσσιανή της συνάρτησης Lagrange ως προς x .

Αφού η ακολουθία $\{x^{(k)}\}$ συγκλίνει σε ένα σημείο x^* που ικανοποιεί τη σχέση $d(x^*)=P(x^*)\nabla^T f(x^*)=0$, υπάρχει κάποιο $N \in \mathbb{A}$ αρκετά μεγάλο, τέτοιο, ώστε για $k > N$, η νόρμα $\|d(x^{(k)})\|$ να είναι πολύ μικρή. Επομένως, η τιμή του t που ελαχιστοποιεί την αντικειμενική συνάρτηση κατά μήκος της $s(x^{(k)},t)$ για $k > N$ και N αρκετά μεγάλο, δίνεται από

$$\tau_k = \frac{\|d(x^{(k)})\|^2}{d^T(x^{(k)})L(x^{(k)},u(x^{(k)}))d(x^{(k)})}+0\left(\|d(x^{(k)})\|\right).$$

Έτσι έχουμε:

$$f(x^{(k)}+s(x^{(k)},\tau_k))-f(x^{(k)})=-\frac{1}{2}\frac{\|d(x^{(k)})\|^4}{d^T(x^{(k)})L(x^{(k)},u(x^{(k)}))d(x^{(k)})}+0\left(\|d(x^{(k)})\|^3\right).$$

Αν υποθέσουμε ότι το x^* ικανοποιεί τις ικανές συνθήκες αριστότητας δεύτερης τάξης, ο πίνακας $L(x,u(x))$ είναι θετικά ορισμένος στον εφαπτόμενο στην

S υπόχωρο στο $x^{(k)}$, κι επομένως σε ένα χωρίο γύρω από το $x^{(k)}$. Επομένως, υπάρχει $\sigma \in \left(0, \frac{1}{2}\right)$ τέτοιο, ώστε να ικανοποιείται η συνθήκη Αρμιijo για $t_k = \tau_k$, και δεν απαιτείται ελάττωση του αρχικού μήκους βήματος. Για $k > N$ και N αρκετά μεγάλο, η νόρμα $\|d(x^{(k)})\|$ είναι πολύ μικρή κι έτσι η φάση επαναφοράς δεν παρουσιάζει υπολογιστικές δυσκολίες.

Θεώρημα 5.2:

Υποθέτουμε ότι η ακολουθία $\{x^{(k)}\}$ συγκλίνει σε ένα απομονωμένο τοπικό ελάχιστο x^* . Έστω M και m η μεγαλύτερη και η μικρότερη ιδιοτιμή αντίστοιχα της $L(x^*, u^*)$, περιορισμένης στον εφαπτόμενο υπόχωρο της S στο $x^{(k)}$. Είναι $M \geq m > 0$. Τότε η $\{x^{(k)}\}$ συγκλίνει γραμμικά στο x^* με ασυμπτωτικό λόγο $\left(\frac{M-m}{M+m}\right)^2$.

Απόδειξη

Βλέπε [14]

5.6. Αριθμητικά αποτελέσματα

Η μέθοδος που περιγράφηκε σε αυτό το κεφάλαιο εφαρμόστηκε με τη χρήση ενός νέου προγράμματος σε FORTRAN90, με την ονομασία GEO. Το GEO ελέγχθηκε σε Pentium IV PC συμβατό, με διάφορα προβλήματα σε διαφορετικές διαστάσεις. Φάνηκε ότι ο αλγόριθμος συμπεριφέρεται αξιόπιστα και τα αποτελέσματα υπήρξαν πολύ ικανοποιητικά.

Δυστυχώς δεν κατέσται δυνατή η σύγκριση του αλγορίθμου με άλλους, μια και δεν υπάρχουν στη σύγχρονη βιβλιογραφία αντίστοιχοι αλγόριθμοι.

Στα παρακάτω παραδείγματα η προσέγγιση του βέλτιστου σημείου x^* υπολογίστηκε με ακρίβεια $\varepsilon = 10^{-8}$. Η αναλυτική παρουσίαση των αντίστοιχων συναρτήσεων βρίσκεται στο παράρτημα.

Παράδειγμα 1. Συνάρτηση Anriel (12D).

x^0	(-1,1,1)	(3,0,0)	(-3,0,0)	(0,0,3 ^{1/4})
IT	1	11	14	16
TE	16	90	128	120

Παράδειγμα 2. Συνάρτηση Chamberlain ($\tau = 10$)

x^0	$\left(\sin \frac{\pi}{3}, \cos \frac{\pi}{3}\right)$	(0,1)	$\left(\sin \frac{\pi}{4}, -\cos \frac{\pi}{4}\right)$	$(1,1)^*$
IT	9	10	10	5
TE	39	43	43	23

* Το σημείο $(1,1)$ δεν είναι εφικτό.

5.7. Συμπεράσματα

Στο κεφάλαιο αυτό, παρουσιάστηκε μια κατηγορία μεθόδων ελαχιστοποίησης με περιορισμούς, η οποία χρησιμοποιεί αντί για διάνυσμα ανίχνευσης, καμπύλες ανίχνευσης, και συγκεκριμένα γεωδαισιακές καμπύλες της επιφάνειας των περιορισμών. Η μέθοδος γενικεύει την μέθοδο Μπότσαρη [Botsaris5]. Συγκεκριμένα, δεν χρησιμοποιεί απαραίτητα τον Moore-Penrose γενικευμένο αντίστροφο για τον υπολογισμό της γεωδαισιακής, αλλά μπορεί να χρησιμοποιήσει οποιονδήποτε ψευδοαντίστροφο πίνακα. Επίσης βελτίωση του αλγορίθμου μπορεί να γίνει με τροποποίηση διαφορετικού μήκους βήματος. Επίσης παρουσιάζονται εναλλακτικοί τρόποι επίλυσης του προκύπτοντος διαφορικού συστήματος, ενώ δεν αποκλείεται και η χρήση κάποιας μεθόδου προσαρμοσμένης στο πρόβλημα προσδιορισμού της γεωδαισιακής (βλ. παράρτημα).

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑΤΑ

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Α

ΕΙΔΙΚΑ ΘΕΜΑΤΑ

1. Μέθοδοι επίλυσης εξισώσεων και συστημάτων

1.1. Μια τροποποιημένη μέθοδος διχοτόμησης

Μια ρίζα της εξίσωσης $f(x)=0$, όταν η συνάρτηση $f:[a,b] \subset \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ είναι συνεχής, υπάρχει στο διάστημα $[a,b]$ αν ικανοποιείται το παρακάτω κριτήριο:

$$f(a)f(b) \leq 0.$$

Το παραπάνω κριτήριο ύπαρξης του Bolzano γενικεύεται και σε περισσότερες διαστάσεις [99].

Σε αυτό το κριτήριο στηρίζονται διάφορες μέθοδοι εύρεσης ριζών, όπως για παράδειγμα οι μέθοδοι διχοτόμησης. Ο Μ. Ν. Βραχάτης προτείνει την παρακάτω απλοποιημένη παραλλαγή της μεθόδου διχοτόμησης [97, 98].

Για να υπολογίσουμε μια ρίζα της $f(x)=0$, όπου η $f:[a,b] \subset \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ είναι συνεχής, χρησιμοποιούμε τον αναδρομικό τύπο

$$x^{(p+1)} = x^{(p)} + \operatorname{sgn} f(x^{(0)}) \operatorname{sgn} f(x^{(p)}) \frac{h}{2^{p+1}}, \quad p = 0, 1, K,$$

με $x^{(0)} = a$, $h = b - a$ και sgn να είναι η συνάρτηση πρόσημου με τιμές

$$\operatorname{sgn} \psi = \begin{cases} -1, & \alpha \nu \psi < 0 \\ 0, & \alpha \nu \psi = 0 \\ 1, & \alpha \nu \psi > 0 \end{cases}$$

Η ακολουθία σημείων που προκύπτει με αυτόν τον τρόπο, συγκλίνει σε μια ρίζα $r \in (a,b)$ αν για κάποιο $x^{(p)}$, $p = 0, 1, K$ ισχύει ότι

$$\operatorname{sgn} f(x^{(0)}) \operatorname{sgn} f(x^{(p)}) = -1.$$

Ο αριθμός v των επαναλήψεων που απαιτούνται για την εύρεση μιας προσέγγισης r^* της ρίζας, τέτοιας ώστε $|r - r^*| \leq \delta$ για κάποιο $\delta \in (0,1)$, δίνεται από

$$v = \lceil \log_2(h\delta^{-1}) \rceil,$$

όπου το σύμβολο $\lceil \cdot \rceil$ αναφέρεται στον μικρότερο ακέραιο που είναι μεγαλύτερος ή ίσος του πραγματικού αριθμού που σημειώνεται.

Ένας άλλος αναδρομικός τύπος που θα μπορούσαμε να χρησιμοποιήσουμε είναι:

$$x^{(p+1)} = x^{(p)} - \operatorname{sgn} f(x^{(0)}) \operatorname{sgn} f(x^{(p)}) \frac{h}{2^{p+1}}, \quad p = 0, 1, K,$$

με $x^{(0)} = b$ και $h = b - a$.

Βλέπουμε ότι η μόνη πληροφορία που απαιτεί η μέθοδος της διχοτόμησης είναι το αλγεβρικό πρόσημο της συνάρτησης f . Η μέθοδος της διχοτόμησης είναι μια μέθοδος που συγκλίνει πάντα στο δοσμένο διάστημα, είναι βέλτιστη [91, 92], δηλαδή έχει ασυμπτωτικά τον καλύτερο ρυθμό σύγκλισης, έχει γνωστή συμπεριφορά σε ότι αφορά τον αριθμό των επαναλήψεων που απαιτούνται όταν αναζητούμε μια ρίζα με προκαθορισμένη ακρίβεια και κυρίως είναι η μόνη μέθοδος που μπορεί να εφαρμοστεί σε προβλήματα όπου δεν γνωρίζουμε με ακρίβεια τις συναρτησιακές τιμές.

1.2. Μη γραμμική SOR

Το πρόβλημα εδώ είναι η αριθμητική επίλυση ενός συστήματος μη γραμμικών εξισώσεων

$$F(x) = \Theta^n = (0, 0, K, 0),$$

όπου $F = (f_1, f_2, K, f_n): D \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ είναι μια συνεχώς διαφορίσιμη απεικόνιση σε μια ανοιχτή περιοχή $D^* \subset D$ μιας λύσης $x^* \in D$.

Μια κλάση μεθόδων για τη λύση ενός τέτοιου συστήματος προκύπτει από επαναληπτικές διαδικασίες που χρησιμοποιούνται σε συστήματα γραμμικών εξισώσεων [72, 95]. Το κύριο πλεονέκτημα αυτών των μεθόδων είναι η αναγωγή σε απλούστερες μη γραμμικές εξισώσεις για τις συνιστώσες f_1, f_2, K, f_n της F . Η πιο γνωστή μέθοδος αυτής της κατηγορίας είναι η μη γραμμική SOR μέθοδος.

Αυτή επιλύει στην $p+1$ επανάληψη την εξίσωση

$$f_i(x_1^{(p+1)}, K, x_{i-1}^{(p+1)}, x_i, x_{i+1}^{(p)}, K, x_n^{(p)}) = 0$$

ως προς x_i και στη συνέχεια θέτει

$$x_i^{(p+1)} = x_i^{(p)} + \omega_p (x_i - x_i^{(p)}), \quad i = 1, K, n, \quad p = 0, 1, K.$$

Η παραπάνω διαδικασία καλείται (συνήθως με $\omega_p > 1$) διαδικασία SOR. Μια μεγάλη ποικιλία μεθόδων μπορεί να κατασκευαστεί ανάλογα με την μέθοδο που επιλέγεται για την επίλυση της μονοδιάστατης εξίσωσης, καθώς και τον αριθμό των επαναλήψεων που απαιτούνται.

Αν η Ιακωβιανή $F'(x)$ της F , στη λύση x^* του συστήματος είναι M-πίνακας [72, 95], η παραπάνω διαδικασία συγκλίνει στο x^* , αρκεί $\omega_p \in (0, 1]$ [72].

2. Στοιχεία από τον Λογισμό των διαφορών

2.1. Το πρόβλημα των γεωδαισιακών καμπυλών

Το πρόβλημα της γεωδαισιακής (geodesic) καμπύλης, είναι εκείνο της εύρεσης της καμπύλης ελαχίστου μήκους που κείται σε μία επιφάνεια $h(x_1, x_2, K, x_n) = 0$, και που πληρεί και κάποιες άλλες συνθήκες, όπως για παράδειγμα έχει δεδομένα άκρα, ή το ένα άκρο της είναι δεδομένο ενώ το άλλο κείται σε μια άλλη γραμμή της επιφάνειας κλπ. Τέτοιες καμπύλες καλούνται γεωδαισιακές. Πρόκειται για ένα τυπικό παράδειγμα προβλήματος εύρεσης ακροτάτων υπό περιορισμούς του λογισμού των διαφορών. Αναζητούμε το ελάχιστο του συναρτησιακού

$$l = \int_{x^{(0)}}^{x^{(1)}} \sqrt{\dot{x}_1(t)^2 + \dot{x}_2(t)^2 + L + \dot{x}_n(t)^2} dx,$$

όπου οι συναρτήσεις $x_1(t), x_2(t), K, x_n(t)$ πρέπει να ικανοποιούν τη συνθήκη $h(x_1, x_2, K, x_n) = 0$.

Το πρόβλημα λύθηκε το 1697 από τον Johann Bernoulli, και μια γενική μέθοδος επίλυσης τέτοιου είδους προβλημάτων δόθηκε από τους L. Euler και J. Lagrange.

2.2. Η μέθοδος των διαφορών σε προβλήματα με σταθερά άκρα

Η μεταβλητή J καλείται **συναρτησιακό** που εξαρτάται από μια συνάρτηση $x(t)$, και γράφουμε $J = J(x(t))$, αν σε κάθε συνάρτηση $x(t)$, από μια κλάση συναρτήσεων, αντιστοιχεί μια συγκεκριμένη τιμή του J , δηλαδή σε μια δοσμένη συνάρτηση $x(t)$ αντιστοιχεί ένας αριθμός J .

Η **μεταβολή** ή **διαφορά** δx της συνάρτησης $x(t)$ είναι η διαφορά δύο συναρτήσεων $\delta x = x(t) - x_1(t)$, όπου το $x(t)$ διατρέχει κάποιο σύνολο συναρτήσεων.

Δύο καμπύλες $x = x(t)$ και $x = x_1(t)$ λέμε ότι είναι κοντά ή γειτονεύουν με την έννοια της εγγύτητας τάξης μηδέν, αν η απόλυτη τιμή της διαφοράς τους $x(t) - x_1(t)$ είναι αρκετά μικρή.

Δύο καμπύλες $x = x(t)$ και $x = x_1(t)$ λέμε ότι είναι κοντά ή γειτονεύουν με την έννοια της εγγύτητας τάξης ένα, αν οι απόλυτες τιμές των διαφορών $x(t) - x_1(t)$ και $x'(t) - x_1'(t)$ είναι αρκετά μικρές.

Δύο καμπύλες $x = x(t)$ και $x = x_1(t)$ λέμε ότι είναι κοντά ή γειτονεύουν με την έννοια της εγγύτητας τάξης k , αν οι απόλυτες τιμές των διαφορών

$$x(t) - x_1(t), x'(t) - x_1'(t), K, x^{(k)}(t) - x_1^{(k)}(t)$$

είναι αρκετά μικρές.

Προφανώς, δύο καμπύλες που είναι κοντά με την έννοια της εγγύτητας τάξης k , είναι κοντά και με την έννοια της εγγύτητας τάξης μικρότερης του k , ενώ το αντίστροφο δεν ισχύει.

Ένα συναρτησιακό $J(x(t))$ καλείται **συνεχές** κατά μήκος της $x = x_0(t)$ με την έννοια της εγγύτητας τάξης k , αν για κάθε $\varepsilon > 0$, υπάρχει ένα $\delta > 0$ τέτοιο, ώστε

$$|J(x(t)) - J(x_0(t))| < \varepsilon,$$

όποτε

$$|x(t) - x_0(t)| < \delta,$$

$$|x'(t) - x_0'(t)| < \delta,$$

K

$$|x^{(k)}(t) - x_0^{(k)}(t)| < \delta,$$

όπου η συνάρτηση $x(t)$ ανήκει στο πεδίο ορισμού του $J(x(t))$.

Η διαφορά (variation) ενός συναρτησιακού $J(x(t))$ ορίζεται να είναι:

$$\left. \frac{\partial}{\partial \alpha} J(x(t) + \alpha \delta x) \right|_{\alpha=0}$$

Ορισμός:

Ένα συναρτησιακό $J(x(t))$ λέμε ότι παίρνει μέγιστη τιμή κατά μήκος της καμπύλης $x = x_0(t)$, αν όλες οι τιμές του συναρτησιακού $J(x(t))$ κατά μήκος γειτονικών καμπυλών της $x = x_0(t)$ δεν είναι μεγαλύτερες από

$J(x_0(t))$, δηλ. $\Delta J = J(x(t)) - J(x_0(t)) \leq 0$. Αν $\Delta J \leq 0$ και $\Delta J = 0$ μόνο όταν $x(t) = x_0(t)$, τότε λέμε ότι το συναρτησιακό επιτυγχάνει απόλυτο μέγιστο κατά μήκος της καμπύλης $x = x_0(t)$. Ανάλογα ορίζουμε και την ελάχιστη τιμή ενός συναρτησιακού.

Θεώρημα

Αν η διαφορά ενός συναρτησιακού $J(x(t))$ υπάρχει, και αν το J επιτυγχάνει μέγιστο ή ελάχιστο κατά μήκος της καμπύλης $x = x_0(t)$, τότε $\delta J = 0$ κατά μήκος της $x = x_0(t)$.

Απόδειξη: Βλ. [26] σελ. 20.

Αν η καμπύλη $x = x_0(t)$ καθιστά το συναρτησιακό $J(x(t))$ μέγιστο ή ελάχιστο στην κλάση των καμπυλών που γειτονεύουν με την $x = x_0(t)$ με την έννοια της εγγύτητας τάξης μηδέν, τότε το ακρότατο καλείται **ισχυρό**.

Αν η καμπύλη $x = x_0(t)$ καθιστά το συναρτησιακό $J(x(t))$ μέγιστο ή ελάχιστο στην κλάση των καμπυλών που γειτονεύουν με την $x = x_0(t)$ με την έννοια της εγγύτητας τάξης ένα, τότε το ακρότατο καλείται **ασθενές**.

Προφανώς, κάθε ισχυρό ακρότατο είναι και ασθενές ακρότατο. Το αντίστροφο όμως δεν ισχύει.

Αν το συναρτησιακό $J(x(t))$ έχει ακρότατο κατά μήκος της καμπύλης $x = x_0(t)$, τότε όχι μόνο

$$\left. \frac{\partial}{\partial \alpha} J(x(t) + \alpha \delta x) \right|_{\alpha=0} = 0$$

αλλά επίσης

$$\left. \frac{\partial}{\partial \alpha} J(x(t, \alpha)) \right|_{\alpha=0} = 0,$$

όπου $x(t, \alpha)$ είναι οποιαδήποτε κλάση αποδεκτών καμπυλών τέτοιες, ώστε για $\alpha = 0$ και $\alpha = 1$, η $x(t, \alpha)$ να συμπίπτει με την $x_0(t)$ ή την $x_0(t) + \delta x$ αντίστοιχα. Πράγματι, το $J(x(t, \alpha))$ είναι μια συνάρτηση του α , αφού κάθε επιλογή του α προσδιορίζει μια καμπύλη της κλάσης $x(t, \alpha)$ κι επομένως μια τιμή του συναρτησιακού $J(x(t, \alpha))$.

Αφού το $J(x(t))$ παρουσιάζει ακρότατο κατά μήκος της $x_0(t)$, και η $J(x(t, \alpha))$ θα παρουσιάζει ακρότατο για $\alpha = 0$, κι επομένως η παράγωγός της (η οποία υποθέτουμε ότι υπάρχει) θα μηδενίζεται στο $\alpha = 0$.

Συνεπώς

$$\left. \frac{\partial}{\partial \alpha} J(x(t, \alpha)) \right|_{\alpha=0} = 0.$$

Σημειώνουμε ότι αυτή η παράγωγος γενικά δεν συμπίπτει με την διαφορά του συναρτησιακού, παρόλο που μηδενίζεται μαζί με την δJ κατά μήκος των καμπυλών που δίνουν στο συναρτησιακό ακρότατες τιμές.

2.3. Εξίσωση Euler

Αναζητούμε τα ακρότατα ενός συναρτησιακού της μορφής

$$J(x(t)) = \int_{t_0}^{t_1} F(t, x(t), x'(t)) dt,$$

όπου τα άκρα $x(t_0) = x_0$ και $x(t_1) = x_1$ των αποδεκτών καμπυλών είναι σταθερά. Επίσης υποθέτουμε ότι η τρίτη παράγωγος της συνάρτησης $F(t, x, x')$ υπάρχει.

Μια αναγκαία συνθήκη για να παρουσιάζει το συναρτησιακό ακρότατο είναι η διαφορά του να μηδενίζεται.

Ας υποθέσουμε ότι παρουσιάζεται ακρότατο κατά μήκος της καμπύλης $x = x(t)$ που είναι δύο φορές παραγωγίσιμη. Θεωρούμε οποιαδήποτε αποδεκτή καμπύλη $x = x^*(t)$, που γειτονεύει με την $x = x(t)$, και ορίζουμε μια μονοπαριμετρική οικογένεια καμπυλών

$$x(t, \alpha) = x(t) + \alpha(x^*(t) - x(t))$$

που περιλαμβάνει και τις καμπύλες $x = x(t)$ και $x = x^*(t)$ για $\alpha = 0$ και $\alpha = 1$ αντίστοιχα. Η διαφορά $\delta x = x^*(t) - x(t)$ είναι μια παραγωγίσιμη συνάρτηση του x με $(\delta x)' = x^{*'}(t) - x'(t) = \delta x'$ (αντίστοιχα έχουμε ότι $(\delta x)^{(k)} = \delta x^{(k)}$).

Ας θεωρήσουμε μια οικογένεια $x = x(t, \alpha) = x(t) + \alpha \delta x$, η οποία για $\alpha = 0$ δίνει την καμπύλη όπου παρουσιάζεται ακρότατο, και για $\alpha = 1$ μια άλλη γειτονική αποδεκτή καμπύλη, που θα την λέμε *καμπύλη σύγκρισης*.

Αν θεωρήσουμε τις τιμές του συναρτησιακού

$$J(x(t)) = \int_{t_0}^{t_1} F(t, x, x') dt$$

κατά μήκος των καμπυλών της οικογένειας $x = x(t, \alpha)$ μόνο, τότε έχουμε μια συνάρτηση της μεταβλητής α :

$$J(x(t, \alpha)) = \phi(\alpha).$$

Για $\alpha = 0$ η συνάρτηση αυτή παρουσιάζει ακρότατο κι επομένως θα έχουμε

$$\phi'(0) = 0.$$

Αφού

$$\phi(\alpha) = \int_{t_0}^{t_1} F(t, x(t, \alpha), x'(t, \alpha)) dt,$$

έχουμε

$$\phi'(\alpha) = \int_{t_0}^{t_1} \left[F_x \frac{\partial}{\partial \alpha} x(t, \alpha) + F_{x'} \frac{\partial}{\partial \alpha} x'(t, \alpha) \right] dt,$$

όπου

$$F_x = \frac{\partial}{\partial x} F(t, x(t, \alpha), x'(t, \alpha)) \text{ και } F_{x'} = \frac{\partial}{\partial x'} F(t, x(t, \alpha), x'(t, \alpha)).$$

Ισχύει ότι:

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} x(t, \alpha) = \frac{\partial}{\partial \alpha} (x(t) + \alpha \delta x) = \delta x$$

και

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} x'(t, \alpha) = \frac{\partial}{\partial \alpha} (x'(t) + \alpha \delta x') = \delta x'.$$

Επομένως

$$\phi'(\alpha) = \int_{t_0}^{t_1} [F_x(t, x(t, \alpha), x'(t, \alpha)) \delta x + F_{x'}(t, x(t, \alpha), x'(t, \alpha)) \delta x'] dt$$

$$\phi'(0) = \int_{t_0}^{t_1} [F_x(t, x(t), x'(t)) \delta x + F_{x'}(t, x(t), x'(t)) \delta x'] dt$$

Η $\phi'(0)$ δεν είναι παρά η διαφορά του συναρτησιακού και συμβολίζεται με δJ . Η αναγκαία συνθήκη για να έχει το συναρτησιακό J ακρότατο είναι $\delta J = 0$.

Στην περίπτωση του συναρτησιακού $J(x(t)) = \int_{t_0}^{t_1} F(t, x, x') dt$ η συνθήκη αυτή γίνεται

$$\int_{t_0}^{t_1} (F_x \delta x + F_{x'} \delta x') dt = 0.$$

Ολοκληρώνοντας τον δεύτερο όρο κατά μέλη παίρνουμε:

$$\delta J = [F_{x'} \delta x]_{t_0}^{t_1} + \int_{t_0}^{t_1} \left(F_x - \frac{d}{dt} F_{x'} \right) \delta x dt.$$

Αφού όλες οι αποδεκτές καμπύλες περνούν από τα σταθερά άκρα, προκύπτει ότι:

$$\delta x|_{t=t_0} = x^*(t_0) - x(t_0) = 0 \text{ και } \delta x|_{t=t_1} = x^*(t_1) - x(t_1) = 0,$$

συνεπώς

$$\delta J = \int_{t_0}^{t_1} \left(F_x - \frac{d}{dt} F_{x'} \right) \delta x dt$$

και η αναγκαία συνθήκη ακροτάτου παίρνει τη μορφή:

$$\int_{t_0}^{t_1} \left(F_x - \frac{d}{dt} F_{x'} \right) \delta x dt = 0 ,$$

όπου ο πρώτος παράγοντας $F_x - \frac{d}{dt} F_{x'}$, που λαμβάνεται κατά μήκος της καμπύλης $x = x(t)$ όπου το J παρουσιάζει ακρότατο, είναι μία καθορισμένη συνεχής συνάρτηση και ο δεύτερος παράγοντας δx μπορεί να είναι τυχαία συνάρτηση που ικανοποιεί μια γενική συνθήκη, αφού η καμπύλη σύγκρισης $x = x^*(t)$ επιλέχθηκε αυθαίρετα.

Θεμελιώδες λήμμα του Λογισμού των Διαφορών:

Αν μια συνάρτηση $\Phi(x)$ είναι συνεχής σ' ένα διάστημα (x_0, x_1) και αν

$$\int_{x_0}^{x_1} \Phi(x) \eta(x) dx = 0$$

για κάθε συνάρτηση $\eta(x)$, παραγωγίσιμη, φραγμένη, και που μηδενίζεται στα άκρα του διαστήματος, τότε $\Phi(x) \equiv 0$ στο διάστημα $[x_0, x_1]$.

Απόδειξη:

Βλ. [26] σελ. 27-29.

Με τη βοήθεια του θεμελιώδους λήμματος μπορούμε να απλουστεύσουμε τη συνθήκη

$$\int_{t_0}^{t_1} \left(F_x - \frac{d}{dt} F_{x'} \right) \delta x dt = 0 .$$

Οι υποθέσεις του λήμματος ικανοποιούνται: ο παράγοντας $F_x - \frac{d}{dt} F_{x'}$, που λαμβάνεται κατά μήκος της καμπύλης $x = x(t)$ όπου το J παρουσιάζει ακρότατο, είναι μία συνεχής συνάρτηση, και η διαφορά δx είναι τυχαία συνάρτηση που ικανοποιεί περιορισμούς γενικής μορφής για τους οποίους ισχύει το λήμμα. Συνεπώς, έχουμε ότι κατά μήκος μιας καμπύλης όπου το συναρτησιακό J παρουσιάζει ακρότατο θα ισχύει $F_x - \frac{d}{dt} F_{x'} \equiv 0$, δηλαδή η $x = x(t)$ είναι μια λύση της δεύτερης τάξης διαφορικής εξίσωσης

$$F_x - \frac{d}{dt} F_{x'} = 0 ,$$

που καλείται *εξίσωση Euler*, προς τιμή του Euler που την παρουσίασε το 1744.

2.4. Συναρτησιακά της μορφής $J(x(t)) = \int_{t_0}^{t_1} F(t, x_1, x_2, K, x_n, x_1', x_2', K, x_n') dt$

Για να βρούμε αναγκαία συνθήκη ακροτάτων για συναρτησιακό της μορφής

$$J(x_1, x_2, K, x_n) = \int_{t_0}^{t_1} F(t, x_1, x_2, K, x_n, x_1', x_2', K, x_n') dt$$

εργαζόμαστε όπως πριν, διατηρώντας όλες τις μεταβλητές, εκτός από μία, σταθερές και βρίσκουμε ότι αν μια συνάρτηση δίνει στο συναρτησιακό ακρότατη τιμή, τότε θα πρέπει να ικανοποιεί το σύστημα των δευτέρας τάξης εξισώσεων Euler

$$F_{x_i} - \frac{d}{dt} F_{x_i'} = 0, \quad i = 1, 2, K, n,$$

που γενικά ορίζει μια $2n$ -παραμετρική οικογένεια ολοκληρωτικών καμπυλών στο χώρο.

2.5. Προβλήματα διαφορών με μεταβλητά άκρα

Αν υποθέσουμε ότι ένα ή και τα δύο άκρα του συναρτησιακού

$$J(x(t)) = \int_{t_0}^{t_1} F(t, x, x') dt$$

είναι μεταβλητά, τότε η κλάση των αποδεκτών καμπυλών διευρύνεται, καθώς και η κλάση των καμπυλών σύγκρισης.

Βεβαίως, αν μια καμπύλη $x = x(t)$ δίνει ακρότατο στο πρόβλημα με μεταβλητά άκρα, τότε θα δίνει ακρότατο και στο πιο περιορισμένο πρόβλημα, όπου τα άκρα είναι σταθερά. Έτσι η θεμελιώδης αναγκαία συνθήκη για ακρότατο πρέπει να ισχύει. Η συνάρτηση $x(t)$ θα είναι μια λύση της εξίσωσης Euler

$$F_x - \frac{d}{dt} F_{x'} = 0.$$

Η γενική λύση της εξίσωσης Euler περιλαμβάνει κάποιες αυθαίρετες σταθερές που στην περίπτωση των σταθερών άκρων προσδιορίζονταν από τις συνθήκες:

$$x(t_0) = x_0 \text{ και } x(t_1) = x_1.$$

Στην περίπτωση των μεταβλητών άκρων μία ή και οι δύο αυτές συνθήκες δεν ισχύουν, κι έτσι χρειαζόμαστε κάποιες άλλες συνθήκες για να προσδιορίσουμε τις σταθερές ολοκλήρωσης.

Αποδεικνύεται (βλ. [26] σελ. 65-76) ότι για το συναρτησιακό

$$J(x_1, x_2, K, x_n) = \int_{t_0}^{t_1} F(t, x_1, x_2, K, x_n, x_1', x_2', K, x_n') dt$$

με ένα μεταβλητό άκρο $B(t_1, x_{11}, x_{21}, K, x_{n1})$, στο σημείο αυτό θα πρέπει να ισχύει η συνθήκη

$$\left(F - \sum_{i=1}^n x_i' F_{x_i'} \right) \Big|_{t=t_1} \delta t_1 + \sum_{i=1}^n F_{x_i'} \Big|_{t=t_1} \delta x_{i1} = 0 \text{ (transversality condition).}$$

2.6. Ακρότατα με περιορισμούς

2.6.1. Περιορισμοί της μορφής $h(t, x_1, x_2, K, x_n) = 0$

Αναζητούμε τα ακρότατα ενός συναρτησιακού

$$J(x_1, x_2, K, x_n) = \int_{t_0}^{t_1} F(t, x_1, x_2, K, x_n, x_1', x_2', K, x_n') dt,$$

όπου οι μεταβλητές υπόκεινται σε κάποιους επιπλέον περιορισμούς

$$h_i(t, x_1, x_2, K, x_n) = 0, \quad i = 1, 2, K, m, \quad m < n.$$

Θα ακολουθήσουμε τη μέθοδο των πολλαπλασιαστών Lagrange.

Θεωρούμε το συναρτησιακό

$$J^* = \int_{t_0}^{t_1} \left(F + \sum_{i=1}^m \lambda_i(t) h_i \right) dt$$

ή

$$J^* = \int_{t_0}^{t_1} F^* dt,$$

όπου

$$F^* = F + \sum_{i=1}^m \lambda_i(t) h_i,$$

και θα το μελετήσουμε ως προς τα ακρότατα, δηλαδή θα λύσουμε το σύστημα των εξισώσεων Euler

$$F_{x_j}^* - \frac{d}{dt} F_{x_j'}^* = 0, \quad j = 1, 2, K, n \quad (I)$$

μαζί με τις εξισώσεις των περιορισμών $h_i = 0, \quad i = 1, 2, K, m$.

Γενικά αυτές οι $m+n$ εξισώσεις αρκούν για να προσδιορίσουμε τις $m+n$ άγνωστες συναρτήσεις x_1, x_2, K, x_n και $\lambda_1, \lambda_2, K, \lambda_m$, και οι αρχικές συνθήκες $x_j(t_0) = x_{j0}$ και $x_j(t_1) = x_{j1}, \quad j = 1, 2, K, n$, οι οποίες πρέπει να είναι συμβατές με τους περιορισμούς, μπορούν να χρησιμοποιηθούν για τον προσδιορισμό των $2n$ αυθαίρετων σταθερών στη γενική λύση του συστήματος των εξισώσεων Euler.

Είναι φανερό ότι οι καμπύλες που λαμβάνονται με αυτόν τον τρόπο και δίνουν την μέγιστη ή ελάχιστη τιμή του συναρτησιακού J^* , είναι λύσεις και του αρχικού προβλήματος, αφού αν οι συναρτήσεις

$$\lambda_i(t), i=1,2,K,m \text{ και } x_j, j=1,2,K,n,$$

ικανοποιούν το σύστημα (I), τότε $h_i = 0$ για κάθε $i=1,2,K,m$ και συνεπώς $J^* = J$.

Αν υπάρχει ένα ακρότατο του J^* κατά μήκος της καμπύλης $x_j = x_j(t)$, $j=1,2,K,n$, που προσδιορίζεται από το σύστημα (I), τότε είναι ακρότατο στην κλάση όλων των γειτονικών καμπυλών που μπορεί να ικανοποιούν ή να μην ικανοποιούν τους περιορισμούς, και συνεπώς θα είναι και ακρότατο στη μικρότερη κλάση των καμπυλών που ικανοποιούν τους περιορισμούς.

Ωστόσο, αυτό δεν σημαίνει ότι όλες οι λύσεις του αρχικού προβλήματος με περιορισμούς δίνουν ακρότατο και για το J^* .

Θεώρημα

Μια ακολουθία συναρτήσεων x_1, x_2, K, x_n που δίνει στο συναρτησιακό

$$J(x_1, x_2, K, x_n) = \int_{t_0}^{t_1} F(t, x_1, x_2, K, x_n, x_1', x_2', K, x_n') dt$$

την ακρότατη τιμή του, υπό τους περιορισμούς

$$h_i(t, x_1, x_2, K, x_n) = 0, i=1,2,K,m, \quad m < n,$$

ικανοποιεί για κατάλληλους πολλαπλασιαστές $\lambda_i(t)$, $i=1,2,K,m$, τις εξισώσεις Euler για το συναρτησιακό

$$J^* = \int_{t_0}^{t_1} \left(F + \sum_{i=1}^m \lambda_i(t) h_i \right) dt = \int_{t_0}^{t_1} F^* dt.$$

Οι συναρτήσεις $\lambda_i(t)$ και $x_j = x_j(t)$ μπορούν να προσδιοριστούν από τις εξισώσεις Euler

$$F_{x_j}^* - \frac{d}{dt} F_{x_j'}^* = 0, \quad j=1,2,K,n,$$

και τις εξισώσεις των περιορισμών

$$h_i = 0, \quad i=1,2,K,m.$$

Οι εξισώσεις $h_i = 0$ μπορούν επίσης να θεωρηθούν εξισώσεις Euler για το συναρτησιακό J^* , αν θεωρήσουμε σαν ανεξάρτητες μεταβλητές του J^* , όχι μόνο τα x_1, x_2, K, x_n , αλλά και τις $\lambda_1(t), \lambda_2(t), K, \lambda_m(t)$. Οι εξισώσεις

$$h_i(t, x_1, x_2, K, x_n) = 0, \quad i=1,2,K,m,$$

υποθέτουμε ότι είναι ανεξάρτητες, δηλ. καμία Ιακωβιανή τους τάξης m δεν μηδενίζεται.

Απόδειξη

Βλ. [26] σελ. 131-134.

2.7. Ευθείες μέθοδοι επίλυσης προβλημάτων διαφορών

Οι διαφορικές εξισώσεις των προβλημάτων διαφορών μπορούν να ολοκληρωθούν μόνο σε μερικές ειδικές περιπτώσεις. Γι αυτό συνήθως χρησιμοποιούνται άλλες μέθοδοι για την λύση τέτοιων προβλημάτων. Η βασική ιδέα που κρύβεται πίσω από τις λεγόμενες ευθείες μεθόδους είναι να θεωρήσουμε το πρόβλημα των διαφορών σαν οριακό πρόβλημα κάποιου προβλήματος εύρεσης ακροτάτων μιας συνάρτησης με πεπερασμένο πλήθος μεταβλητών.

Το συναρτησιακό $J(x(t))$ μπορεί να θεωρηθεί ως συνάρτηση ενός άπειρου συνόλου μεταβλητών. Για παράδειγμα θα μπορούσαμε να υποθέσουμε ότι οι αποδεκτές συναρτήσεις μπορούν να παρασταθούν ως δυναμοσειρές

$$x(t) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + L + a_n x^n + L$$

ή με σειρές Fourier

$$x(t) = \frac{a_0}{2} \sum_{n=1}^{\infty} (a_n \cos nx + b_n \sin nx)$$

ή οποιαδήποτε σειρά της μορφής

$$x(t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \phi_n(t), \quad (\text{II})$$

όπου $\phi_n(t)$ δοσμένες συναρτήσεις.

Για να προσδιορίσουμε μια συνάρτηση $x(t)$, που παριστάνεται με τη μορφή (II), αρκεί να προσδιορίσουμε όλους τους συντελεστές a_n , έτσι ώστε η τιμή του συναρτησιακού $J(x(t))$ να προσδιορίζεται πλήρως από μια άπειρη ακολουθία αριθμών a_1, a_2, K, a_n, K , δηλαδή, το συναρτησιακό είναι μια συνάρτηση ενός άπειρου συνόλου μεταβλητών

$$J(x(t)) = \phi(a_0, a_1, a_2, K, a_n, K).$$

2.7.1. Η μέθοδος πεπερασμένων διαφορών του Euler

Η κύρια ιδέα της μεθόδου είναι ότι οι τιμές του συναρτησιακού $J(x(t))$

$$\int_{t_0}^{t_1} F(t, x, x') dt, \quad x(t_0) = a, \quad x(t_1) = b,$$

υπολογίζονται κατά μήκος πολυγωνικών γραμμών με προκαθορισμένο πλήθος κορυφών με συγκεκριμένες τετμημένες $t_0 + \Delta t, t_0 + 2\Delta t, K, t_0 + (n-1)\Delta t$, όπου $\Delta t = \frac{t_1 - t_0}{n}$. Κατά μήκος τέτοιων πολυγωνικών καμπυλών το συναρτησιακό $J(x(t))$ καθίσταται συνάρτηση $\phi(x_1, x_2, K, x_{n-1})$ με τεταγμένες κορυφών x_1, x_2, K, x_{n-1} .

Επιλέγουμε τις συντεταγμένες x_1, x_2, K, x_{n-1} έτσι ώστε η συνάρτηση $\phi(x_1, x_2, K, x_{n-1})$ να παρουσιάζει ακρότατο, δηλ. θα προσδιορίσουμε τα x_1, x_2, K, x_{n-1} μέσω των εξισώσεων

$$\frac{\partial \phi}{\partial x_1} = 0, \frac{\partial \phi}{\partial x_2} = 0, K, \frac{\partial \phi}{\partial x_{n-1}} = 0,$$

και στη συνέχεια θα πάρουμε το όριο καθώς $n \rightarrow \infty$. Με κάποιους περιορισμούς πάνω στην συνάρτηση F , θα επιτύχουμε τη λύση στο αρχικό μας πρόβλημα.

Είναι, ωστόσο, πιο πρακτικό να υπολογίσουμε την τιμή του συναρτησιακού κατά μήκος των πολυγωνικών καμπυλών προσεγγιστικά. Για παράδειγμα, μπορούμε να αντικαταστήσουμε το ολοκλήρωμα

$$\int_{t_0}^{t_1} F(t, x, x') dt = \sum_{k=0}^{n-1} \int_{t_0 + k\Delta t}^{t_0 + (k+1)\Delta t} F\left(t, x, \frac{x_{k+1} - x_k}{\Delta t}\right) dt$$

με ένα πεπερασμένο άθροισμα

$$\sum_{i=1}^n F\left(t_i, x_i, \frac{\Delta x_i}{\Delta t}\right) \Delta t$$

Έτσι στην περίπτωση του συναρτησιακού

$$J(x(t)) = \int_{t_0}^{t_1} F(t, x, x') dt$$

έχουμε:

$$J(x(t)) \approx \phi(x_1, x_2, K, x_n) = \sum_{i=0}^{n-1} F\left(t_i, x_i, \frac{x_{i+1} - x_i}{\Delta t}\right) \Delta t$$

κατά μήκος των πολυγωνικών καμπυλών. Αφού υπάρχουν μόνο δύο όροι σε αυτό το άθροισμα που εξαρτώνται από το x_i , ο i και ο $i-1$ όροι,

$$F\left(t_i, x_i, \frac{x_{i+1} - x_i}{\Delta t}\right) \Delta t \text{ και } F\left(t_{i-1}, x_{i-1}, \frac{x_i - x_{i-1}}{\Delta t}\right) \Delta t,$$

προκύπτει ότι οι εξισώσεις $\frac{\partial \phi}{\partial x_i} = 0$, $i = 1, 2, K, n-1$, παίρνουν την μορφή

$$F_x\left(t_i, x_i, \frac{x_{i+1} - x_i}{\Delta t}\right) \Delta t + F_{x'}\left(t_i, x_i, \frac{x_{i+1} - x_i}{\Delta t}\right) \left(-\frac{1}{\Delta t}\right) \Delta t + F_{x'}\left(t_{i-1}, x_{i-1}, \frac{x_i - x_{i-1}}{\Delta t}\right) \frac{1}{\Delta t} \Delta t = 0,$$

$i = 1, 2, K, n-1,$

ή

$$F_x\left(t_i, x_i, \frac{\Delta x_i}{\Delta t}\right) - \frac{F_{x'}\left(t_i, x_i, \frac{\Delta x_i}{\Delta t}\right) - F_{x'}\left(t_{i-1}, x_{i-1}, \frac{\Delta x_{i-1}}{\Delta t}\right)}{\Delta t} = 0$$

ή

$$F_x \left(t_i, x_i, \frac{\Delta x_i}{\Delta t} \right) - \frac{\Delta F_{x'}}{\Delta t} = 0,$$

οπότε αν πάρουμε $n \rightarrow \infty$ παίρνουμε τις εξισώσεις Euler

$$F_x - \frac{d}{dt} F_{x'} = 0,$$

που πρέπει να ικανοποιεί η συνάρτηση $x(t)$ όπου παρουσιάζεται ακρότατο.

Αν δεν θέλουμε να ολοκληρώσουμε την οριακή διαδικασία, μπορούμε να προσδιορίσουμε από τις εξισώσεις $\frac{\partial \phi}{\partial x_i} = 0$, $i = 1, 2, K, n-1$, τις συνιστώσες x_1, x_2, K, x_{n-1} και έτσι να έχουμε μια πολυγωνική καμπύλη που είναι προσεγγιστική λύση του προβλήματος διαφορών.

2.7.2. Η μέθοδος Ritz

Η ιδέα της μεθόδου του Ritz είναι να θεωρήσουμε το συναρτησιακό $J(x(t))$ όχι κατά μήκος οποιασδήποτε αποδεκτής καμπύλης, αλλά μόνο κατά μήκος όλων των δυνατών γραμμικών συνδυασμών

$$x_n = \sum_{i=1}^n a_i W_i(t),$$

με σταθερούς συντελεστές, των πρώτων n συναρτήσεων μιας συγκεκριμένης ακολουθίας συναρτήσεων

$$W_1(t), W_2(t), K, W_n(t), K$$

Οι συναρτήσεις $x_n = \sum_{i=1}^n a_i W_i(t)$ πρέπει να είναι αποδεκτές συναρτήσεις για το πρόβλημα. Κατά μήκος τέτοιων γραμμικών συνδυασμών το συναρτησιακό $J(x(t))$ γίνεται μια συνάρτηση $\phi(a_0, a_1, a_2, K, a_n)$ των συντελεστών a_1, a_2, K, a_n . Τότε οι συντελεστές a_1, a_2, K, a_n επιλέγονται έτσι ώστε η συνάρτηση $\phi(a_0, a_1, a_2, K, a_n)$ να παρουσιάζει ακρότατο. Συνεπώς, οι a_1, a_2, K, a_n θα προσδιορίζονται από το σύστημα

$$\frac{\partial \phi}{\partial a_i} = 0, \quad i = 1, 2, K, n.$$

Θεωρώντας $n \rightarrow \infty$, θα πάρουμε μια οριακή συνάρτηση

$$x = \sum_{i=1}^{\infty} a_i W_i(t),$$

αρκεί η σειρά να συγκλίνει. Κάτω από ορισμένες υποθέσεις για το συναρτησιακό $J(x(t))$ και την ακολουθία $W_1(t), W_2(t), K, W_n(t), K$, η συνάρτηση αυτή θα είναι μια ακριβής λύση του προβλήματος. Βεβαίως και πάλι μπορούμε να πάρουμε μια προσεγγιστική λύση παίρνοντας μόνο τους πρώτους n όρους

$$x_n = \sum_{i=1}^n a_i W_i(t).$$

Αν προσδιορίσουμε ένα ελάχιστο του συναρτησιακού με αυτό τον τρόπο, τότε η ακριβής τιμή του ελαχίστου προσεγγίζεται από το παραπάνω, αφού το ελάχιστο του συναρτησιακού στην ευρύτερη κλάση όλων των αποδεκτών καμπυλών είναι πάντα μικρότερο ή ίσο από το ελάχιστο του ίδιου συναρτησιακού στην μικρότερη κλάση των καμπυλών της μορφής $x_n = \sum_{i=1}^n a_i W_i(t)$.

Για να είναι οι $x_n = \sum_{i=1}^n a_i W_i(t)$ αποδεκτές καμπύλες, πρέπει να ικανοποιούν τις συνοριακές συνθήκες, και κάποιες άλλες, όπως συνέχεια, ομαλότητα κλπ.

Αν οι συνοριακές συνθήκες είναι γραμμικές και ομογενείς, για παράδειγμα $x(t_0) = x(t_1) = 0$, ή $\beta_{1j}x(t_j) + \beta_{2j}x'(t_j) = 0$, $j = 0, 1$, όπου οι β_{ij} είναι σταθερές, τότε συμφέρει να επιλέξουμε τις συναρτήσεις $W_n(t)$ με τέτοιο τρόπο ώστε να ικανοποιούν τις συνοριακές αυτές συνθήκες. Αν αυτό συμβαίνει τότε και οι $x_n = \sum_{i=1}^n a_i W_i(t)$ για τυχαία a_i θα ικανοποιούν τις ίδιες συνοριακές συνθήκες. Για παράδειγμα μπορούμε να επιλέξουμε

$$W_i(t) = (t - t_0)(t - t_1)\phi_i(t),$$

όπου $\phi_i(t)$ είναι τυχαίες συνεχείς συναρτήσεις, ή

$$W_k(t) = \sin \frac{k\pi(t - t_0)}{(t_1 - t_0)}, \quad k = 1, 2, K$$

ή άλλες συναρτήσεις που ικανοποιούν τη σχέση $W_i(t_0) = W_i(t_1) = 0$.

Αν οι συνοριακές συνθήκες δεν είναι ομογενείς, για παράδειγμα $x(t_0) = x_0$, $x(t_1) = x_1$, όπου τουλάχιστον ένας από τους αριθμούς x_0, x_1 είναι διάφορος του μηδενός, τότε προσπαθούμε να βρούμε μια λύση της μορφής

$$x_n = \sum_{i=1}^n a_i W_i(t) + W_0(t),$$

όπου η $W_0(t)$ ικανοποιεί τις δοσμένες συνοριακές συνθήκες $W_0(t_0) = x_0$, $W_0(t_1) = x_1$, και οι υπόλοιπες συναρτήσεις $W_i(t)$ ικανοποιούν τις αντίστοιχες ομογενείς συνοριακές συνθήκες, δηλ. $W_i(t_0) = W_i(t_1) = 0$. Η συνάρτηση $W_0(t)$ μπορεί να είναι για παράδειγμα μια γραμμική συνάρτηση

$$W_0(t) = \frac{x_1 - x_0}{t_1 - t_0}(t - t_0) + x_0.$$

Η επιλογή των συνιστωσών συναρτήσεων $W_1(t), W_2(t), K, W_n(t), K$ επηρεάζει τον βαθμό πολυπλοκότητας των υπολογισμών, κι επομένως η επιτυχής εφαρμογή της

μεθόδου του Ritz εξαρτάται σε μεγάλο βαθμό από την κατάλληλη επιλογή των συνιστωσών συναρτήσεων.

Για την σύγκλιση της μεθόδου [26] σελ. 157-160.

3. Γενικευμένοι αντίστροφοι

3.1. Ορισμοί

Ορισμός: Έστω A ένας $m \times n$ πίνακας. Ένας γενικευμένος αντίστροφος του A είναι ένας $n \times m$ πίνακας B τέτοιος ώστε η $x = By$ να είναι μια λύση της $Ax = y$ για κάθε y για το οποίο η εξίσωση έχει λύση.

Τον γενικευμένο αντίστροφο του A , θα τον σημειώνουμε με A^- .

Λήμμα: Οι παρακάτω προτάσεις είναι ισοδύναμες:

- (α) Ο A^- υπάρχει
- (β) $AA^-A = A$
- (γ) Ο πίνακας $H = A^-A$ είναι αδύναμος και $rank(H) = tr(H) = rank(A)$
- (δ) Ο πίνακας $F = AA^-$ είναι αδύναμος και $rank(F) = tr(F) = rank(A)$

Χρήση γενικευμένου αντίστροφου για την λύση γραμμικών συστημάτων

Θεώρημα: Θεωρούμε έναν πίνακα $m \times n$ και έστω A^- ένας γενικευμένος αντίστροφος του A . Έστω ακόμα $H = A^-A$. Τότε:

- (α) Μια λύση του ομογενούς γραμμικού συστήματος $Ax = 0$ είναι η $x = (I - H)z$, όπου z τυχαίο διάνυσμα.
- (β) Μια λύση του γραμμικού συστήματος $Ax = y$ είναι η $x = A^-y + (I - H)z$
- (γ) Η παράσταση $Q^T x$ έχει την ίδια τιμή για όλες τις λύσεις του συστήματος $Ax = y$ αν, και μόνο αν $H^T Q = Q$ ή $Q \in \langle A^T \rangle$
- (δ) Το σύστημα $Ax = y$ έχει λύση αν, και μόνο αν $AA^-y = y$

3.2. Ο Moore-Penrose γενικευμένος αντίστροφος

Η ιδέα ενός γενικευμένου αντίστροφου ενός τυχαίου $m \times n$ μιγαδικού πίνακα A οφείλεται αρχικά στον Moore (1920). Την ανέπτυξε στα πλαίσια των γραμμικών μετασχηματισμών από n -διάστατο σε m -διάστατο διανυσματικό χώρο επί ενός μιγαδικού σώματος με την συνήθη Ευκλείδεια νόρμα. Ο ορισμός του Moore είχε ως εξής:

Ορισμός I (Moore): Ένας πίνακας G διάστασης $n \times m$ είναι ο γενικευμένος αντίστροφος του $m \times n$ πίνακα A , αν

$$AG = P_A \quad \quad GA = P_G,$$

όπου P_A είναι ο τελεστής (πίνακας), που προβάλλει διανύσματα του $\mathbb{R}^m$ επί του $\mathcal{M}(A)$, και P_G είναι ο τελεστής (πίνακας), που προβάλλει διανύσματα του $\mathbb{R}^n$ επί του $\mathcal{M}(G)$.

Ο Penrose χωρίς να γνωρίζει την εργασία του Moore, όρισε (1955) έναν γενικευμένο αντίστροφο που ταυτίζεται με εκείνον του Moore όταν οι σχετικές νόρμες στον $\mathbb{R}^m$ και στον $\mathbb{R}^n$ είναι της μορφής $\|x\| = (x^* x)^{\frac{1}{2}}$.

Ορισμός II (Penrose): Ο G είναι γενικευμένος αντίστροφος του A αν

$$AGA = A, \quad (AG)^* = AG, \quad \quad GAG = G, \quad \quad (GA)^* = GA.$$

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Β

ΣΥΝΑΡΤΗΣΕΙΣ ΕΛΕΓΧΟΥ

1. Τετραγωνική συνάρτηση [100]

$$f(x_1, x_2, K, x_n) = \sum_{i=1}^n x_i^2 - r,$$

με $f(x^*) = -r$ στο $x^* = (0, 0, K, 0)$.

2. Συνάρτηση Όλυμπος (Olympus) [100]

$$f(x_1, x_2) = J_1^2(x_1) + J_1^2(x_2),$$

όπου J_1 είναι η συνάρτηση Bessel πρώτης τάξης [82]:

$$J_1(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \left[(-1)^k \frac{\left(\frac{x}{2}\right)^{2k+1}}{k!(k+1)!} \right]. \quad (6.1)$$

Εδώ είναι $f(x^*) = 0$ στο $x^* = (0, 0)$.

3. Συνάρτηση Watson [71].

$$f(x) = \sum_{i=1}^m f_i^2(x), \quad m = 31,$$

όπου

$$f_i(x) = \sum_{j=2}^n (j-1) x_j t_i^{j-2} - \left(\sum_{j=1}^n x_j t_i^{j-1} \right)^2 - 1, \quad 1 \leq i \leq 29, \quad t_i = \frac{i}{29},$$

$$f_{30}(x) = x_1, \quad f_{31}(x) = x_2 - x_1^2 - 1,$$

όπου για $n = 2$, έχουμε $f(x^*) = 0$ στο $x^* = (-0.50136701, 1.07364983)$.

4. **Συνάρτηση Powell badly scaled** [71].

$$f(x) = (x_1 - 10^6)^2 + (x_2 - 2 \cdot 10^{-6})^2 + (x_1 x_2 - 2)^2,$$

με $f(x^*) = 0$ στο $x^* = (10^6, 2 \cdot 10^{-6})$.

5. **Ιδιάζουσα συνάρτηση Weber – Werner** [101]

$$f(x) = \left(x_1^2 - 2x_1 + \frac{x_2^3}{3} + \frac{2}{3} \right)^2 + \left(x_1^3 - x_1 x_2 - 2x_1 + \frac{x_2^2}{2} + \frac{3}{2} \right)^2,$$

με $f(x^*) = 0$ στο $x^* = (1, 1)$.

6. **Συνάρτηση Kearfott** [55]

$$f(x) = (x_1^2 + x_2^2 - 2)^2 + (x_1^2 - x_2^2 - 1)^2,$$

με $f(x^*) = 0$ στο $x^* = (\pm\sqrt{1.5}, \pm\sqrt{0.5})$.

7. **Συνάρτηση Broyden banded** [71]

$$f(x) = \sum_{i=1}^n f_i^2(x),$$

με

$$f_i(x) = x_i(2 + 5x_1^2) + 1 - \sum_{j \in J_i} x_j(1 + x_j),$$

όπου

$$J_i = \{j : j \neq i, \max\{1, i - m_l\} \leq j \leq \min\{n, i + m_u\}\} \quad \text{και } m_l = 5, m_u = 1.$$

Εδώ έχουμε:

Για $n = 2$, $f(x^*) = 0$ στο $x^* = (-0.42730462, -0.42730462)$.

Για $n = 3$, $f(x^*) = 0$ στο $x^* = (-0.42783984, -0.55240668, -0.47614734)$.

8. **Τριγωνομετρική συνάρτηση** [71]

$$f(x) = \sum_{i=1}^n f_i^2(x),$$

όπου

$$f_i(x) = n - \sum_{j=1}^n \cos x_j + i(1 - \cos x_i) - \sin x_i$$

Για $n=3$ έχουμε $f(x^*)=0$ στα σημεία

$$x^* = (0, 0, 0),$$

$$x^* = (0.13865866, 0.15238123, 0.46778723)$$

$$\text{και } x^* = (0.22497195, 0.51431111, 0.30305234).$$

9. **Γραμμική συνάρτηση τάξης 1** [71]

$$f(x) = \sum_{i=1}^n f_i^2(x),$$

όπου

$$f_i(x) = -1 + i \sum_{j=1}^n jx_j,$$

με $f(x^*) = \frac{3}{7}$ σε κάθε σημείο για το οποίο $\sum_{j=1}^n jx_j^* = \frac{3}{7}$.

Π. χ. για $n=3$, $x^* = (0.60204082, 0.20408163, -0.19387755)$.

10. **Συνάρτηση ποινής 1** [71]

$$f(x) = \sum_{i=1}^m f_i^2(x), \quad m = n+1$$

όπου

$$f_i(x) = \sqrt{a}(x_i - 1), \quad 1 \leq i \leq n, \quad a = 10^{-5},$$

$$f_{n+1}(x) = \left(\sum_{j=1}^n x_j^2 \right) - \frac{1}{4}.$$

Για $n=4$, έχουμε $f(x^*) = 10^{-5} \cdot 2.24997K$ στο σημείο

$$x^* = (-0.24998750, -0.24998750, -0.24998750, -0.24998750)$$

11. Συνάρτηση Μπότσαρη [12]

$$f(x) = 100 \left[x_n - \left(\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n-1} x_i \right)^2 \right]^8 + \sum_{i=1}^{n-1} (1 - x_i)^8,$$

με $f(x^*) = 0$ στο $x^* = (1, 1, \dots, 1)$.

12. Συνάρτηση Rosenbrock [71]

$$f(x_1, x_2) = 100(x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2$$

με $f(x^*) = 0$ στο $x^* = (1, 1)$.

13. Ιδιάζουσα γενικευμένη συνάρτηση Powell [71].

$$f(x_1, x_2, x_3, x_4) = (x_1 + 10x_2)^2 + 5(x_3 - x_4)^2 + (x_2 - 2x_3)^4 + 10(x_1 - x_4)^4$$

Εδώ έχουμε $f(x^*) = 0$ στην αρχή.

14. Συνάρτηση Brown and Dennis [71].

$$f(x) = \sum_{k=1}^{20} \left[(x_1 + t_k x_2 - e^{t_k})^2 + (x_3 + x_4 \sin t_k - \cos t_k)^2 \right]^2,$$

όπου $t_k = \frac{k}{5}$ με $f(x^*) = 85822,2$.

15. Συνάρτηση Freudenstein and Roth [71].

$$f(x) = \sum_{i=1}^2 f_i^2(x),$$

όπου

$$f_1(x) = -13 + x_1 + ((5 - x_2)x_2 - 2)x_2$$

$$f_2(x) = -29 + x_1 + ((x_2 + 1)x_2 - 14)x_2$$

με $f(x^*) = 0$ στο σημείο $x^* = (5, 4)$ και

$f(x^*) = 48.9842...$ στο $x^* = (11.41..., -0.8968...)$.

16. Σχεδόν γραμμική συνάρτηση Brown [71]

$$f(x) = \sum_{i=1}^m f_i^2(x),$$

όπου

$$f_i(x) = x_i + \sum_{j=1}^n x_j - (n+1), \quad 1 \leq i \leq m$$

$$f_m(x) = \prod_{j=1}^n x_j - 1$$

με, $f(x^*) = 0$ στο $x^* = (a, K, a, a^{1-n})$,

όπου το a ικανοποιεί την εξίσωση $na^n - (n+1)a^{n-1} + 1 = 0$

και $f(x^*) = 1$ στο $x^* = (0, K, 0, n+1)$.

17. Συνάρτηση Avriel (Πρόβλημα 12D) [3]

$$f(x) = (x_1 - x_2)^2 + (x_2 - x_3)^4$$

υπό τους περιορισμούς

$$x_1 + x_1 x_2^2 + x_3^4 = 3$$

με $f(x^*) = 0$ σε κάθε σημείο με $x_1 = x_2 = x_3$

18. Συνάρτηση Chamberlain [19, 68]

$$f(x_1, x_2) = -x_1 + \tau(x_1^2 + x_2^2 - 1)$$

υπό τους περιορισμούς

$$x_1^2 + x_2^2 - 1 = 0,$$

όπου το τ είναι πραγματική παράμετρος.

Για $\tau = 10$, έχουμε $f(x^*) = -1$ σε διάφορα σημεία, όπως τα $\left(-\frac{1}{2}, 1\right), (1, 0)$.

BIBΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- [1] Abadie, J. (1967), “On the Kuhn-Tucker Theorem”, in *Nonlinear Programming*, J. Abadie (Ed.), North-Holland Publishing Co., Amsterdam.
- [2] Armijo, L. (1966), “Minimization of functions having Lipschitz continuous first partial derivatives”, *Pacific J. Math.*, 16, 1-3.
- [3] Avriel, M. (1976), *Nonlinear Programming, Analysis and Methods*, Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, New Jersey.
- [4] Bard, Y. (1967), “On the Numerical Instability of Davidon-like Methods”, IBM N.Y. Sci. Center, Rept. 320-2913.
- [5] Barzilai, J. and Borwein, J.M. (1988), “Two-point step size gradient methods”, *IMA J. Num. Anal.*, 8, 141-148.
- [6] Bazaraa, M.S. (1970), *Nonlinear Programming: Nondifferentiable Functions*, Ph. D. dissertation, Georgia Institute of Technology, Atlanta.
- [7] Bazaraa, M.S., Goode, J.J., and Shetty, C.M. (1972), “Constraint Qualifications Revisited”, *Management Science*, 18, 567-573.
- [8] Beale, E.M.L. (1967), “Numerical Methods”, in *Nonlinear Programming*, Abadie, J. (Ed.), North-Holland Publishing Co., Amsterdam.
- [9] Beltrami, E. J. (1967), “A constructive Proof of the Kuhn –Tucker Multiplier Rule”, *J. Math. Anal. & Appl.*, 26, 297-306.
- [10] Bacopoulos A. and Botsaris, C.A. (1992), “A new conic method for unconstrained minimization”, *J. Math. Anal. Appl.*, 167, 12-31.
- [11] Botsaris, C.A. (1975), *Differential Descent Methods for Function Minimization*, PH. D. Thesis, Johannesburg.
- [12] Botsaris, C.A. (1978), “A curvilinear optimization method based upon iterative estimation of the eigensystem of the Hessian matrix”, *J. Math. Anal. Appl.*, 63, 396-411.
- [13] Botsaris, C.A. and Jacobson, D.H. (1979), “A Newton type curvilinear search method for optimization”, *J. Math. Anal. & Appl.*, 69, 372-397.
- [14] Botsaris, C.A. (1981), “Constrained Optimization Along Geodesics”, *J. Math. Anal. Appl.*, 79, 295-306.
- [15] Box, M.J., Davies, D., and Swann, W.H. (1969), *Nonlinear Optimization Techniques*, ICI Monograph of Mathematics and Statistics, no. 5, Oliver and Boyd Ltd., London.

- [16] Broyden, C.G. (1967), "Quasi-Newton Methods and their Applications to Function Minimization", *Math. Comp.*, 21, 368.
- [17] Carroll, C.W. (1961), "The Created Response Surface Technique for Optimizing Nonlinear Restrained Systems", *Operations Research*, 9, 169-184.
- [18] Cauchy, A. (1847), *Méthode générale pour la resolution des systèmes d'équations simultanées*, Comp. Rend. Acad. Sci. Paris 25, 536-538
- [19] Chamberlain, R.M., Powell, M.J.D, Lemarechal, C. and Pedersen, H.C. (1982), "The Watchdog Technique for Forcing Convergence in Algorithms for Constrained Optimization", *Mathematical Programming Study*, 16, 1-17.
- [20] Dantzig, G.B. (1963), *Linear Programming and Extensions*, Princeton University Press, Princeton, N. J.
- [21] Davidon, W.C. (1959), "Variable metric methods for minimization", A. E. C., Research and Development Report, No. ANL-5990, Argonne Nat'l Lab., Argonne, Illinois.
- [22] Davison, E.J. and Wong, P. (1973), "A robust algorithm that minimizes L-functions in a finite number of steps and rapidly minimizes general functions, assuming that the derivatives are not available", Control System Report No 7313, Dept. of Electrical Engineering, Univ. of Toronto, Canada.
- [23] Dennis Jr., J.E. and Schnabel, R.B. (1983), *Numerical methods for unconstrained optimization and nonlinear equations*, Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, New Jersey.
- [24] Dieudonne, J. (1969), *Foundations of modern analysis*, Academic Press, New York.
- [25] Dreyfus, S. E. (1965), *Dynamic Programming and the Calculus of Variations*, Academic Press, N. Y.
- [26] Elsgolc, L. E. (1962), *Calculus of Variations*, Addison-Wesley Pub. Co. Inc., Reading.
- [27] Evans, J.P., Gould, F.J., and Tolle, J.W. (1973), "Exact Penalty Functions in Nonlinear Programming", *Math. Prog.*, 4, 72-97.
- [28] Fiacco, A.V., and McCormick, G.P. (1964), "The Sequential Unconstrained Minimization Technique for Nonlinear Programming: A Primal-Dual Method", *Management Science*, 10, 360-366.
- [29] Fiacco, A.V., and McCormick, G.P. (1967), *SIAM J. Appl. Math.*, 15, 505.

- [30] Fiacco, A.V., and McCormick, G.P. (1968), *Nonlinear Programming: Sequential Unconstrained Minimization Techniques*, John Wiley & Sons Inc. New York.
- [31] Fiacco, A.V., and McCormick, G.P. (1968), *Operations Res.*, 16, 820.
- [32] Fletcher, R. and Powell, M. (1963), “A rapidly convergent descent method for minimization”, *Comput. J.*, 6, 163-168.
- [33] Fletcher, R. and Reeves, C. (1964), “Function minimization by conjugate gradients”, *Comput. J.*, 7, 149-154.
- [34] Fletcher, R. (1971), “A General Quadratic Programming Algorithm”, *J. Inst. Math. Appl.*, 7, 76-91.
- [35] Fletcher, R. (1972), “An Algorithm for Solving Linearly Constrained Optimization Problems”, *Math. Prog.*, 2, 133-165.
- [36] Gelfand, I. M., and Fomin, S. V. (1963), *Calculus of Variations*, Prentice-Hall, Inc. Englewood Cliffs, New Jersey.
- [37] Goldfarb, D., and Lapidus, L. (1968), “Conjugate Gradient Method for Nonlinear Programming Problems with Linear Constraints”, *Ind. & Eng. Chem. Fund.*, 7, 142-151.
- [38] Goldfarb, D. (1969), “Extension of Davidon’s Variable Metric Method to Maximization under Linear Inequality and Equality Constraints”, *SIAM J. Appl. Math.*, 17, 739-764.
- [39] Gould, F.J., and Tolle, J.W. (1971), “A Necessary and Sufficient Qualification for Constrained Optimization”, *SIAM J. Appl. Math.*, 20, 164-172.
- [40] Gould, F.J., and Tolle, J.W. (1972), “Geometry of Optimality Conditions and Constraint Qualifications”, *Math. Prog.*, 2, 1-18.
- [41] Grapsa, T.N. and Vrahatis, M.N. (1989), “The implicit function theorem for solving systems of nonlinear equations in $\mathbf{R}^2$ ”, *Inter. J. Computer Math.*, **28**, 171-181.
- [42] Grapsa, T.N. and Vrahatis, M.N. (1990), “A dimension-reducing method for solving systems of nonlinear equations in $\mathbf{R}^n$ ”, *Inter. J. Computer Math.*, **32**, 205-216.
- [43] Grapsa, T.N., Vrahatis, M.N. and Bountis, T.C. (1990) “Solving systems of nonlinear equations in $\mathbf{R}^n$ using a rotating hyperplane in $\mathbf{R}^{n+1}$ ”, *Inter. J. Computer Math.*, **35**, 133-151.
- [44] Grapsa, T.N. and Vrahatis, M.N. (1995), “A new dimension-reducing method for solving systems of nonlinear equations”, *Inter. J. Computer Math.*, **55**, 235-244.

- [45] Grapsa, T.N. and Vrahatis, M.N. (1996), “A dimension-reducing method for unconstrained optimization”, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, **66** 239-253.
- [46] Greenstadt, J. (1967), “On the relative efficiencies of Gradient Methods”, *Math. Comp.*, 21, 360.
- [47] Griffith, R.E., and Stewart, R.A. (1961), A Nonlinear Programming Technique for the Optimization of Continuous Processing Systems, *Management Sci.* 7, 379-392
- [48] Grippo, L., Lampariello, F. and Lycidi, S. (1986), “A nonmonotone line search technique for Newton's method”, *SIAM J. Numer. Anal.*, 23, 707-716.
- [49] David M. Himmelblau (1972), *Applied Nonlinear Programming*, McGraw-Hill Book Company.
- [50] Huard P. (1967), “Resolution of Mathematical Programming with Nonlinear Constraints by the Method of Centers”, in *Nonlinear Programming*, Abadie, J. (Ed.), North-Holland Publishing Co., Amsterdam.
- [51] Jacobson, D.H. and Oksman, W., (1972), “An algorithm that minimizes homogeneous functions of n variables in $n+2$ iterations and rapidly minimizes general functions”, *J. Math. Anal. Appl.*, **38**, 535-552.
- [52] Jacobson, D.H. and Pels, L.M. (1974), “A Modified Homogeneous Algorithm for Function Minimization”, *Journal of Math. Anal. and Appl.*, 46, 533.
- [53] John, F. (1948), “Extremum Problems with Inequalities as Subsidiary Conditions”, in *Studies and Essays, Courant Anniversary Volume*, Friedrichs, K.D., et al. (Eds.), Interscience Publishers, New York.
- [54] Kantorovitch, L.V. (1939), *Μαθηματικές μέθοδοι οργάνωσης και σχεδιασμού*.
- [55] Kearfott, B. (1979), “An efficient degree-computation method for a generalized method of bisection”, *Numer. Math.*, **32**, 109-127.
- [56] Kearfott, R.B. (1987), “Some tests of generalized bisection”, *ACM Trans. Math. Software*, **13**, 197-220.
- [57] Kowalik, J., Osborne, M.R., and Ryan, D.M. (1969), “A New Method for Constrained Optimization Problems”, *Operations Research*, 17, 973-983.
- [58] Kuhn, H.W., and Tucker, A.W. (1951), “Nonlinear Programming”, in *Proceedings of the Second Berkeley Symposium on Mathematical Statistics and Probability*, J. Neyman (Ed.), Univ. Of California Press, Berkeley, Calif.

- [59] Kupferschmid, M. and Ecker, J.G. (1987), “A note on solution of nonlinear programming problems with imprecise function and gradient values”, *Math. Program. Study*, **31**, 129-138.
- [60] Levenberg, K.A. (1944), “A Method for the Solution of Certain Nonlinear Problems in Least Squares”, *Quart. Appl. Math.*, **2**, 164-168.
- [61] Lootsma, F.A. (1968), “Constrained Optimization via Parameter-Free Penalty Functions”, *Philips Res. Repts.*, **23**, 424-437.
- [62] Lootsma, F.A. (1972), “A Survey of Methods for Solving Constrained Minimization Problems via Unconstrained Minimization”, in *Numerical Methods for Nonlinear Optimization*, Lootsma, F.A. (Ed.), Academic Press, London.
- [63] Luenberger, D.G. (1973), *Introduction to linear and nonlinear programming*, Addison-Wesley Publishing Company, Inc., Reading, Massachusetts.
- [64] Mann, H. B. (1943), “Quadratic Forms with Linear Constraints”, *Amer. Math. Monthly*, **50**, 430-433.
- [65] Manoussakis, G.E., Sotiropoulos, D.G., Botsaris, C.A., and Grapsa, T.N. (2002), “A Non-Monotone Conic Method For Unconstrained Optimization”, In: Proceedings of 4th GRACM, Congress on Computational Mechanics, 27-29 June, University of Patras, Greece.
- [66] Manoussakis, Grapsa, T.N., and D.G., Botsaris, C.A (2003), “A Dimension - Reducing Conic Method For Unconstrained Optimization”, In: Proceedings of 6th Hellenic European Conference on Computer Mathematics and its Applications, HERCMA, Greece.
- [67] Mangasarian, O.L., and Fromovitz, S. (1967), “The Fritz John Necessary Optimality Conditions in the Presence of Equality and Inequality Constraints”, *J. Math. Anal. & Appl.*, **17**, 37-47.
- [68] Maratos, N. (1978), *Exact penalty function algorithms for finite dimensional and control optimization problems*, Thesis, University of London.
- [69] Marquardt, D.W. (1963), “An Algorithm for Least-Squares Estimation of Nonlinear Parameters”, *J. SIAM*, **11**, 431-441.
- [70] McCormick, G. P., (1967), “Second Order Conditions for Constrained Minima”, *SIAM J. Appl. Math.*, **15**, 641-652
- [71] More, B.J., Garbow, B.S. and Hillstom, K.E. (1981), “Testing unconstrained optimization”, *ACM Trans. Math. Software*, **7**, 17-41.
- [72] Ortega, J.M. and Rheinbolt, W.C. (1970), *Iterative Solution of Nonlinear Equations in Several Variables*, Academic Press, New York.

- [73] Ostrowski, A. (1973), *Solution of equations in Euclidean and Banach spaces*, Third Edition, Academic Press, London.
- [74] Phipps, C. G. (1952), “Maxima and Minima Under Restraint”, *Amer. Math. Monthly*, 59, 230-235.
- [75] Picard, E. (1892), « Sur le nombre des racines communes a plusieurs equations simultanees », *J. Math. Pure. Appl.* (4^e serie) 8, 5-24.
- [76] Picard, E. (1922) *Traite d'analyse*, 3rd ed., Gauthier-Villars, Paris.
- [77] Plagianakos, V.P., Sotiropoulos, D.G. and Vrahatis, M.N. (1998), “A Nonmonotone Backpropagation Training Method for Neural Networks”, Dept. of Mathematics, Univ. of Patras, Technical Report No.98-04.
- [78] Polak, E. (1969), “On the Convergence of Optimization Algorithms”, *Rev. Inform. Rech. Oper.*, 16, 17-34.
- [79] Polak, E. (1971), *Computational Methods in Optimization: A Unified Approach*, Academic Press, New York.
- [80] Powell, M.J.D. (1964), “An Efficient Method of Finding the Minimum of a Function of Several Variables Without Calculating Derivatives”, *Computer J.*, 7, 155
- [81] Powell, M.J.D. (1970), “A New Algorithm for Unconstrained Minimization”, in *Nonlinear Programming*, Rosen, J.B., Mangasarian, O.L., and Ritter, K. (Eds.), Academic Press, New York.
- [82] Press, W.H., Flannery, B.P., Teukolsky, S.A. and Vetterling, W.T. (1992), *Numerical Recipes in Fortran 77, The Art of Scientific Computing*, 2nd ed., Cambridge University Press, New York.
- [83] Press, W.H., Flannery, B.P., Teukolsky, S.A. and Vetterling, W.T. (1992), *Numerical Recipes in Fortran 90, The Art of Scientific Computing*, Cambridge University Press, New York.
- [84] Rao, S.S. (1984), *Optimization, Theory and Applications*, Wiley Eastern Limited, New Delhi.
- [85] Raydan, M. (1997), “The Barzilai and Borwein gradient method for the large scale unconstrained minimization problem”, *SIAM J. Optim.*, 7, 26-33.
- [86] Rheinboldt, W.C. (1974), *Methods for solving systems of equations*, SIAM, Philadelphia.
- [87] Rosen, J.B. (1960), “The Gradient Projection Method for Nonlinear Programming, Part I. Linear Constraints”, *J. SIAM*, 8, 181-217.

- [88] Rosen, J.B. (1961), “The Gradient Projection Method for Nonlinear Programming, Part II. Nonlinear Constraints”, *J. SIAM*, 9, 514-532.
- [89] Rudin, W. (1964), *Principles of Mathematical Analysis*, McGraw-Hill Book Co., New York.
- [90] Sawyer, S. (2002), *Generalized Inverses: How to Invert a Non-Invertible Matrix*.
- [91] Sikorski, K. (1982), “Bisection is optimal”, *Numer. Math.*, 40, 111-117.
- [92] Sikorski, K. and Trojan, G.M. (1990), “Asymptotic near optimality of the bisection method”, *Numer. Math.*, 57, 421-433.
- [93] Smith, H.V. (1965), *A Process Optimization Program for Nonlinear Systems: POP II*, IBM Gen. Program Library 7090 H9 IBM 0021.
- [94] Traub, J.F. (1964), *Iterative methods for the solution of equations*, Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, NJ.
- [95] Varga, R. (1962), *Matrix Iterative Analysis*, Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, New Jersey.
- [96] Vrahatis, M.N. and Iordanidis, K.I. (1986), “A rapid generalized method of bisection for solving systems of non-linear equations”, *Numer. Math.*, **49**, 123-138.
- [97] Vrahatis, M.N. (1988), “Solving systems of nonlinear equations using the nonzero value of the topological degree”, *ACM Trans. Math. Software*, **14**, 312-329.
- [98] Vrahatis, M.N. (1988), “CHABIS: A mathematical software package for locating and evaluating roots of systems of nonlinear equations”, *ACM Trans. Math. Software*, **14**, 330-336.
- [99] Vrahatis, M.N. (1989), “A short proof and a generalization of Miranda’s existence theorem”, *Proc. Amer. Math. Soc.*, 107, 701-703.
- [100] Vrahatis, M.N., Androulakis, G.S. and Manoussakis, G.E. (1996), “A New Unconstrained Optimization Method for Imprecise Function and Gradient Values”, *J. Math. Anal. Appl.*, 197, 586-607.
- [101] Weber, H. and Werner, W. (1981), “On the accurate determination of nonisolated solutions of nonlinear equations”, *Computing* 26, 315-326.
- [102] Zangwill, W.I. (1967), “Nonlinear Programming via Penalty Functions”, *Management Sci.*, 13, 344-358.
- [103] Zoutendijk, G. (1960), *Methods of Feasible Directions*, American Elsevier Publishing Company, New York.

- [104] Zoutendijk, G. (1966), “Nonlinear Programming: A Numerical Survey”, *SIAM J. Control*, 4, 194-210.
- [105] Μπότσαρης, Χ.Α. (1991), *Δυναμικός και Μη Γραμμικός Προγραμματισμός*, Εκδ. Παν/μίου Πατρών.
- [106] Μπότσαρης, Χ.Α. (1991), *Επιχειρησιακή Έρευνα*, Εκδ. Παν/μίου Πατρών.