CAPITOLUL IV

ELEMENTE DE PROGRAMARE NELINIARA

§ 1.Introducere

Caracteristic unei probleme de *programare liniară* este faptul că toate funcţiile implicate în ea – funcţia *obiectiv* şi *restricţii* – sunt *liniare.* Deşi *ipotezele de liniaritate* au loc în numeroase situaţii practice tot atât de frecvent ale nu sunt îndeplinite. De fapt, mulţi economişti teoreticieni au constatat că un anume *grad de neliniaritate* este *regula şi nu excepţia* în problemele de *planificare economică*.

Există deci o puternică *motivaţie economică* pentru studiul problemelor de *programare neliniară* a căror *formă canonică de prezentare* este:

$$
(P)\begin{cases}
\text{Sa se determine } x^* = (x_1^*, x_2^*, ..., x_n^*) \\
\text{ care minimizeaza functia obiectiv :} \\
\qquad z = f(x_1, x_2, ..., x_n) \\
\text{cu satisfacerea restrictiilor :} \\
\quad g_i(x_1, x_2, ..., x_n) \le 0 \quad i = 1,2,...,m \\
\text{si a conditiilor de nenegativitate :} \\
\quad x_1 \ge 0 \text{ , } x_2 \ge 0 \text{ , ... } x_n \ge 0
\end{cases}
\Leftrightarrow
\begin{cases}
\min f(x) \quad x \in R^n \\
g_i(x) \le 0 \quad i = 1,2,...,m \\
\quad x \ge 0
\end{cases}
$$

Dacă în cazul liniar ($\Leftrightarrow$ f si g_i sunt funcţii liniare) există (cel puţin) o metodă generală de rezolvare – de exemplu metoda *simplex* – în cazul neliniar nu există o asemenea metodă. Totuşi progrese substanţiale au fost făcute în unele cazuri speciale prin impunerea unor condiţii asupra funcţiilor f si g_i .Aria acestor cazuri speciale este destul de mare astfel că nu ne vom putea opri decât asupra unora mai relevante.

§ 2. Neliniaritatea în modelarea proceselor economice. Câteva exemple

Să considerăm *problema firmei* al cărei obiectiv este determinarea unui *program de producţie* astfel încât:

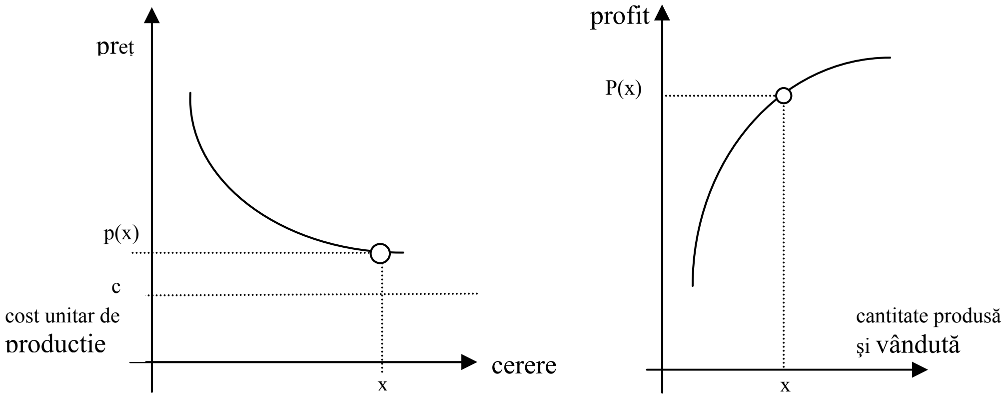
- necesarul de resurse pentru susţinerea programului să se încadreze în disponibile *date*;
- *profitul total*, rezultat din *vânzarea* bunurilor produse să fie *maxim*.

În multe situaţii practice, *preţurile* şi *costurile unitare de fabricaţie* pot fi considerate *constante* astfel că şi profiturile unitare vor fi la fel. În consecinţă, în aceste cazuri funcţia obiectiv, care reprezintă profitul total, va fi *liniară*:

$$f(x_1, x_2, ..., x_n) = P_1 x_1 + P_2 x_2 + ... + P_n x_n$$

(x_j reprezintă cantitatea produsă şi vândută din bunul j;P_j este profitul unitar corespunzător bunului j)

Nu întotdeauna tot ceeace se produce dintr-un bun se poate şi vinde la un anumit preț. Apare aşa numita problemă a *elasticității prețului*: cantitatea de marfă vândută se află într-o *relație inversă* cu prețul cerut aşa cum arată *curba preț – cerere* (fig. 2.1a)



p(x) este prețul care permite firmei să vândă x unități de produs

a) b)

Figura 2.1

Dacă *c* este *costul unitar de producție*, cost pe care îl presupunem – pentru simplificarea expunerii – fix, atunci profitul firmei, rezultat din producerea şi vânzarea cantității x este dat de funcția *neliniară* (vezi fig. 2.1b):

$$P(x) = x.p(x) – c(x)$$

Dacă fiecare din produsele firmei are o asemenea funcție profit, notată $P_j(x_j)$, profitul total va fi exprimat prin funcția neliniară:

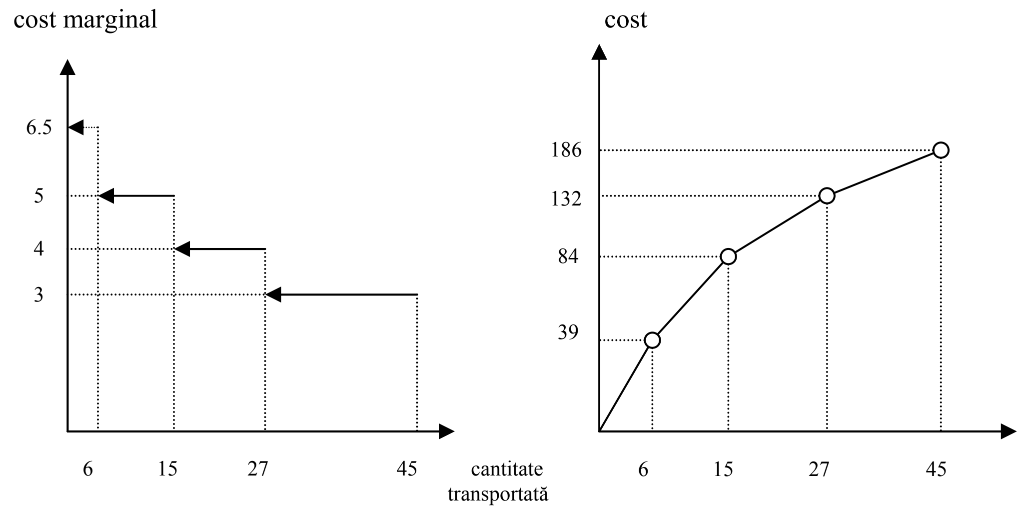
$$f(x_1, x_2, ..., x_n) = \sum_{j=1}^{n} P_j(x_j)$$

O altă sursă de neliniarități în funcția obiectiv o constituie variația *costului marginal* - pentru producerea a încă unei unități dintr-un produs - în funcție de nivelul producției. Acest cost marginal poate să scadă în unele situații (ca urmare a trecerii la producția de serie, al acumulării experienței şi al perfecționării procesului de producție) iar în altele poate să crească (ore suplimentare,utilizarea în regim de urgență a unor capacități de producție mai costisitoare pentru satisfacerea unor cereri imediate)

Neliniaritatea poate apare şi în restricții într-o manieră asemănătoare. De exemplu, dacă există o *restricție bugetară* asupra costului producției, relația corespunzătoare va fi cu siguranță neliniară în cazul în care *costul marginal al producției* este *variabil.*

Pentru restricțiile privitoare la alte tipuri de resurse, neliniaritatea apare ori de câte ori *consumurile nu sunt direct proporționale cu nivelele de producție.*

Exemplul 2.1 În *problema transporturilor* se urmăreşte determinarea unui program pentru transportul unui produs de la diferite surse la diverşi consumatori, cunoscându-se cantitățile disponibile şi cererile, astfel încât costul total al transportului să fie minim. În programarea liniară, costul transportului unei unități de produs de la o anumită sursă la o anumită destinație a fost considerat *constant*, independent de cantitatea transportată. De multe ori se întâmplă ca la cantități mari să se acorde la transport anumite reduceri; în aceste situații, costul marginal al transportului unei unități suplimentare tinde să scadă şi ca o consecință costul C(*x*) al transportării cantității *x* este dat de o funcție neliniară. Să analizăm datele din fig. 2.2 a) şi b).



a) *b*)

Figura 2.2

Fie x cantitatea transportată şi C(x) costul transportării cantității x.

- dacă $0 \le x \le 6$ costul unitar de transport este de 6.5 u.m. deci $C_1(x) = 6.5x$ u.m.;
- dacă $6 \le x \le 15$, 6 unități vor fi transportate cu costul 6.5 u.m. per unitate iar următoarele cu numai 5 u.m. per unitate astfel că :

$$C_2(x) = 6.5 \times 6 + 5.(x - 6) = 9 + 5.x$$

- dacă $15 \le x \le 27$, 15 unități vor fi transportate cu costul $C_2(15) = 84$ iar următoarele cu numai 4 u.m. per unitate. Costul total va fi :

$$C_3(x) = 84 + 4.(x - 15) = 24 + 4.x$$

- dacă $27 < x \le 45$, 27 unități vor fi transportate cu costul $C_3(27) = 132$ iar următoarele cu 3 u.m. per unitate de unde costul total:

$$C_4(x) = 132 + 3.(x - 27) = 51 + 3.x$$

Prin urmare, costul C(x) al transportării a x unități este dat de funcția:

$$C(x) = \begin{cases} 6.5x & 0 \le x \le 6 \\ 9 + 5.x & 6 < x \le 15 \\ 24 + 4.x & 15 < x \le 27 \\ 51 + 3.x & 27 < x \le 45 \end{cases}$$

care este *neliniară* dar *"liniară pe porțiuni*". Din fig. 4.2b) rezultă că pantele porțiunilor liniare ale graficului funcției C(x) sunt chiar costurile marginale evidențiate în fig 4.2a).

Dacă fiecare cuplu (sursă i , destinație j) are o funcție cost similară, aşa încât costul transportului a x_{ij} unități de la i la j este dat de funcția neliniară $C_{ij}(x_{ij})$ atunci costul total este reprezentat de funcția de asemenea neliniară;

$$f(x_1, x_2, ..., x_n) = \sum_{i,j} C_{ij}(x_{ij})$$

Aceste considerații nu modifică restricțiile problemei de transport care rămân liniare:

$\sum_{j=1}^{n} x_{ij} = a_i \quad i = 1,2,...,m \quad \Leftrightarrow$ suma cantităților livrate de sursa i nu depăşeşte disponibilul său;

$\sum_{i=1}^{m} x_{ij} = b_j \quad j = 1,2,...,n \quad \Leftrightarrow$ suma cantităților primite de consumatorul j acoperă cererea sa.

Exemplul 2.2 La terminalul unei conducte petroliere situat într-un port sosesc vasele A,B,C pentru a fi încărcate. Vasul A trebuie încărcat cu 15 mii tone în maximum 48 de ore, vasul B trebuie încărcat cu 20 mii tone în maximum 60 de ore iar vasul C trebuie încărcat cu 45 mii tone în maximum 70 de ore. (timpii de staționare pentru încărcare se numesc timpi de stalii şi sunt prevăzuți în contractul de transport; orice depăşire a acestor timpi (contrastalii) se penalizează, penalizarea depinzând de tipul navei etc) Terminalul dispune de pompe şi conducte care însumează o capacitate de încărcare de 1200 tone pe oră. Se pune problema de a stabili ce debit trebuie afectat fiecărei nave astfel încât ele să fie încărcate în cel mai scurt timp.

Dacă se notează cu y_1 , y_2 , y_3 deditele repartizate vaselor A,B,C şi cu x_1 , x_2 , x_3 numărul de ore necesar încărcării lor se obține uşor următorul program neliniar:

$$\begin{cases} (\min) f = x_1 + x_2 + x_3 \\ x_1 y_1 = 15000 \quad x_2 y_2 = 20000 \quad x_3 y_3 = 45000 \\ y_1 + y_2 + y_3 \le 1200 \\ x_1 \le 48 \, , x_2 \le 60 \, , x_3 \le 70 \\ x_j , y_j \ge 0 \quad j = 1,2,3 \end{cases}$$

Eliminând y_1 , y_2 , y_3 rezultă modelul mai simplu:

$$\begin{cases} (\min) f = x_1 + x_2 + x_3 \\ \frac{15000}{x_1} + \frac{20000}{x_2} + \frac{45000}{x_3} \le 1200 \\ x_1 \le 48 \, , x_2 \le 60 \, , x_3 \le 70 \\ x_1 \ge 0, x_2 \ge 0, x_3 \ge 0 \end{cases}$$

§ 3. Dificultăți cauzate de neliniaritate

Considerăm problema de optimizare:

$$(P) \begin{cases} \min f(x) & , \quad x \in R^n \\ g(x) \le 0 & , \quad g(x) = (g_1(x), g_2(x), ..., g_m(x)) \\ x \ge 0 \end{cases}$$

a cărei mulțime de soluții admisibile o notăm cu A:

$$A = \{ x \in R^n | g(x) \le 0 \Leftrightarrow g_1(x) \le 0, g_2(x) \le 0, ..., g_m(x) \le 0; x \ge 0 \}$$

(P) se rescrie:

Să se determine $x^* \in A$ cu proprietatea: $f(x^*) = \min\{ f(x), x \in A \}$

Este cunoscut faptul că dacă (P) este un program *liniar* (adică f şi $g_1,g_2,\dots,g_m$ sunt funcţii *liniare*) atunci mulţimea A este *convexă* şi mai mult chiar *poliedrală* (intersecţie finită de semispaţii).Aceste proprietăţi ale mulţimii A plus faptul că funcţia obiectiv este şi ea liniară ne asigură că:

- o soluţie optimă – dacă există – este un punct de minim global adică:

$$f(x^{*}) \le f(x) \quad (\forall)\ x \in A$$

- cel puţin o soluţie este un vârf al mulţimii A

Cum numărul vârfurilor mulţimii poliedrale A este *finit* urmează că, pentru programul liniar (P), problema determinării unei soluţii optime x^* din mulţimea, în general infinită, a tuturor soluţiilor admisibile se reduce la găsirea lui x^* în mulţimea finită a vârfurilor acestei mulţimi.
Metoda *simplex* realizează în mod *sistematic* această căutare oferind într-un număr finit de paşi (iteraţii) soluţia optimă x^*.

Neliniaritatea obiectivului sau a unora dintre restricţii face ca unele din proprietăţile relevate mai sus să dispară fapt care duce la *complicarea* sarcinii de determinare a optimului.

1) De la bun început vom sublinia faptul că în *programarea neliniară* – cu câteva excepţii – metodele de rezolvare obţin "teoretic" soluţia optimă ca *limită* a unui şir de soluţii. Astfel, un proces *concret de optimizare neliniară* este *finit* nu datorită structurii problemei ci prin *voinţa utilizatorului* care limitează numărul paşilor în funcţie de o serie întreagă de factori cum ar fi : complexitatea calcului, timpul disponibil, performanţele echipamentului de calcul etc.

2) este posibil ca funcţia obiectiv din (P) să aibe mai multe *minime locale* pe mulţimea soluţiilor admisibile A . Pentru exemplificare considerăm problema:

$$(P)\begin{cases} \min f(x_1,x_2) = 2x_1 + 3x_2 \\ \quad x_1^2 + x_2^2 \ge 4 \\ x_1 \ge 0\,,\, x_2 \ge 0 \end{cases}$$

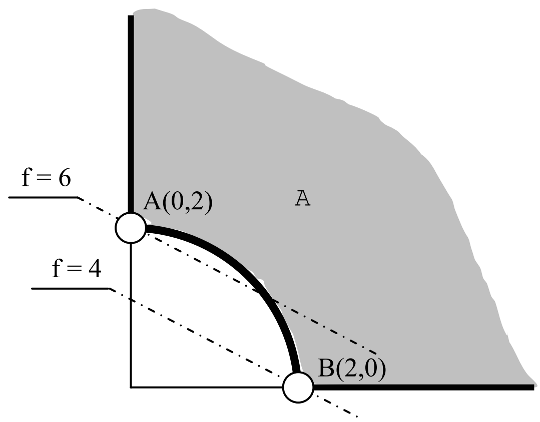


Figura 3.1

Mulţimea soluţiilor admisibile A este vizualizată în fig.3.1. Evident, A nu este o mulţime convexă. Punctul A(0,2) oferă obiectivului valoarea 6 care este *cea mai mică valoare* a funcţiei f pe soluţiile admisibile situate *în imediata apropiere de* A! Totuşi A nu este soluţia optimă a problemei (P) deoarece în B(2,0) f are valoarea 4 < 6. Ca şi A, B minimizează funcţia obiectiv pe soluţiile admisibile "*vecine*" cu B dar, spre deosebire de A, B minimizează obiectivul pe întreaga mulţime A şi în consecinţă reprezintă soluţia optimă a problemei (P). Spunem că A şi B sunt puncte de *minim local* ale funcţiei obiectiv f, B fiind chiar un punct de *minim global*.

Posibilitatea existenţei mai multor minime locale ale funcţiei obiectiv reprezintă o serioasă dificultate în rezolvarea unui program neliniar. Într-adevăr, prin însăşi formulare, într-o asemenea problemă se cere determinarea minimului global al obiectivului. Or, toate metodele de optimizare neliniară cunoscute, nu reuşesc să determine decât cel mult un minim local, neexistând garanţia că acesta coincide cu minimul global căutat.

După cum vom vedea, dacă A este convexă iar funcţia obiectiv este convexă şi se minimizează atunci aceasta are cel mult un minim local care – dacă există –este automat global ! Din fericire, marea majoritate a aplicaţiilor economice au proprietăţile de mai sus, fapt care constituie un serios avantaj.

3) Chiar dacă restricţiile din (P) sunt *liniare* dar obiectivul ramâne *neliniar* însă *convex*, soluţia optimă, deşi se află pe frontiera lui A nu este neapărat *vârf*. Considerăm următorul exemplu:

$$\begin{cases} \min f(x_1,x_2) = (x_1 - \frac{7}{2}x_2)^2 + 2(x_2-4)^2 \\ x_1 + x_2 \le 6 \\ x_1 - x_2 \le 1 \\ 2x_1 + x_2 \ge 6 \\ -\frac{1}{2}x_1 + x_2 \le 4 \\ x_1, x_2 \ge 0 \end{cases}$$

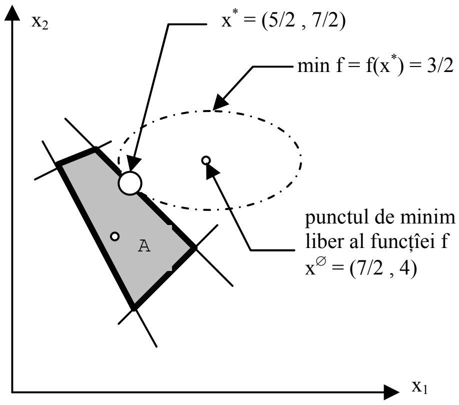


Figura 3.2

Curbele de nivel ale funcţiei obiectiv *patratice f* sunt *elipse centrate* în $x^{\varnothing}$ = (7/2 , 4) care reprezintă şi punctul de minim *nerestricţionat* al lui *f*. Se poate arăta, prin mijloace algebrice elementare că *f* are pe A un minim *global* x^* = (5/2 , 7/2) care nu este vârf al lui A .

4) este posibil ca soluţia optimă să fie situată în interiorul mulţimii A . Pentru exemplificare să ataşăm restricţiilor din problema precedentă funcţia

$$f(x_1,x_2) = (x_1 - 2)^2 + 2(x_2 - 3)^2$$

al cărei minim liber este punctul $x^{\varnothing}$ = (2 , 3). Deoarece $x^{\varnothing} \in$ A (şi mai precis $x^{\varnothing} \in$ Int (A)) acest punct reprezintă soluţia optimă x^*.

§ 4. Clase de probleme neliniare

1) Problemele de optimizare *fără restricţii* au forma generală:
Să se determine $x^* \in R^n$ care minimizează valoarea funcţiei

$$z = f(x_1, x_2, \ldots, x_n)$$

minimul fiind luat dupa toţi $x \in R^n$ în care funcţia *f* este definită.

2) Probleme de optimizare cu *restricţii liniare* şi funcţie obiectiv *neliniară*. În această clasă un loc deosebit îl ocupă problemele de *programare patratică* în care funcţia obiectiv este un *polinom* de gradul *doi* în variabilele sale:

$$f(x_1, x_2, \ldots, x_n) = c_0 + \sum_{i=1}^{n} c_i x_i + \sum_{1 \le i \le j \le n} c_{ij} x_i x_j$$

Importanţa problemelor de programare patratică este motivată prin:

- faptul că modelează cu suficientă acuratețe multe situații practice;
- se rezolvă prin metode derivate din metoda simplex într-un număr finit de paşi;
- rezolvarea multor probleme cu restricții liniare şi funcție obiectiv neliniară se poate reduce la rezolvarea unei secvențe de probleme de programare patratică ale căror funcții obiectiv aproximează din ce în ce mai bine obiectivul neliniar original.

3) Problemele de programare *convexă* se caracterizează prin:

- funcție obiectiv *convexă* dacă aceasta se *minimizează* (echivalent: funcție obiectiv *concavă* dacă aceasta se *maximizează*);
- restricțiile *inegalități* sunt de forma $g_i(x) \leq 0$ în care g_i este o funcție *convexă* (echivalent $g_i(x) \geq 0$ cu g_i funcție *concavă*);
- eventualele restricții *egalități* sunt *liniare*, cerință motivată prin aceea că funcțiile liniare sunt singurele funcții simultan convexe şi concave.

Problemele convexe au următoarele proprietăți fundamentale:

- mulțimea soluțiilor admisibile este *convexă*;
- funcția obiectiv admite cel mult un optim (minim sau maxim) *local*; automat acesta va fi un optim *global* şi va reprezenta optimul problemei;
- dacă optimul *liber* (*nerestricționat*) al funcției obiectiv nu este o soluție admisibilă atunci optimul *restricționat* se găseşte cu necesitate pe *frontiera* mulțimii A .

Importanța acestei clase de probleme este *covârşitoare*. Într-adevăr:

- programarea convexă include programarea liniară ;
- în acest domeniu a fost depus cel mai mare efort de cercetare şi s-au obținut cele mai puternice rezultate *teoretice* (cum ar fi teoria dualității neliniare, condițiile de optimalitate Kuhn – Tucker) şi *practice* (metode şi algoritmi de optimizare);
- întregul formalism matematic al teoriei economice moderne se bazează pe ipotezele de convexitate.

4)Problemele de programare *separabilă* se caracterizează prin faptul că funcția obiectiv *f* ca şi funcțiile g_I din restricții sunt *separabile* în sensul următoarei definiții:

Funcția $f(x_1, x_2,..., x_n)$ se numeşte separabilă dacă ea se poate scrie ca o sumă de funcții, fiecare de câte o singură variabilă:

$$f(x_1, x_2,..., x_n) = f_1(x_1) + f_2(x_2) + ... + f_n(x_n)$$

Separabilitatea este importantă prin aceea că uşurează optimizarea. De exemplu, optimizarea unei funcții separabile fără restricții se reduce la optimizarea independentă a termenilor!

5) **Problemele de programare *neconvexă*** reunesc toate problemele care nu satisfac ipotezele de convexitate. Ele sunt "grele" în primul rând din cauza faptului că au mai multe minime locale. După cum s-a mai spus, metodele actuale pot determina un asemenea optim dar nu garantează că optimul găsit este cel global. Din fericire, există câteve tipuri de probleme neconvexe, utile în practică, care pot fi rezolvate fără dificultăți deosebite prin metode speciale. rintre aceste tipuri, se numără problemele de programare *fracționară*. Iată un exemplu:

$$\begin{cases} \min f(x) = \dfrac{cx + c_0}{dx + d_0} \quad x = (x_1, x_2, ..., x_n) \in R^n \\ \quad Ax \le b \\ \quad x \ge 0 \end{cases}$$

unde se presupune că $dx + d_0 > 0$ pe A $= \{x \in R^n \mid Ax \le b\ , x \ge 0\}$.
O asemenea problemă se reduce la un program liniar uzual punând:

$$y = (y_1, y_2, ..., y_n) = \frac{1}{dx + d_0} \cdot x\ ,\ t = \frac{1}{dx + d_0} \text{ astfel că } x = \frac{y}{t}\ .$$

Rezultă programul liniar echivalent în $n + 1$ variabile $y = (y_1, y_2, \ldots, y_n)$ şi t:

$$\begin{cases} \min cy + c_0 t \\ Ay - bt \le 0 \\ dy + d_0 t = 1 \\ y \ge 0\ ,\ t \ge 0 \end{cases}$$

§ 5. Mulţimi şi funcţii convexe

Reamintim că o mulţime C $\subseteq$ R^n se numeşte *convexă* dacă o dată cu două puncte conţine şi segmentul care le uneşte. Formal:

$$\text{C este convexă} \Leftrightarrow_{def.} (\forall) x, y \in C, (\forall)\, \lambda \in [0,1] \Rightarrow (1-\lambda)x + \lambda y \in C$$

Fie C o mulţime convexă şi *f* o funcţie numerică definită în toate punctele mulţimii C. Spunem că *f* este *convexă* dacă:

$(\forall) x, y \in C$, $(\forall)\lambda \in [0,1]$ avem:

$$f((1-\lambda)x + \lambda y) \le (1-\lambda) f(x) + \lambda f(y)$$

Vom zice că *f* este *concavă* dacă funcţia *opusă* –*f* este convexă. Aceasta revine la:

$$f((1-\lambda)x + \lambda y) \ge (1-\lambda) f(x) + \lambda f(y)$$

Funcţia *f* se numeşte *strict convexă* (*strict concavă*) dacă inegalităţile de mai sus sunt *stricte* $(\forall) x, y \in C$ cu $x \ne y$ şi $(\forall)\lambda \in (0,1)$.

Exemple de funcţii convexe

1) Pentru funcţiile de o singură variabilă, convexitatea se traduce prin faptul că graficul "ţine apa". Dacă I este un interval deschis (deci o mulţime convexă din R) şi *f* este o funcţie definită pe I şi care este de două ori derivabilă pe I atunci *f* este convexă $\Leftrightarrow f''(x) \ge 0 \quad (\forall) x \in I$.

2) Orice funcţie liniară de *n* variabile

$$f(x_1, x_2, ..., x_n) = a_1 x_1 + a_2 x_2 + ... + a_n x_n + b$$

este simultan convexă şi concavă.

3) Dacă *f* şi *g* sunt funcţii convexe cu acelaşi domeniu convex de definiţie şi $\alpha \geq 0$, $\beta \geq 0$ atunci combinaţia $\alpha f + \beta g$ este deasemenea o funcţie convexă.

4)Să considerăm funcţia patratică în n variabile:

$$f(x_1, x_2, ..., x_n) = \sum_{j=1}^{n} p_j x_j + \sum_{1 \leq i \leq j \leq n} c'_{ij} x_i x_j$$

definită în întreg R^n. Dacă punem:

$$p = [p_1, p_2, ..., p_n], x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}, C = [c_{ij}]\ , 1 \leq i, j \leq n \text{ ,cu} \begin{cases} c_{ii} = 2c'_{ii}\ , i = 1, ..., n \\ c_{ij} = c_{ji} = c'_{ij}, 1 \leq i < j \leq n \end{cases}$$

f se scrie condensat:

$$f(x) = px + \tfrac{1}{2} x^T C x$$

Notăm că prin construcţie, matricea C este *simetrică*.

Cercetăm în ce condiţii *f* este o funcţie convexă. Deoarece "partea liniară" este convexă, chestiunea se reduce la a vedea în ce condiţii funcţia "pur patratică" $\varphi(x) = x^T C x$ este convexă. Un calcul direct arată că φ satisface identitatea:

$$\varphi((1-\lambda)x + \lambda y) = (1-\lambda)\varphi(x) + \lambda\varphi(y) - \lambda(1-\lambda)\varphi(x-y) \quad (\forall)x, y \in R^n, (\forall)\lambda \in R$$

Acum, dacă $\lambda \in [0,1]$, identitatea precedentă echivalează convexitatea funcţiei φ cu condiţia:

$$z^T C z \geq 0 \quad (\forall) z \in R^n$$

cerinţă care, după cum este cunoscut din algebra liniară, defineşte matricea C ca *matrice pozitiv semidefinită.*

Cu acelaşi raţionament conchidem că φ este strict convexă dacă şi numai dacă matricea C este *pozitiv definită* adică:

$$z^T C z \geq 0 \quad (\forall) z \in R^n \text{ şi } z^T C z = 0 \Rightarrow z = 0$$

Recapitulând obţinem:

Funcţia patratică $f(x) = px + \frac{1}{2} x^T C x$ este convexă (strict convexă) dacă şi numai dacă matricea simetrică C este pozitiv semidefinită (pozitiv definită).

Reamintim că matricea simetrică $C = [c_{ij}]\, , 1 \leq i, j \leq n$ este pozitiv semidefinită (pozitiv definită) dacă şi numai dacă toţi minorii care se sprijină pe diagonala principală, adică:

$$c_{11} \quad ; \quad \begin{vmatrix} c_{11} & c_{12} \\ c_{21} & c_{22} \end{vmatrix}; \quad \cdots \quad ; \begin{vmatrix} c_{11} & c_{12} & \cdots & c_{1n} \\ c_{21} & c_{22} & \cdots & c_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ c_{n1} & c_{n2} & \cdots & c_{nn} \end{vmatrix}$$

sunt ≥ 0 (respectiv > 0).

6) Mai general, fie f o funcţie definită şi având derivate parţiale de ordinul doi în orice punct al unei mulţimi convexe deschise C din R^n. Atunci f este *convexă* dacă şi numai dacă matricea *hessiană*

$$H(x) = \left[\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(x) \right]$$

este *pozitiv semidefinită*, în fiecare punct $x \in$ C. Dacă $H(x)$ este *pozitiv definită* în orice punct din C, funcţia *f* este *strict convexă*.Într-adevăr să fixăm un $x \in$ C şi un $z \in R^n$ oarecare.Considerăm funcţia de o singură variabilă:

$$g(t) = f(x + tz)$$

definită pentru toţi $t \in$ R cu proprietatea că $x + tz \in$ C (aceşti *t* există cu siguranţă şi deoarece C este o mulţime deschisă, ei formează un interval deschis în R ce conţine 0). Evident, funcţia *f* este convexă dacă şi numai dacă funcţia *g* este convexă, indiferent de alegerea lui $x \in$ C şi a lui $z \in R^n$.Ca şi *f*, *g* este de două ori derivabilă şi

$$g''(t) = z^T \cdot H(x + tz) \cdot z$$

Atunci, *f* este convexă ⇔ (∀) $x \in$ C, (∀) $z \in R^n$ şi (∀) t ∈ R cu $x + tz \in$ C, $g''(t) = z^T \cdot H(x + tz) \cdot z \geq 0$, ⇔ $H(x)$ este pozitiv semidefinită (∀) $x \in$ C etc.

În continuare, vom justifica unele proprietăţi ale programelor convexe anunţate deja în secţiunea precedentă.

Propoziţie Fie $g_1, g_2, ..., g_m$ funcţii convexe definite în toate punctele unei mulţimi convexe C ⊆ R^n. Atunci mulţimea:

$$\mathrm{A} = \{x \in C | g_1(x) \leq 0, g_2(x) \leq 0, ..., g_m(x) \leq 0\}$$

este convexă.

Demonstraţie Deoarece :

$$\mathrm{A} = \{x \in C | g_1(x) \leq 0\} \cap \ldots \cap \{x \in C | g_m(x) \leq 0\}$$

şi o intersecţie de mulţimi convexe este încă o mulţime convexă, va fi suficient să arătăm că dacă *g* este o funcţie convexă pe C atunci mulţimea :

$$\mathrm{A} = \{x \in C | g(x) \leq 0\}$$

este convexă. Fie $x,y \in \mathrm{A}$ şi $\lambda \in [0,1]$; atunci $g(x) \leq 0$, $g(y) \leq 0$ astfel că:

$$g((1-\lambda)x+\lambda y) \le (1-\lambda)g(x)+\lambda g(y) \le 0$$

Prin urmare (1-λ)x + λy ∈ A .

Consecință Mulțimea soluțiilor admisibile ale unui program convex este o mulțime convexă.

Teoremă Considerăm problema de optimizare convexă: $\min\{ f(x) \mid x \in A \}$ în care A este mulțimea *convexă* a soluțiilor *admisibile* iar *f* este o funcție *convexă* pe A . Dacă *f* are în x^* ∈ A un *minim local* atunci x^* este un punct de *minim global* al funcției *f* pe întreg A .

Demonstrație Prin ipoteză, $f(x^*) \le f(x)$ oricare ar fi x ∈ A , *suficient de aproape de* x^*. Presupunem prin absurd că x^* nu este un minim global al funcției *f* : există atunci x^{**}∈ A astfel încât $f(x^{**}) < f(x^*)$. Să considerăm acum un punct interior variabil pe segmentul $[x^*, x^{**}]$:

$$z = (1-\lambda)x^* + \lambda x^{**} \quad \lambda \in (0,1)$$

Deoarece A este convexă, toate aceste puncte sunt în A . Funcția *f* fiind convexă avem:

$$f(z) = f((1-\lambda)x^* + \lambda x^{**}) \le (1-\lambda)f(x^*) + \lambda f(x^{**}) <$$
$$< (1-\lambda)f(x^*) + \lambda f(x^*) = f(x^*)$$

Pentru λ suficient de mic, z se va afla în imediata apropiere a lui x^* și deci, conform ipotezei, $f(z) \ge f(x^*)$, în contradicție cu cele arătate mai sus. Contradicție ! Deci x^* este un minim global al funcției *f*.

§ 6. Optimizare fără restricții

6.1 Introducere Fie *f* o funcție numerică de *n* variabile pe care, pentru simplitate, o presupunem definită și cu derivate parțiale cel puțin de ordinul doi în fiecare punct din R^n. Considerăm problema de optimizare *fără restricții*:

(P) *Să se determine* $x^* \in R^n$ *cu proprietatea*: $f(x^*) = \{\inf f(x) \mid x \in R^n\}$

În legătură cu această problemă, analiza matematică clasică furnizează următorul rezultat fundamental:

Teoremă Dacă x^* este un punct de *extrem local* al funcției *f*, atunci $\nabla f(x^*) = 0$, unde

$$\nabla f(x) = \left[\frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n}\right] \qquad (6.1)$$

este *gradientul funcției f*. Reciproc, dacă $x^* \in R^n$ este un punct în care condiția (1) are loc și în plus matricea *hessiană* $H(x^*)$ este *pozitiv definită,* unde

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

atunci x^* este un punct de *minim local* al funcției f.

Prin urmare, soluția optimă a problemei (P) trebuie căutată printre soluțiile sistemului de n ecuații în n variabile, în general neliniar:

$$\nabla f(x) = 0 \Leftrightarrow \frac{\partial f}{\partial x_1} = 0, \frac{\partial f}{\partial x_2} = 0, \ldots, \frac{\partial f}{\partial x_n} = 0 \tag{6.2}$$

Însă *rezolvarea* sistemului (6.2), cel puțin în sensul uzual al termenului, este practic imposibil de făcut în cvasitotalitatea cazurilor practice. Chiar şi în cazul fericit în care, prin mijloace *analitice* – adică "cu formule" – am putea găsi o soluție a sistemului (6.2) nu avem nici o garanție că aceasta este soluția optimă a problemei (P): ea ar putea fi foarte bine un punct de *maxim local* sau un *punct şa* sau, în cel mai bun caz, un minim local diferit de cel global! Astfel apare necesitatea considerării altor metode de abordare a problemei (P).

6.2 Principiul metodelor de optimizare fără restricții *Ideea comună* a tuturor metodelor de minimizare *nerestricționată* (*liberă*) este următoarea:

- Se generează un şir de puncte x^0, x^1, x^2 … din R^n, numite în continuare *aproximații*. Punctul *inițial* x^0 este *dat*, alegerea sa fiind făcută de *utilizator* în funcție de specificul problemei (P). O dată obținută aproximația x^k, noua aproximație x^{k+1} se determină astfel:

- Se alege o *direcție de deplasare* s^k precum şi un *pas al deplasării* α_k ; s^k este un vector *nenul* din R^n – de regulă $\|s^k\| = 1$; α_k este un scalar *pozitiv*.

- Se pune:

$$x^{k+1} = x^k + \alpha_k \cdot s^k \tag{6.3}$$

În principiu, vectorul s^k este astfel ales încât prin deplasarea din x^k în direcția s^k, să se obțină – cel puțin în prima fază a deplasării – o *descreştere* a valorii funcției de minimizat f. O dată stabilită direcția de deplasare s^k, pasul α_k se alege astfel încât:

$$f(x^{k+1}) < f(x^k)$$

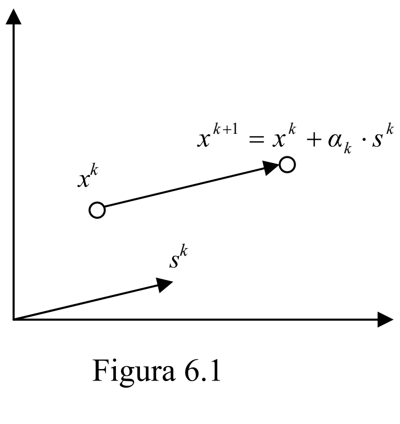


Figura 6.1

Prin urmare:

$$f(x^0) > f(x^1) > f(x^2) > \ldots$$

Mai precis α_k se găseşte prin minimizarea funcției de *o singură variabilă*:

$$g(\alpha) = f(x^k + \alpha s^k) \quad \alpha \ge 0 \tag{6.4}$$

Pentru a obține o metodă *efectivă* de minimizare este necesar să se precizeze:

- modul de alegere a direcției de deplasare s^k, $k = 0,1,2,\ldots$;
- modul de alegere a pasului α_k altfel spus, modul în care se execută minimizarea funcției unidimensionale $g(\alpha)$ din (6.4);
- procedeul de oprire a procesului iterativ.

Decisivă în diferențierea metodelor concrete atât în ceea ce fundamentul teoretic cât şi performanțele numerice este prima chestiune, legată de alegerea direcției de deplasare.

Este foarte important de reținut că dacă funcția de minimizat nu are proprietăți adiționale "bune", cum ar fi aceea de a fi convexă, rezultatul aplicării acestor metode se materializează în cel mai bun caz, într-un minim local – de regulă cel mai apropiat de punctul inițial x^0. În practică, pentru a obține toate minimele locale şi în particular minimul global, se procedează la *repetarea* minimizării din mai multe puncte inițiale, judicios alese.

Marea majoritate a metodelor de minimizare nerestricționată presupun diferențiabilitatea funcției obiectiv ; există totuşi şi scheme de minimizare pentru funcții nediferențiabile!

6.3 Gradientul unei funcții. Proprietăți În ipotezele şi notațiile precedente, o hipersuprafață de nivel a funcției f este mulțimea punctelor $x = (x_1, x_2, ..., x_n) \in R^n$ care satisfac o ecuație de forma: $f(\, x\,) = C$, unde C este o constantă. În cazul a două (respectiv trei) variabile vom vorbi despre curbe (respectiv,suprafețe) de nivel. Astfel pentru funcțiile:

$$a) f(x_1, x_2) = 2x_1 + 3x_2 \ ; b) f(x_1, x_2) = -4x_1 + 2x_2 + x_1^2 + x_2^2$$
$$c) f(x_1, x_2) = 2x_1 - 16x_2 + x_1^2 + 4x_2^2$$

curbele de nivel sunt: a) drepte paralele; b) cercuri concentrice; c) elipse concentrice (vezi fig. 6.2)

Gradientul funcției f este vectorul:

$$\nabla f(x) = \left[\frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}, ..., \frac{\partial f}{\partial x_n} \right]$$

Acesta are următoarele proprietăți:

- În orice punct de extrem local x^* al funcției f avem $\nabla f(x^*) = 0$; reciproca nu este în general adevărată.
- Fie $\bar{x} \in R^n$ un punct în care $\nabla f(\bar{x}) \neq 0$ .Atunci $s = -\nabla f(\bar{x})$ este direcția de deplasare din $\bar{x}$ corespunzătoare celei mai rapide descreşteri afuncției f. Analog, $\nabla f(\bar{x})$ este direcția celei mai rapide creşteri.

Într-adevăr, să considerăm o direcție oarecare $s = (s_1, s_2, \ldots, s_n) \in R^n, s \neq 0$ şi funcția :

$$g(\alpha) = f(\bar{x} + \alpha s) \quad \alpha \geq 0$$

care indică variația funcției f pe direcția de deplasare s din $\bar{x}$.

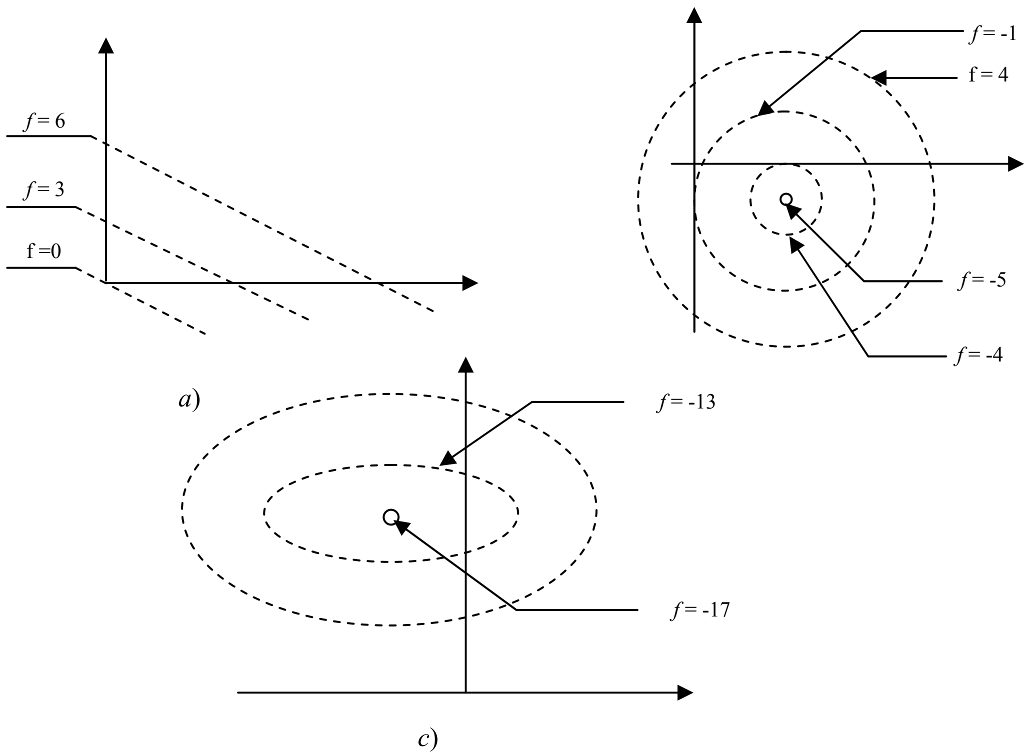


Figura 6.2

După cum se ştie, *variația* (adică *creşterea* sau *descreşterea*) *potențială* sau *incipientă* a funcției f pe direcția s plecând din $\bar{x}$, este dată de derivata $g'(0)$.
În general:

$$g'(\alpha) = \sum_{i=1}^{n} s_i \cdot \frac{\partial f}{\partial x_i}(\bar{x} + \alpha s) = s \cdot \nabla f(\bar{x} + \alpha s)$$

astfel că:

$$g'(0) = s \cdot \nabla f(\bar{x})$$

Din inegalitatea Cauchy – Buniakovski – Schwarz:

$$|s \cdot \nabla f(\bar{x})| \le \|s\| \cdot \|\nabla f(\bar{x})\| \Leftrightarrow -\|s\| \cdot \|\nabla f(\bar{x})\| \le g'(0) \le \|s\| \cdot \|\nabla f(\bar{x})\|$$

rezultă că $g'(0)$ are cea mai mică valoare pentru $s = -\nabla f(\bar{x})$ şi cea mai mare pentru $s = \nabla f(\bar{x})$.

- Dacă $\nabla f(\bar{x}) \neq 0$, atunci acest vector este *perpendicular* pe hipersuprafața de nivel $f(x) = f(\bar{x})$ ce trece prin $\bar{x}$ 9vezi fig. 4.8

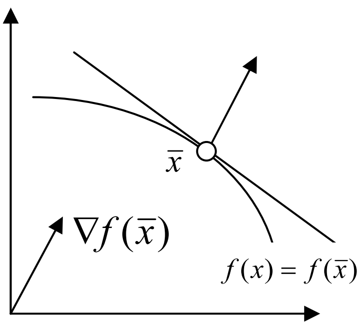


Figura 6.3

Exemplul 6.1 Considerăm funcția *patratică*: $f(x_1, x_2) = 16x_1^2 + (x_2 - 4)^2$
Curbele sale de nivel sunt *elipse* cu centrul în punctul $x^* = (0,4)$ care reprezintă şi punctulde *minim global* al funcției.Gradientul lui *f*:

$$\nabla f(x_1, x_2) = [32x_1, 2x_2 - 8]$$

în punctul $\bar{x} = (1,1)$ este nenul: $\nabla f(\bar{x}) = (32,-6)$. Cea mai rapidă descreştere a funcţiei *f* plecând din $\bar{x}$ are loc pe direcţia $s = -\nabla f(\bar{x}) = (-32,6)$ – vezi fig. 6.4

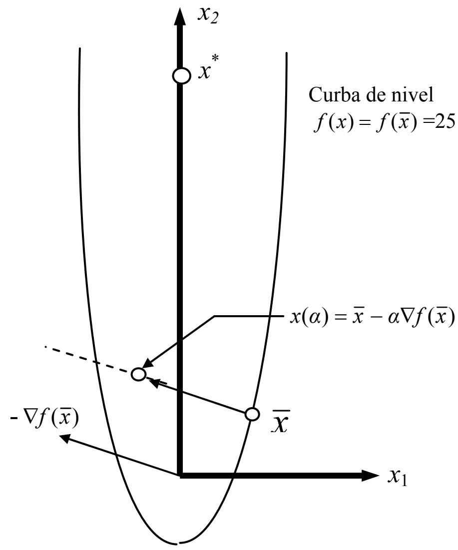
Atenţie: *pe direcţia celei mai rapide descreşteri, funcţia nu descreşte neîncetat*! Pentru ilustrare, în exemplul de mai sus, să considerăm un punct variabil pe direcţia celei mai rapide descreşteri din $\bar{x} = (1,1)$:

$$x(\alpha) = \bar{x} - \alpha\nabla f(\bar{x}) = (1,1) - \alpha(32,-6) = (1-32\alpha, 1+6\alpha) \quad \alpha \geq 0$$

Pe această direcţie, comportarea funcţiei *f* este descrisă de funcţia:

$$g(\alpha) = f(x(\alpha)) = 16(1-32\alpha)^2 + (6\alpha - 3)^2 = 16420\alpha^2 - 1060\alpha + 25$$

a cărei variaţie este arătată în fig.6.5



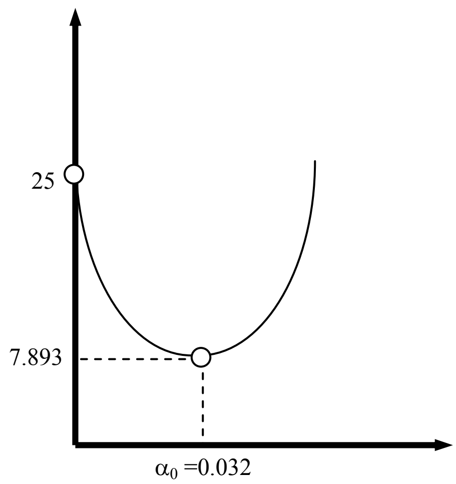


Figura 6.4 Figura 6.5

Se observă că atunci când α creşte de la 0 la 0.032 (= punctul în care $g(\alpha)$ are valoarea minimă), funcţia *g* şi deci şi funcţia *f* scad de la valoarea 25 la valoarea 7.893 după care încep din nou să crească!

6.4 Criterii de oprire ale procesului iterativ de minimizare 1) Deoarece într-un punct de minim local avem $\nabla f(x^*) = 0$, procesul de minimizare se poate opri în momentul în care:

$$a) \left|\frac{\partial f}{\partial x_i}(x^k)\right| < \varepsilon \quad i = 1,2,...,n$$

sau:

$$b) \sum_{i=1}^{n}\left[\frac{\partial f}{\partial x_i}(x^k)\right]^2 < \varepsilon$$

unde ε este un număr pozitiv foarte mic, ca de exemplu $\varepsilon = 10^{-5}$.

3) De multe ori este preferabil să oprim procesul iterativ în momentul în care variaţia funcţiei obiectiv în două aproximaţii succesive nu depăşeşte o toleranţă dată:

$$f(x^k) - f(x^{k+1}) < \varepsilon$$

3) Se poate întâmpla ca, din cauza unei nefericite alegeri a aproximației inițiale x^0 sau a structurii funcției de minimizat, procesul iterativ, deşi convergent, să fie foarte lent. În asemenea situații, timpul de calcul poate atinge valori nepermis de mari. Vom evita acest inconvenient limitând din start numărul iterațiilor posibil de efectuat.

6.5 Minimizarea unei funcții de o singură variabilă În secțiunea introductivă am văzut că toate metodele de minimizare nerestricționată a unei funcții *f de mai multe variabile* necesită minimizarea unei funcții $g(\alpha)$ de *o singură variabilă*.Deoarece minimizarea *unidimensională* se efectuează *la fiecare iterație* a procesului de minimizare *multidimensională* este clar că eficacitatea procesului multidimensional depinde de calitățile procesului unidimensional.

În continuare vom presupune că în prealabil *am localizat* un punct de *minim* x^* al funcției g într-un interval (a,b) *suficient de mic*.

În general, metodele de minimizare unidimensională se bazează pe una din următoarele idei:

- Se aproximează funcția g pe intervalul (a,b) printr-un *polinom de interpolare* de grad *doi* sau *trei* al cărui punct de minim din (a,b) se determină uşor pe baza unei *formule*. Punctul de minim astfel calculat se consideră a fi *o bună aproximare* a punctului de minim x^* căutat.

Construcția polinomului de interpolare se poate face folosind:

- numai evaluări ale funcției g (în câteva puncte);
- evaluări atât ale funcției g cât şi ale derivatei sale.

De exemplu:

- putem construi un polinom de interpolare de gradul *trei* utilizând valorile funcției g şi ale derivatei sale g' în punctele a şi b ce "mărginesc" punctul de minim căutat.
- putem construi un polinom de interpolare de gradul *doi* utilizând valorile funcției g în a şi b precum şi într-un al treilea punct $c \in (a,b)$ – de obicei se ia $c = \frac{1}{2}(a+b)$.

- Se micşorează progresiv intervalul (a,b) la un interval $(\bar{a},\bar{b})$ care de asemenea conține pe x^* şi a cărui lungime este inferioară unei toleranțe date:

$$\bar{b} - \bar{a} < \varepsilon \quad \text{cu } \varepsilon > 0 \text{ număr foarte mic.}$$

Atunci orice punct $\bar{x}$ din $(\bar{a},\bar{b})$ aproximează x^* cu toleranța ε în sensul că:

$$\left|\bar{x} - x^*\right| < \varepsilon$$

Micşorarea intervalului (a,b) se face cu ajutorul evaluării funcției g şi/sau ale derivatei sale într-un număr de puncte din interiorul lui (a,b). Cele mai cunoscute metode de acest fel sunt metoda *bisecției succesive*, metoda *secțiunii de aur* şi metoda *Fibonacci*.

În figura 6.6 este prezentată *schema logică a metodei bisecției succesive* ; justificarea metodei rezultă imediat din situațiile ilustrate în figurile 6.7a) şi 6.7b).

Pentru a înțelege modul de acțiune al metodelor bazate exclusiv pe evaluarea funcției de minimizat în diferite puncte sunt necesare câteva pregătiri.

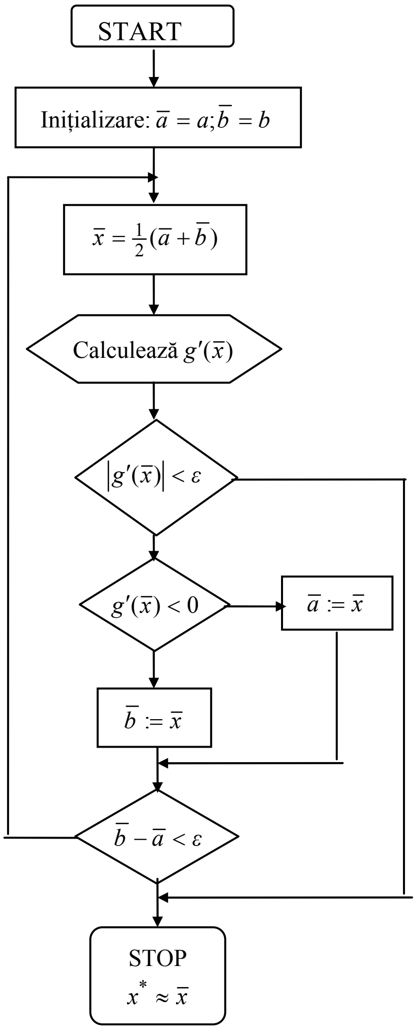


Figura 6.6

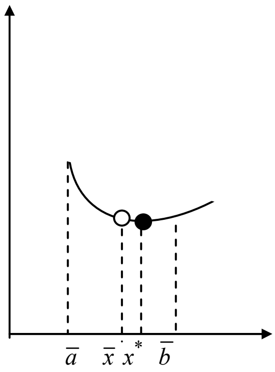


Figura 6.7 a)

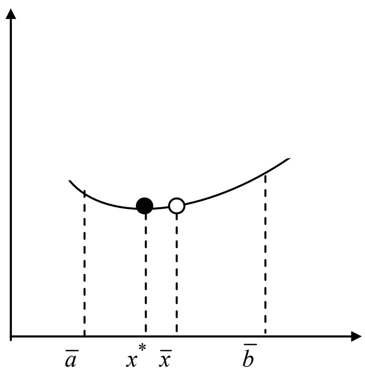


Figura 6.7 b)

Deoarece în intervalul de localizare (*a,b*) am presupus că *f* are un *unic* punct de *minim* x^* (vezi fig. 6.8) urmează că oricare ar fi $x_1 < x_2$ din (*a,b*) :

$f(x_1) > f(x_2)$ dacă $x_1 < x_2 < x^*$

şi

$f(x_1) < f(x_2)$ dacă $x^* < x_1 < x_2$

Alegem două puncte x_S şi x_D în (*a,b*) astfel încât $x_S < x_D$ pe care le vom numi *puncte interioare*. Dacă $f(x_S) \le f(x_D)$,atunci cu necesitate x^* se va afla în intervalul (a, x_D).

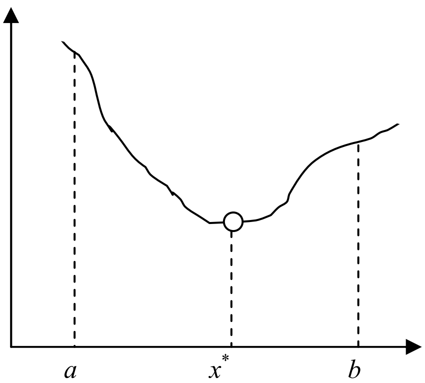


Figura 6.8

Dacă din contră, $f(x_S) > f(x_D)$, atunci cu siguranță x^* va fi în (x_S,b).Cele două situații sunt ilustrate în figurile 6.9a) şi 6.9b).

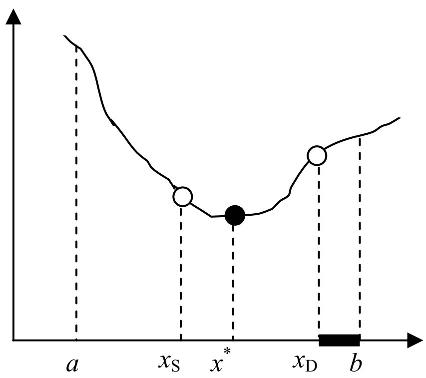


Figura 6.9a)

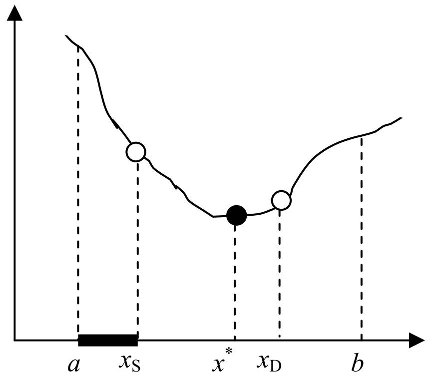


Figura 6.9b)

Observăm că noul interval mai mic conține cu necesitate unul din punctele interioare alese. Dacă în noul interval mai mic alegem încă un punct interior putem repeta considerațiile precedente.

Metodele de minimizare unidimensională bazate pe evaluări multiple se diferențiază prin modul de alegere a celor două puncte interioare x_S şi x_D.

Vom descrie în continuare *metoda secțiunii de aur.* Fie $r = \dfrac{\sqrt{5}-1}{2} = 0.618034$.

START. Inițializăm:

- extremitățile intervalului curent $(\bar{a},\bar{b})$ care conține punctul de minim x^* căutat:

$$\bar{a} \leftarrow a \quad \bar{b} \leftarrow b$$

- punctele interioare:

$$x_S \leftarrow \bar{a} + r^2 \cdot h \qquad x_D = \bar{a} \leftarrow r \cdot h \quad \text{unde:} \quad h \leftarrow \bar{b} - \bar{a}$$

Evaluăm funcția f în x_S şi x_D.

Conținutul unei iterații:

Pasul 1. Se compară $f(x_S)$ cu $f(x_D)$. Dacă:

- $f(x_S) \le f(x_D)$ se merge la pasul 2.
- $f(x_S) > f(x_D)$ se merge la pasul 3.

Pasul 2. (x^* se află în intervalul $(\bar{a}, x_D)$ şi tot aici se găseşte şi x_S)
Actualizăm:

$$\bar{b} \leftarrow x_D \quad ; \quad h \leftarrow \bar{b} - \bar{a}$$

Dacă $h < \varepsilon$ se merge la pasul 4. Altminteri, actualizăm:

$$x_D \leftarrow x_S \quad ; \quad x_S \leftarrow \overline{a} + r^2 \cdot h$$

Evaluăm f în (noul) x_S. Ne întoarcem la pasul 1 în cadrul unei noi iterații.

Pasul 3. (x^* se află în intervalul $(x_S, \overline{b})$ şi tot aici se găseşte şi x_D)
Actualizăm:

$$\overline{a} \leftarrow x_S \quad ; \quad h \leftarrow \overline{b} - \overline{a}$$

Dacă $h < \varepsilon$ se merge la pasul 4. Altminteri, actualizăm:

$$x_S \leftarrow x_D \quad ; \quad x_D \leftarrow \overline{a} + r \cdot h$$

Evaluăm f în (noul) x_D. Ne întoarcem la pasul 1 în cadrul unei noi iterații.

Pasul 4. $x^* \approx \dfrac{\overline{a} + \overline{b}}{2}$.

6.6 Schema logică de principiu a metodelor de optimizare nerestricționată

Considerațiile precedente conduc la schema logică de principiu din fig. 6.10. Elementele esențiale ale blocurilor **P** (alegerea **P**asului deplasării) şi **O** (**O**prirea procesului iterativ) au fost deja discutate în secțiunile 6.4 şi 6.5.În ceea ce priveşte blocul **D** (alegerea **D**irecției de deplasare) acesta diferă de la metodă la metodă. Cea mai simplă metodă de minimizare nerestricționată, datorată lui **Cauchy** va fi prezentată în continuare.

6.7 Metoda gradientului (Cauchy)

La fiecare iterație a algoritmului din fig.6.10 direcția de deplasare este dată de relația:

$$s^k = -\nabla f(x^k)$$

cu condiția ca $\nabla f(x^k) \neq 0$.

Această opțiune se bazează pe faptul că $-\nabla f(x^k)$ este direcția celei mai rapide descreşteri din x^k.

Caracteristic acestei metode este faptul că două direcții de deplasare consecutive sunt perpendiculare! Într-adevăr, dată direcția s^k, lungimea pasului α_k al deplasării se află, aşa cum s-a mai spus, minimizând funcția unidimensională:

$$g(\alpha) = f(x^k + \alpha s^k) \quad , \quad \alpha \geq 0$$

Prin urmare $g'(\alpha_k) = 0$.Am văzut că: $g'(\alpha) = s^k \cdot \nabla f(x^k + \alpha s^k)$ - a se revedea secțiunea 6.3! – aşa încât:

$$g'(\alpha_k) = 0 \Leftrightarrow s^k \cdot \nabla f(x^k + \alpha_k s^k) = 0 \Rightarrow s^k \cdot \nabla f(x^{k+1}) = 0 \Leftrightarrow s^k \cdot s^{k+1} = 0$$

Pentru funcțiile “sferice” de forma:

$$f(x_1, x_2, ..., x_n) = c_0 + \sum_{i=1}^{n} c_i x_i + \sum_{i=1}^{n} x_i^2 = c_0 + cx + \|x\|^2 \quad c = (c_1, c_2, ..., c_n)$$

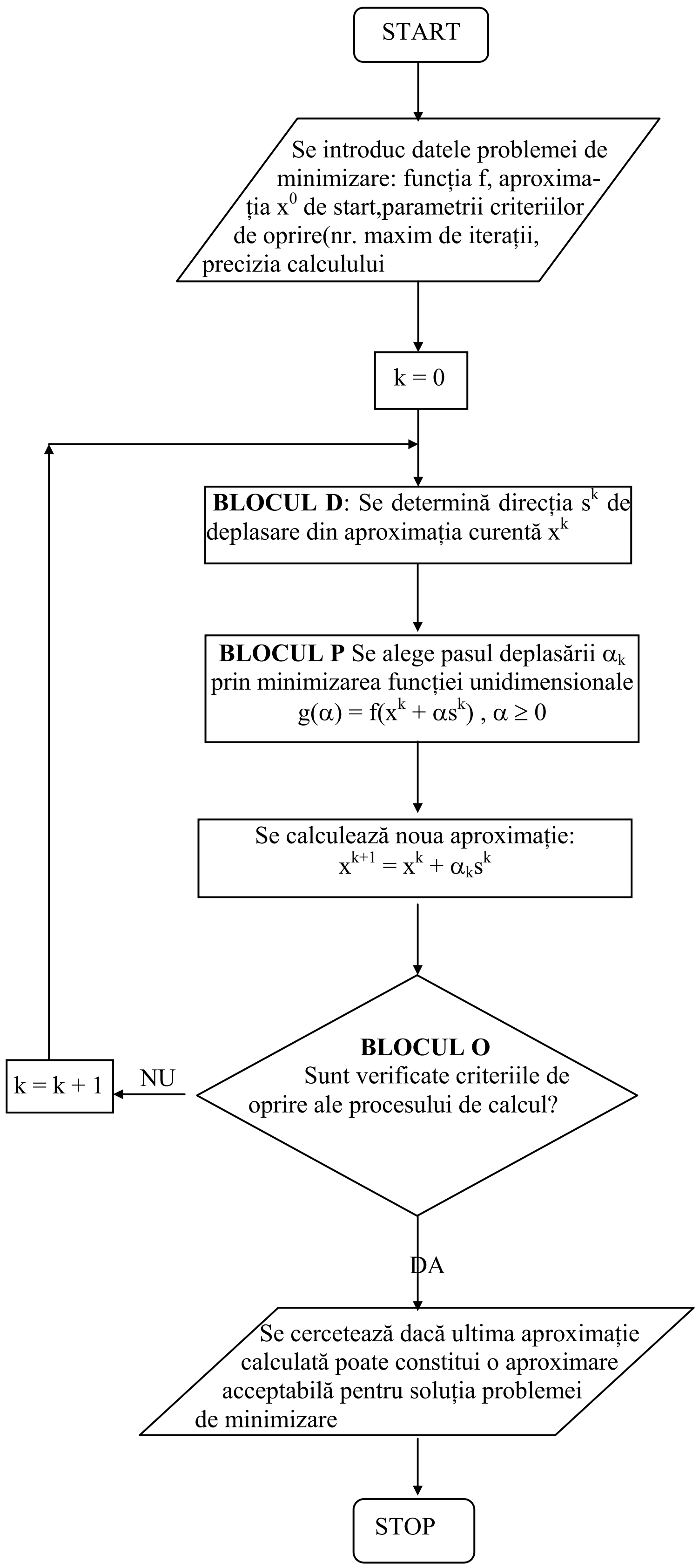

START
Se introduc datele problemei de minimizare: funcția f, aproxima-ția x^0 de start,parametrii criteriilor de oprire(nr. maxim de iterații, precizia calculului
$k = 0$
BLOCUL D: Se determină direcția s^k de deplasare din aproximația curentă x^k
BLOCUL P Se alege pasul deplasării α_k prin minimizarea funcției unidimensionale $g(\alpha) = f(x^k + \alpha s^k)$, $\alpha \geq 0$
Se calculează noua aproximație: $x^{k+1} = x^k + \alpha_k s^k$
BLOCUL O Sunt verificate criteriile de oprire ale procesului de calcul?
NU
$k = k + 1$
DA
Se cercetează dacă ultima aproximație calculată poate constitui o aproximare acceptabilă pentru soluția problemei de minimizare
STOP

Figura 6.10

metoda gradientului oferă punctul de minim (global) într-o singură iterație, indiferent de aproximația inițială x^0 (vezi fig. 6.11a) Pentru orice altă funcție șirul de aproximații:

$$x^0, x^1, x^2, \ldots \text{ pentru care } f(x^0) > f(x^1) > f(x^2) > \ldots$$

conduce în general la un optim local.

Principalul neajuns al metodei gradientului constă în faptul că pașii succesivi sunt perpendiculari fapt care, în cazul anumitor funcții, conduce la o convergență foarte lentă. Mai precis, dacă hipersuprafețele de nivel au o oarecare **"excentricitate"** zig – zagul procesului iterativ amendează convergența,deoarece în acest caz direcția gradientului este mult diferită de direcția către minim (vezi fig. 6.11b)

Există scheme de minimizare mult mai eficiente dintre care cea mai puternică pare a fi metoda **Davidon – Fletcher – Powell** [3]. În principiu,aceste metode garantează obținerea minimului unei funcții patratice de n variabile în cel mult n pași.

Exemplu numeric Vom efectua câteva iterații pentru căutarea minimului funcției:

$$f(x_1, x_2) = -x_2 + x_1^2 - 2x_1x_2 + 2x_2^2$$

cu metoda gradientului. Punctul de plecare $x^0 = (1,1)$

Gradientul funcției:

$$\nabla f = \left[\frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}\right] = \left[2x_1 - 2x_2, -1 - 2x_1 + 4x_2\right]$$

Iterația 1

- $\nabla f(x^0) = [0,1]$
- $s^0 = -\nabla f(x^0) = [0,-1]$
- $x(\alpha) = x^0 + \alpha s^0 = [1,1] + \alpha[0,-1] = [1, 1-\alpha]$, $\alpha > 0$
- $g(\alpha) = f(x(\alpha)) = 2\alpha^2 - \alpha$ are un minim în $\alpha_0 = 1/4$
- $x^1 = x(1/4) = [1,3/4]$

Iterația 2

- $\nabla f(x^1) = [1/2,0]$
- $s^1 = -\nabla f(x^1) = [-1/2,0]$
- $x(\alpha) = x^1 + \alpha s^1 = [1,3/4] + \alpha[-1/2,0] = [1 - \alpha/2, 3/4]$, $\alpha > 0$
- $g(\alpha) = f(x(\alpha)) = \frac{1}{4}\alpha^2 - \frac{1}{4}\alpha - \frac{1}{8}$ are un minim în $\alpha_1 = 1/2$
- $x^2 = x(1/2) = [3/4,3/4]$

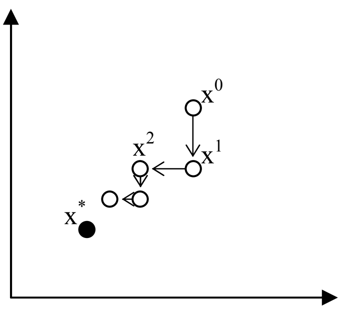
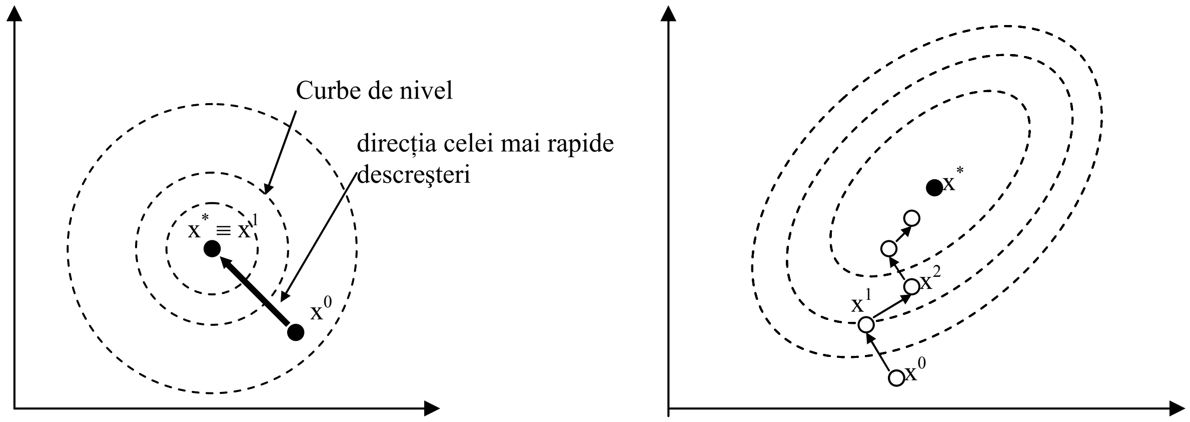


Figura 6.12

Iterația 3

- $\nabla f(x^2) = [0,1/2]$
- $s^2 = -\nabla f(x^2) = [0,-1/2]$
- $x(\alpha) = x^2 + \alpha s^2 = [3/4,3/4] + \alpha[0,-1/2] = [\frac{3}{4}, \frac{3}{4} - \frac{1}{2}\alpha]$, $\alpha > 0$
- $g(\alpha) = f(x(\alpha)) = \frac{1}{2}\alpha^2 - \frac{1}{4}\alpha - \frac{3}{16}$ are un minim în $\alpha_2 = 1/4$
- $x^3 = x(1/4) = [3/4,5/8]$

La iterația 4 se obține [5/8,5/8] ş.a.m.d. Funcția dată este convexă (exercițiu!) având un minim în $x^* = [1/2,1/2]$. În figura 6.12 se poate constata apropierea "în zig – zag" a punctelor x^0 , x^1 , x^3 … de x^*.



a) Cazul funcțiilor sferice

b) Cazul funcțiilor nesferice

Figura 6.11

§ 7. Optimizarea neliniară fără restricții. Cazul convex

Reluăm problema de optimizare generală sub forma:

(P) Să se determine $x^* \in A \subseteq R^n$ cu proprietatea: $f(x^*) = \inf \{f(x) , x \in A\}$

unde A ,numită și mulțimea soluțiilor admisibile ale problemei (P) este definită de o mulțime de restricții:

$$g_i(x) \leq 0 \qquad i \in M = \{1,2,...,m\}$$

Pentru simplificarea expunerii, eventualele condiții de nenegativitate $x_j \geq 0$ au fost incluse în blocul restricțiilor sub forma: $-x_j \leq 0$.
Presupunem că funcțiile f și g_1 , g_2 ,..., g_m sunt definite în întreg spațiul R^n, sunt **convexe** și **diferențiabile** și cel puțin una dintre ele este **neliniară**, altminteri (P) ar fi un program liniar.Astfel, (P) este o problemă de programare convexă.
Reamintim că în acest context:

- A este o mulțime **convexă** și **închisă**;
- orice **minim local** al funcției f pe mulțimea A este un **minim global**.

(vezi secțiunea 5)

Metodele de optimizare cu restricții se împart în trei categorii:

1) Metode bazate pe adaptarea schemei generale de optimizare nerestricționată la cazul prezenței restricțiilor; aceste metode poartă numele generic de **metode de gradient**.

2) Metode bazate pe utilizarea **funcțiilor de penalizare** : rezolvarea problemei (P) se reduce la o suită (teoretic infinită) de optimizări nerestricționate.

3) Metode bazate pe **plane de secțiune**; în principiu,aceste metode "aproximează" A printr-o mulțime **poliedrală** adică printr-o mulțime ce poate fi descrisă printr-un sistem de **inegalități liniare**; rezolvarea problemei (P) se reduce la o secvență (infinită) de **optimizări liniare** efectuate cu ajutorul **algoritmului simplex.**

7.1 Principiul metodelor de gradient

Aplicarea schemei generale de minimizare nerestricționată trebuie să țină seama de următoarele aspecte:

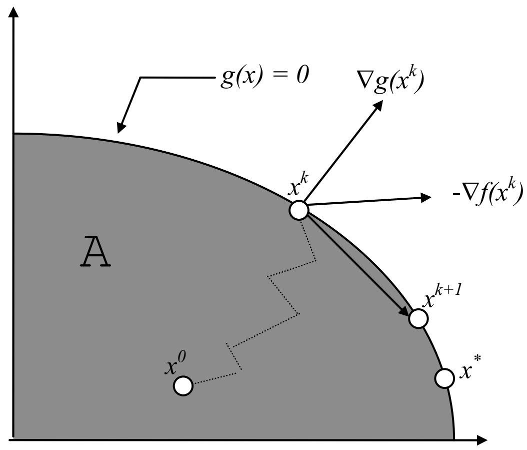


Figura 7.1

- de regulă soluția optimă x^* a problemei (P) se găseşte pe **frontiera** lui A , adică satisface **cu egalitate** cel puțin una din restricțiile $g_i(x) \le 0,\ i \in M$.
- chiar dacă se pleacă de la un punct inițial x^0 situat în **interiorul** lui A ($\Leftrightarrow g_i(x) < 0, i \in M$) se ajunge relativ repede la un punct x^k situat chiar pe frontieră altfel spus care satisface cu egalitate o parte din restrițiile problemei (P):

$$g_i(x^k) = 0\ ,\ i \in I \subset M$$

Într-o atare situație, direcția celei mai rapide descreşteri $-\nabla f(x^k)$ s-ar putea să nu mai fie admisibilă adică:

$$x(\alpha) = x^k - \alpha \nabla f(x^k) \notin A \quad (\forall)\alpha > 0$$

(vezi fig. 7.1)

Introducem următoarea terminologie:

- o direcție s ($s \in R^n$, $s \neq 0$) se va numi **admisibilă** relativ la punctul curent x^{k+1} dacă o deplasare suficient de mică din x^k pe direcția s ne menține în A ;
- direcția s se va numi **utilizabilă** dacă deplasarea din x^k pe direcția s duce la scăderea valorii funcției obiectiv.

Se poate arăta că o direcție s este admisibilă şi utilizabilă relativ la punctul curent x^k dacă şi numai dacă s satisface condițiile:

$$\begin{cases} s \cdot \nabla g_i(x^k) < 0 & i \in I \\ s \cdot \nabla f(x^k) < 0 \end{cases} \tag{7.1}$$

O dată stabilită direcția de deplasare s^k din x^k - direcție care verifică condițiile (7.1) - pasul α_k se alege astfel încât noua aproximație :

$$x^{k+1} = x^k + \alpha_k s^k$$

să aibe proprietățile:

$x^{k+1} \in A \ (\Leftrightarrow g_i(x^{k+1}) \le 0,\ i \in M)$ şi $f(x^{k+1}) < f(x^k)$

Cu acest amendament - legat de modul de alegere a direcției de deplasare - schema generală de minimizare nerestricționată funcționează şi în cazul prezenței restricțiilor.

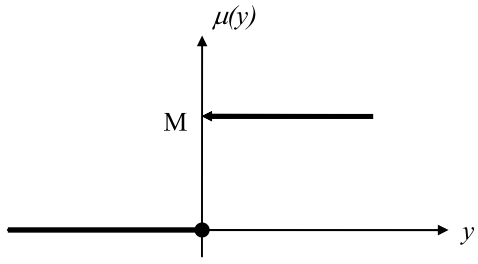


Figura 7.2

7.2 Principiul metodelor bazate pe funcții de penalizare

În esență, aceste metode încorporează restricțiile problemei (P0 în funcția obiectiv prin intermediul unei funcții care **penalizează nerespectarea** lor.
Pentru ilustrare să considerăm funcția:

$$\mu(y) = \begin{cases} 0 \ \text{daca} \ y \le 0 \\ M \ \text{daca} \ y > 0 \end{cases} \quad \text{unde } M >> 0$$

al cărei grafic este dat în fig 7.2. Considerăm problema de minimizare fără restricții:

$$(P')\begin{cases} \inf F(x) = f(x) + \sum\limits_{i \in M} \mu(g_i(x)) \\ x \in R^n \end{cases}$$

Evident:

$$\varphi(y) = \begin{cases} 0 \ \text{daca} \ y \le 0 \\ y^2 \ \text{daca} \ y > 0 \end{cases}$$

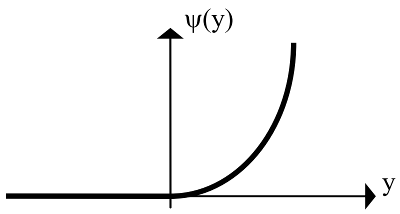


Figura 7.3

$$F(x) = \begin{cases} f(x) \ \text{daca} \ x \in A \\ M \ \text{daca} \ x \notin A \end{cases}$$

În consecință,orice procedeu de minimizare a funcției F se va orienta către punctele mulțimii A şi deci va minimiza funcția originală *f*. Dificultatea majoră rezidă în faptul că funcția de penalizare μ are o **discontinuitate** în 0 care atrage după sine discontinuitatea funcției F pe frontiera lui A ! Cum de regulă punctul de optim x^* se află pe frontieră, metodele de minimizare bazate pe gradient nu sunt aplicabile deoarece gradientul funcției F nu este definit pe frontiera lui A .

Totuşi ideea de a adăuga un termen la expresia funcției f care să penalizeze o eventuală "ieşire" din A şi de a minimiza "liber" funcția rezultată poate fi salvată utilizând în locul funcției μ o funcție mai puțin "rigidă" care să aibe proprietățile de regularitate (continuitate, diferențiabilitate) reclamate de utilizarea metodelor de gradient. Un exemplu ar putea fi funcția:

cu ajutorul căreia construim problema de minimizare fără restricții

$$(P')\begin{cases}\inf F(x) = f(x) + \sum\limits_{i \in M} \varphi(g_i(x)) \\ x \in R^n\end{cases}$$

Acum,penalizarea pentru ieşirea în afara mulţimii A nu mai este "infinită" astfel că soluţia optimă a problemei (P') ar putea să nu fie în A , altfel spus ar putea încălca unele restricţii.Pentru a diminua aceste încălcări amplificăm efectul penalizării înmulţind termenul de penalizare cu o constantă r > 0 suficient de mare. (P') devine:

$$(P'')\begin{cases}\inf F(x) = f(x) + r \sum\limits_{i \in M} \varphi(g_i(x)) \\ x \in R^n\end{cases}$$

Introducerea multiplicatorului r măreşte excentricitatea hipersuprafeţelor de nivel ale funcţiei F; or, este ştiut că excentricitatea pronunţată influenţează negativ viteza de convergenţă a tuturor algoritmilor de minimizare nerestricţionată.

Dificultăţile semnalate au condus la următoarea schemă de lucru. În locul rezolvării unei singure probleme de minimizare fără restricţii se va rezolva o secvenţă de asemenea probleme. Concret, se începe rezolvarea problemei (P'') cu o constantă r_0 nu prea mare; fie x^0 soluţia optimă. Dacă $x^0 \notin A$ se reia (P'') cu un multiplicator $r_1 > r_0$ utilizând x^0 ca aproximaţie iniţială. Fie x^1 noua soluţie optimă. Dacă nici $x^1 \notin A$ schimbăm r_1 cu $r_2 > r_1$ etc. Se poate arăta că dacă $r_k \to \infty$ atunci şirul x^0 , x^1 , x^2 ...converge către soluţia optimă a problemei cu restricţii (P).

Să observăm că soluţiile intermediare x^0 , x^1 , x^2 ... nu sunt admisibile şi din acest punct de vedere metoda descrisă seamănă cu algoritmul simplex dual din programarea liniară. Acest fapt poate fi un serios dezavantaj deoarece dacă pentru anumite restricţii nu sunt permise nici cele mai mici încălcări atunci nici o soluţie intermediară nu poate fi reţinută în caz de oprire a procesului iterativ.

§8 Condiţiile de optimalitate Kuhn - Tucker în programarea convexă

8.1 Formularea condiţiilor

Considerăm un **program convex** (P) pe care îl presupunem adus la următoarea formă zisă **canonică:**

$$(P)\begin{cases}\text{Să se determine } x^* \in R^n \text{ cu proprietatea:} \\ \quad f(x^*) = \mathbf{min}\ f(x) \\ \text{minimul fiind luat după toţi } x \in R^n \text{ care satisfac restricţiile:} \\ \quad g_i(x) \le 0 \quad i = 1,...,m \\ \text{şi condiţiile de nenegativitate:} \\ \quad x \ge 0 \Leftrightarrow x_j \ge 0 \quad j = 1,...,n\end{cases}$$

Pentru simplitatea expunerii vom presupune că funcţiile convexe f şi g_1 , g_2 ,..., g_m sunt definite şi diferenţiabile în întreg spaţiul R^n.

Asociem fiecărei restricţii $g_i(x) \leq 0$ o variabilă nenegativă u_i şi construim funcţia:

$$L(x,u) = L(x_1,\ldots,x_n;u_1,\ldots,u_m) = f(x) + \sum_{i=1}^{m} u_i g_i(x)$$

Funcţia L se numeşte **lagrangianul** problemei (P) iar u_1 , ... ,u_m se numesc **multiplicatori Lagrange**. Se observă imediat că pentru $x \in R^n$ fixat L este o funcţie liniară în u_1 ,..., u_m iar pentru $u \geq 0$ fixat în R^m, L este o funcţie convexă şi diferenţiabilă.

Vom presupune îndeplinită următoarea condiţie, numită **condiţia de regularitate Slater**:

Există $\bar{x} \in R^n$ cu proprietatea că $g_i(\bar{x}) < 0 \quad i = 1,\ldots,m$ şi $\bar{x}_j > 0 \quad j = 1,\ldots,n$ altfel spus, mulţimea soluţiilor admisibile $A = \{ x \in R^n | \; g_i(x) \leq 0 , x \geq 0\}$ are **interiorul relativ nevid**.

Cu aceste pregătiri putem enunţa următoarea:

Teoremă (Kuhn - Tucker) Condiţia necesară şi suficientă ca $x^* \in R^n$ să fie o soluţie optimă a problemei (P) este să existe $u^* \in R^m$ astfel încât cuplul (x^*,u^*) să verifice relaţiile:

$\frac{\partial L}{\partial x_j} \geq 0 \quad (1_j)$	$x_j \frac{\partial L}{\partial x_j} = 0 \quad (1'_j)$	
$\frac{\partial L}{\partial u_i} \leq 0 \quad (2_i)$	$u_i \frac{\partial L}{\partial u_i} = 0 \quad (2'_i)$	$i = 1,\ldots,m$ $j = 1,\ldots,n$
$x_j \geq 0 \quad (3)$	$u_i \geq 0 \quad (3')$	

Condiţiile încadrate sunt cunoscute sub numele de **condiţiile de optimalitate Kuhn - Tucker**.

Deşi este un rezultat de factură pur teoretică, teorema de mai sus este la baza multor algoritmi eficienţi de rezolvare a programelor neliniare convexe cum sunt, de exemplu, cei utilizaţi în programarea patratică.

Observaţie : Condiţia de regularitate Slater intervine în probarea suficienţei condiţiilor de optimalitate K- T. Ea nu mai este necesară în cazul în care restricţiile programului (P) sunt liniare.

Exemplul 8.1 Considerăm programul neliniar patratic:

$$(P)\begin{cases} \max 2x_1 + x_2 - x_1^2 \\ x_1 + x_2 \leq 3 \\ 3x_1 - 2x_2 \leq 6 \\ x_1 \geq 0, x_2 \geq 0 \end{cases}$$

a cărui formă canonică este:

$$(P)\begin{cases} (\min) f = -2x_1 - x_2 + x_1^2 \\ x_1 + x_2 - 3 \leq 0 \\ 3x_1 - 2x_2 - 6 \leq 0 \\ x_1 \geq 0, x_2 \geq 0 \end{cases}$$

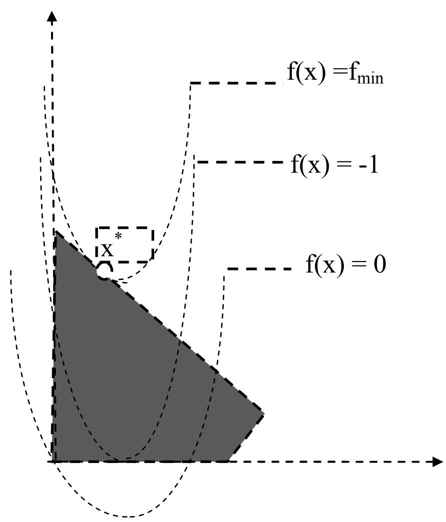


Figura 8.1

Fig. 8.1 confirmă faptul că (P) este un program convex: mulţimea soluţiilor admisibile este convexă, chiar poliedrală fiind definită prin inecuaţii liniare iar curbele de nivel f(x) = c(onstant) sunt parabole cu axa de simetrie comună x = 1. Desenul sugerează că soluţia optimă x^* satisface cu egalitate restricţia $x_1 + x_2 \leq 3$ şi cu inegalitate strictă cealaltă restricţie şi condiţiile de nenegativitate.Aceste concluzii "calitative" şi condiţiile de optimalitate K - T ne vor permite să determinăm punctul x^*.

Asociem celor două restricţii variabilele nenegative u_1 şi u_2 şi construim lagrangianul:

$$L = -2x_1 - x_2 + x_1^2 + u_1(x_1 + x_2 - 3) + u_2(3x_1 - 2x_2 - 6)$$

Scriem condiţiile de optimalitate K - T:

$\frac{\partial L}{\partial x_1} \geq 0 \leftrightarrow -2+2x_1+u_1+3u_2 \geq 0 \; (1.1)$ $\frac{\partial L}{\partial x_2} \geq 0 \leftrightarrow \quad -1+u_1-2u_2 \geq 0 \; (1.2)$	$x_1 \frac{\partial L}{\partial x_1} = 0 \leftrightarrow x_1(-2+2x_1+u_1+3u_2) = 0 \; (1.!')$ $x_2 \frac{\partial L}{\partial x_2} = 0 \leftrightarrow \quad x_2(-1+u_1-2u_2) = 0 \; (1.2')$
$\frac{\partial L}{\partial u_1} \leq \quad 0 \leftrightarrow x_1+x_2-3 \leq 0 \; (2.1)$ $\frac{\partial L}{\partial u_2} \leq 0 \leftrightarrow 3x_1-2x_2-6 \leq 0 \; (2.2)$	$u_1 \frac{\partial L}{\partial u_1} = 0 \leftrightarrow \quad u_1(x_1+x_2-3) = 0 \; (2.1')$ $u_2 \frac{\partial L}{\partial u_2} = 0 \leftrightarrow u_2(3x_1-2x_2-6) = 0 \; (2.2')$
$x_1, x_2 \geq 0 \quad (3)$	$u_1, u_2 \geq 0 \quad (3')$

Reamintim interpretarea acestor condiţii: $x^\bullet = (x_1^\bullet, x_2^\bullet)$ este soluţia optimă a programului (P) dacă şi numai dacă există $u^\bullet = (u_1^\bullet, u_2^\bullet)$ astfel încât cuplul $(x^\bullet, u^\bullet)$ să satisfacă relaţiile mai sus scrise.
Deoarece la optim avem: $x_1 > 0$, $x_2 > 0$ şi $3x_1 - 2x_2 < 6$ din relaţiile (1.1') , (1.2') şi (2.2') obţinem:
$-2 + 2x_1 + u_1 + 3u_2 = 0$, $-1 + u_1 - 2u_2 = 0$ şi $u_2 = 0$ care împreună cu $x_1 + x_2 = 3$ constituie un sistem de patru ecuaţii cu patru variabile x_1 , x_2 , u_1 , u_2. Rezultă uşor:

$$x^\bullet = (\tfrac{1}{2}, \tfrac{5}{2}) \quad , \quad u^\bullet = (1,0) \text{ de unde } (min)f = -\tfrac{13}{4} .$$

8.2 Condiţiile Kuhn - Tucker în programarea liniară

Evident, orice program liniar este un program convex şi ca urmare teorema de optimalitate Kuhn - Tucker funcţionează şi pentru programele liniare. După cum vom vedea , în acest caz teorema amintită se suprapune peste un rezultat fundamental al dualităţii liniare.

Să considerăm un program liniar în **formă canonică de maximizare** (în notaţiile uzuale):

$$(P)\begin{cases} \sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_j \leq b_i \quad i = 1,\dots,m \\ x_j \geq 0 \quad j = 1,\dots,n \\ (max)f = \sum_{j=1}^{n} c_j x_j \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} Ax \leq b \\ x \geq 0 \\ (max)f = cx \end{cases}$$

Rescriem (P) în forma canonică în care am studiat programele convexe şi asociem celor m restricţii variabilele u_1 , u_2 ,..., u_m:

$$\begin{cases} \sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_j - b_i \leq 0 \rightarrow u_i \quad i = 1,\dots,m \\ x_j \geq 0 \\ (min) - f = -\sum_{j=1}^{n} c_j x_j \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} Ax - b \leq 0 \rightarrow u = (u_1,\dots,u_m) \\ x \geq 0 \\ (min) - f = -cx \end{cases}$$

Lagrangianul problemei (P) are expresia:

$$L(x_1,\dots,x_n;u_1,\dots,u_m) = -\sum_{j=1}^{n} c_j x_j + \sum_{i=1}^{m} u_i(\sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_j - b_i) = -\sum_{i=1}^{m} u_i b_i + \sum_{j=1}^{n}(\sum_{i=1}^{m} u_i a_{ij} - c_j)x_j \quad \Leftrightarrow$$

$$L(x,u) = -cx + u(Ax-b) = -ub + (uA-c)x$$

Condițiile de optimalitate K - T:

$\frac{\partial L}{\partial x_j} \geq 0 \leftrightarrow \sum_{i=1}^{m} u_i a_{ij} - c_j \geq 0 \quad (1_j)$	$x_j \frac{\partial L}{\partial x_j} = 0 \leftrightarrow (\sum_{i=1}^{m} u_i a_{ij} - c_j)x_j = 0 \quad (1'_j)$
$\frac{\partial L}{\partial u_i} \leq 0 \leftrightarrow \sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_j - b_i \leq 0 \quad (2_i)$	$u_i \frac{\partial L}{\partial u_i} = 0 \leftrightarrow u_i(\sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_j - b_i) = 0 \quad (2'_i)$
$x_j \geq 0 \quad (3)$	$u_i \geq 0 \quad (3')$

se interpretează astfel:

$x^\bullet = (x_1^\bullet, x_2^\bullet, \dots, x_n^\bullet) \in R^n$ este o soluție optimă a programului (P) dacă şi numai dacă există $u^\bullet = (u_1^\bullet, u_2^\bullet, \dots, u_m^\bullet) \in R^m$ astfel încât cuplul $(x^\bullet, u^\bullet)$ să verifice relațiile mai sus scrise.

Observăm că relațiile (2_i) i = 1,...,m şi (3) definesc x^* ca soluție admisibilă a problemei (P) în timp ce relațiile (1_j) j = 1,...,n şi (3') definesc u^* ca soluție admisibilă a **problemei duale**:

$$(Q)\begin{cases} \sum_{i=1}^{m} u_i a_{ij} \geq c_j & j = 1,\dots,n \\ u_i \geq 0 & i = 1,\dots,m \\ (min) g = \sum_{i=1}^{m} u_i b_i \end{cases} \quad \Leftrightarrow \quad \begin{cases} uA \geq c \\ u \geq 0 \\ (min) g = ub \end{cases}$$

Obținem următoarea reformulare a relațiilor K - T:

Condiția necesară şi suficientă ca soluția admisibilă $x^\bullet = (x_1^\bullet, x_2^\bullet, \dots, x_n^\bullet)$ a problemei (P) să fie o soluție optimă este să existe o soluție admisibilă $u^\bullet = (u_1^\bullet, u_2^\bullet, \dots, u_m^\bullet)$ a problemei duale (Q) astfel încât cuplul (x^*, u^*) să verifice relațiile:

$$\begin{cases} (\sum_{i=1}^{m} u_i a_{ij} - c_j)x_j = 0 \quad j = 1,\dots,n \quad \Leftrightarrow \quad (uA-c)x = 0 \\ u_i(\sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_j - b_i) = 0 \quad i = 1,\dots,m \quad \Leftrightarrow \quad u(Ax-b) = 0 \end{cases}$$

Am regăsit **teorema ecarturilor complementare** din teoria dualității liniare.

8.3 Condițiile de optimalitate Kuhn - Tucker în programarea patratică

Considerăm problema de programare patratică:

$$(P)\begin{cases}(min)f = px + \tfrac{1}{2}x^T Cx \\ Ax \le b \\ x \ge 0\end{cases}$$

în care:

$$p = [\,p_1, p_2, \dots, p_n\,] \quad x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \quad C = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & \cdots & c_{1n} \\ c_{21} & c_{22} & \cdots & c_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ c_{n1} & c_{n2} & \cdots & c_{nn} \end{bmatrix} = \text{matrice simetrică}$$

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix} \quad b = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{bmatrix}$$

Vom presupune că matricea C este **pozitiv semidefinită** ; ştim atunci că funcția patratică f este convexă şi ca urmare, programul (P) este convex.

Asociem blocului de restricții Ax - b ≤ b vectorul (linie) de multiplicatori Lagrange $u = [u_1, u_2, ..., u_m]$ şi construim lagrangianul problemei (P):

$$L(x,u) = px + \tfrac{1}{2}x^T Cx + u(Ax - b)$$

În scriere matricială, condițiile de optimalitate K - T pentru programul (P) arată astfel:

$\nabla_x L \ge 0 \Leftrightarrow p + x^T C + uA \ge 0 \quad (1)$	$(\nabla_x L)\cdot x = 0 \Leftrightarrow (p + x^T C + uA)x = 0 \quad (1')$
$\nabla_u L \le 0 \Leftrightarrow Ax - b \le 0 \quad (2)$	$u\cdot(\nabla_u L) = 0 \Leftrightarrow u(Ax - b) = 0 \quad (2')$
$x \ge 0 \quad (3)$	$u \ge 0 \quad (3')$

Transformăm inegalitățile (1) şi (2) în egalități introducând vectorii de variabile de abatere:

$$v = [v_1, v_2, \dots, v_n] \underset{def}{=} p + x^T C + uA \ge 0 \text{ şi } y = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_m \end{bmatrix} \underset{def}{=} b - Ax \ge 0$$

Atunci:

$$x^T C + uA - v = -p \text{ şi } Ax + y = b$$

Se vede uşor că:

$$(1') \Leftrightarrow v\cdot x = 0 \Leftrightarrow v_j x_j = 0 \quad j = 1,\dots,n$$

$$(2') \Leftrightarrow u\cdot y = 0 \Leftrightarrow u_i y_i = 0 \quad i = 1,\dots,m$$

Cu aceste pregătiri putem formula următoarea interpretare a relațiilor K - T:

Condiția necesară şi suficientă pentru ca $x^* \in R^n$ să rezolve programul patratic (P) este să existe $u^\bullet \in R^m, v^\bullet \in R^n, y^\bullet \in R^m$ astfel încât $(x^\bullet, u^\bullet, v^\bullet, y^\bullet)$ să verifice relațiile:

$$\begin{cases} x^T C + uA - v & = -p \\ Ax \quad\quad + y = & b \end{cases} \quad (4) \quad \Leftrightarrow \quad \begin{cases} \sum_{k=1}^{n} c_{kj} x_k + \sum_{i=1}^{m} a_{ij} u_i - v_j = -p_j & j = 1,\dots,n \\ \sum_{k=1}^{n} a_{ik} x_k \quad\quad + y_i = b_i & i = 1,\dots,m \end{cases}$$

$$x \ge 0,\ u \ge 0,\ v \ge 0,\ y \ge 0 \quad \Leftrightarrow \quad x_k \ge 0,\ u_i \ge 0,\ v_j \ge 0,\ y_i \ge 0$$

$$v \cdot x = 0 \ ; \ u \cdot y = 0 \quad (5) \quad \Leftrightarrow \quad v_j x_j = 0 \ \ j = 1,\dots,n \ ; \ u_i y_i = 0 \ \ i = 1,\dots,m$$

Se observă că (4) este un sistem liniar cu m + n ecuații şi 2m + 2n variabile. În concluzie:

Rezolvarea programului patratic (P) s-a redus la determinarea unei soluții admisibile (adică nenegative) a sistemului liniar (4) care să verifice relațiile de complementaritate (5).

În principiu, aceasta se poate face cu ajutorul algoritmului simplex în felul următor:

- se înmulțesc cu -1 acele egalități din (4) ai căror termeni liberi sunt < 0;

- dacă, după efectuarea operației precedente, matricea sistemului (4) nu conține o submatrice unitate de ordinul m + n, ea se completează cu coloanele care lipsesc adăugând - acolo unde este cazul - variabile artificiale nenegative.Astfel, sistemul (4) devine:

$$\begin{cases} x^T C + uA - v \quad + z^1 & = -p \\ Ax \quad + y \quad + z^2 & = b \end{cases}$$

unde:

$$z^1 = (z_1^1, z_2^1, \dots, z_n^1) \ge 0 \ \text{ cu } \ z_j^1 = 0 \ \text{ daca } \ p_j \ge 0 \ \text{ şi } \ z^2 = \begin{bmatrix} z_1^2 \\ z_2^2 \\ \vdots \\ z_m^2 \end{bmatrix} \ge 0 \ \text{ cu } \ z_i^2 = 0 \ \text{ daca } \ b_i \ge 0$$

- se rezolvă programul liniar:

$$\begin{cases} x^T C + uA - v \quad + z^1 & = -p \\ Ax \quad + y \quad + z^2 & = b \\ x \ge 0, u \ge 0, v \ge 0, y \ge 0, z^1 \ge 0, z^2 \ge 0 \\ (min) w = \sum_{j=1}^{n} z_j^1 + \sum_{i=1}^{m} z_i^2 \end{cases}$$

cu ajutorul algoritmului simplex, modificat cu următoarea regulă suplimentară care se referă la criteriul de intrare în bază:

La fiecare iterație, noua variabilă bazică va fi astfel aleasă încât:

- variabilele v_j şi x_j să nu fie simultan bazice j=1,...,n;
- variabilele u_i şi y_i să nu fie simultan bazice i=1,...,m.

La start se va pleca cu soluția:

$$x = 0\ ,\ u = 0$$

$$v_j = \begin{cases} p_j & \text{daca } p_j \ge 0 \\ 0 & \text{daca } p_j < 0 \to z_j^1 = -p_j \end{cases} \quad , \quad y_i = \begin{cases} b_i & \text{daca } b_i \ge 0 \\ 0 & \text{daca } b_i < 0 \to z_i^2 = -b_i \end{cases}$$

Deoarece $x = 0\ ,\ u = 0$,relațiile de complementaritate (5) sunt verificate. Regula suplimentară ne asigură că la fiecare iterație:

$$v_j = 0 \quad \text{sau} \quad x_j = 0 \quad \text{deci} \quad v_j x_j = 0 \quad j = 1,...,n$$

$$u_i = 0 \quad \text{sau} \quad y_i = 0 \quad \text{deci} \quad u_i y_i = 0 \quad i = 1,...,m$$

Se poate arăta că dacă programul (P) este compatibil atunci într-un număr finit de iterații se ajunge la o soluție în care (min)w = 0 $\Leftrightarrow$ toate variabilele artificiale introduse au valoarea zero. Este clar atunci că s-a obținut o soluție admisibilă a sistemului (4) care satisface relațiile de complementaritate (5). Componenta x^* a acestei soluții constituie soluția optimă a programului patratic (P).

Observație Considerațiile de mai sus constituie o descriere de principiu a algoritmului lui **Wolfe** pentru rezolvarea programelor patratice convexe.

Exemplu numeric Vom arăta cum se aplică efectiv condițiile de optimalitate K - T și algoritmul simplex la rezolvarea programului patratic:

$$(P)\begin{cases} (min)f = -15x_1 - 30x_2 - 4x_1x_2 + 2x_1^2 + 4x_2^2 \\ x_1 + 2x_2 \le 30 \\ x_1 \ge 0, x_2 \ge 0 \end{cases}$$

Scriem matricial funcția obiectiv:

$$f(x_1,x_2) = [-15,-30]\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} + \tfrac{1}{2}[x_1,x_2]\begin{bmatrix} 4 & -4 \\ -4 & 8 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$$

Matricea simetrică $C = \begin{bmatrix} 4 & -4 \\ -4 & 8 \end{bmatrix}$ este chiar pozitiv definită astfel că f este o funcție strict convexă.

Lagrangianul problemei:

$$L(x_1,x_2) = -15x_1 - 33x_2 - 4x_1x_2 + 2x_1^2 + 4x_2^2 + u(x_1 + 2x_2 - 30)$$

Condițiile de optimalitate K - T:

$\frac{\partial L}{\partial x_1} = -15 - 4x_2 + 4x_1 + u \ge 0$ $\frac{\partial L}{\partial x_2} = -30 - 4x_1 + 8x_2 + 2u \ge 0$	$x_1 \frac{\partial L}{\partial x_1} = 0 \Leftrightarrow x_1(-15 - 4x_2 + 4x_1 + u) = 0$ $x_2 \frac{\partial L}{\partial x_2} = 0 \Leftrightarrow x_2(-30 - 4x_1 + 8x_2 + 2u) = 0$
$\frac{\partial L}{\partial u} = x_1 + 2x_2 - 30 \le 0$	$u\frac{\partial L}{\partial u} = 0 \Leftrightarrow u(x_1 + 2x_2 - 30) = 0$
$x_1, x_2 \ge 0$	$u \ge 0$

Punem:

$$v_1 = \frac{\partial L}{\partial x_1} = -15 - 4x_2 + 4x_1 + u$$

$$v_2 = \frac{\partial L}{\partial x_2} = -30 - 4x_1 + 8x_2 + 2u$$

$$y = -\frac{\partial L}{\partial u} = 30 - x_1 - 2x_2$$

Condițiile K - T în forma (4) - (5):

$$\begin{cases} 4x_1 - 4x_2 + \ \ u - v_1 & = 15 \\ -4x_1 + 8x_2 + 2u \quad - v_2 & = 30 \\ \ \ x_1 + 2x_2 \qquad\qquad + y & = 30 \end{cases} \qquad (4)$$

$$x_1 \geq 0, x_2 \geq 0, u \geq 0, v_1 \geq 0, v_2 \geq 0, y \geq 0$$

$$x_1 \cdot v_1 = 0 \quad x_2 \cdot v_2 = 0 \quad u \cdot y = 0 \qquad (5)$$

Ştim că dacă $(x^{\bullet}, u^{\bullet}, v^{\bullet}, y^{\bullet})$ este o soluție admisibilă a sistemului (4) care satisface relațiile (5) atunci x^* este o soluție optimă a problemei date.

Introducem variabilele artificiale z_1 şi z_2 în primele două egalități şi rezolvăm programul liniar:

$$\begin{cases} (min)w = z_1 + z_2 \\ 4x_1 - 4x_2 + \ u - v_1 \qquad + z_1 \qquad = 15 \\ -4x_1 + 8x_2 + 2u \quad - v_2 \qquad + z_2 = 30 \\ \ x_1 + 2x_2 \qquad + y \qquad = 30 \\ \qquad \text{Toate variabilele nenegative} \end{cases}$$

cu ajutorul algoritmului simplex, plecând de la soluția de bază inițială:

$$x_1 = x_2 = u = v_1 = v_2 = 0 \quad z_1 = 15 \quad z_2 = 30 \quad y = 30$$

care satisface vizibil condiția (5).

			0	0	0	0	0	0	1	1	
CB	VB	VVB	x_1	x_2	u	v_1	v_2	y	z_1	z_2	
1	z_1	15	4	-4	1	-1	0	0	1	0	ITERAȚIA 1 Poate intra x_2
1	z_2	30	-4	$\boxed{8}$	2	0	-1	0	0	1	deoarece $v_2 = 0$
0	y	30	1	2	0	0	0	1	0	0	
	w	45	0	4	3	-1	-1	*	*	*	
1	z_1	30	2	0	2	-1	-1/2	0	1	1/2	ITERAȚIA 2 Poate intra x_1
0	x_2	15/4	-1/2	1	1/4	0	-1/8	0	0	1/8	deoarece $v_1 = 0$
0	y	45/2	$\boxed{2}$	0	-1/2	0	1/4	1	0	-1/4	
	w	30	2	*	2	-1	-1/2	*	*	-1/2	
1	z_1	15/2	0	0	$\boxed{5/2}$	-1	-3/4	-1	1	3/4	ITERAȚIA 3 Poate intra u
0	x_2	75/8	0	1	1/8	0	-1/16	1/4	0	1/16	deoarece y = 0
0	x_1	45/4	1	0	-1/4	0	1/8	1/2	0	-1/8	
	w	15/2	*	*	5/2	-1	-3/4	-1	*	-1/4	
0	u	3									
0	x_2	9	Nu mai este cazul!								
0	x_1	12									
	w	0									

Prin urmare,o soluție a condițiilor de optimalitate K - T este $x^* = (12,9)$ şi $u^* = 3$.În concluzie

$$x_1^{\bullet} = 12 \quad x_2^{\bullet} = 9$$

este o soluție optimă a programului patratic dat de altfel şi singura având în vedere faptul că funcția obiectiv f este strict convexă.

§ 9. Întrebări şi probleme

1. Se dă o funcție numerică f definită în toate punctele unei mulțimi $C \subseteq R^n$.

a) Ce înseamnă că mulțimea C este convexă? Presupunând C convexă, ce înseamnă că funcția f este convexă (strict convexă)?

b) Ce înseamnă că punctul $x^* \in C$ este un punct de minim local al funcției f? Dar că x^* este un punct de minim global al funcției f pe C?

c) Arătați că dacă C este o mulțime convexă iar f este o funcție strict convexă atunci f nu poate avea decât cel mult un punct de minim global pe C.

2. a) Se consideră funcția patratică $\varphi(x) = x^T Cx$, $x \in R^n$ unde C este o matrice simetrică de ordinul n. Să se arate că pentru orice $x,y \in R^n$ şi orice $\lambda \in R$ are loc identitatea:

$$\varphi((1 - \lambda)x + \lambda y) = (1 - \lambda)\varphi(x) + \lambda\varphi(y) - \lambda (1 - \lambda)\varphi(x - y)$$

b) Scrieți funcția patratică:

$$f(x_1,x_2,x_3) = -x_1 + 2x_2 + x_3 + \tfrac{1}{2}x_1^2 - x_1x_2 + x_1x_3 + x_2^2 - x_2x_3 + x_3^2$$

în formatul matricial $f(x) = px + \frac{1}{2}x^T Cx$, $x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} \in R^3$ şi cercetați dacă f este o funcție convexă (strict convexă)

3. Descrieți principiul metodelor de minimizare fără restricții

4.Elaborați programe de calculator pentru metodele de minimizare unidimensională prezentate în secțiunea 6.5

5. Se dă funcția patratică $f(x_1,x_2) = -2x_1 - x_2 + \frac{1}{2}x_1^2 - x_1x_2 + 2x_2^2$.

a) Scrieți f în formatul matricial $f(x) = px + \frac{1}{2}x^T Cx$, $x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \in R^2$ şi arătați că f este o funcție strict convexă.

b) Calculați gradientul ∇f şi determinați minimul liber x^* al funcției f.

c) Determinați direcția celei mai rapide descreşteri a funcției f din $x^0 = (0,0)$ şi prima aproximație x^1 din metoda gradientului.

d) Efectuați încă două iterații din metoda gradientului pentru minimizarea nerestricționată a funcției f. Comparați x^3 cu x^* obținut la b).

6. În procesul de minimizare nerestricționată a unei funcții numerice de trei variabile ,efectuat cu metoda gradientului,printre direcțiile de deplasare s-au numărat şi vectorii s = (1,1,-3), s' = (2,-1,1). Este posibil ca cele două direcții să fi fost obținute în două iterații consecutive?

7. Se consideră programul convex:

$$(P)\begin{cases}(min)f = -3x_1 - 9x_2 + x_1^2 - x_1x_2 + x_2^2 \\ g(x_1,x_2) = x_1^2 + x_2^2 - 5 \le 0 \\ x_1 \ge 0, x_2 \ge 0\end{cases}$$

şi punctul $\bar{x} = (1,2)$ aflat pe frontiera mulţimii soluţiilor admisibile (deoarece $g(\bar{x}) = 0$)

a) Calculaţi gradienţii funcţiilor f şi g în $\bar{x}$.

b) Ce condiţii trebuie să satisfacă un vector s = $(s_1,s_2) \in R^2$ pentru a fi o direcţie admisibilă şi utilizabilă din $\bar{x}$? Care din următorii vectori $s^1 = (-1,1)$, $s^2 = (1,1)$, $s^3 = (1,-1)$ satisfac aceste condiţii?

8. Se dă programul neliniar patratic:

$$(P)\begin{cases}(min)f = (x_1 - 4)^2 + (x_2 - 3)^2 \\ 3x_1 + 2x_2 \le 12 \\ -2x_1 + 2x_2 \le 3 \\ 2x_1 - x_2 \le 4 \\ 2x_1 + 3x_2 \ge 6 \\ x_1 \ge 0. x_2 \ge 0\end{cases}$$

a) Vizualizaţi mulţimea soluţiilor admisibile;

b) Ce formă au curbele de nivel ale funcţiei obiectiv? Stabiliţi punctul de minim liber $x^{\varnothing}$ al funcţiei f;

c) Scrieţi condiţiile de optimalitate Kuhn - Tucker;

d) Stabiliţi cu aproximaţie poziţia soluţiei optime x^* a programului (P) şi folosind condiţiile K - T determinaţi efectiv x^*.

9. Se dă programul neliniar;

$$(P)\begin{cases}(max)f = x_1^2 x_2 \\ x_1 + x_2^2 \le 5 \\ 2x_1 - x_2 \ge 1 \\ x_1 \ge 0, x_2 \ge 0\end{cases}$$

a) Reprezentaţi grafic mulţimea soluţiilor admisibile şi curbele de nivel f(x) = 1 , f(x) = 4 ale funcţiei obiectiv;

b)Aduceţi programul (P) la forma canonică şi scrieţi condiţiile de optimalitate K - T;

c)Determinaţi soluţia optimă x^* a programului (P) ştiind că ea satisface cu egalitate numai prima restricţie a acestuia.

10. În modelarea unui proces de stocare cu două produse şi spaţiu de depozitare limitat s-a ajuns la următorul program neliniar:

$$(P)\begin{cases}(min)f(x_1,x_2) = x_1 + \dfrac{a_1^2}{x_1} + x_2 + \dfrac{a_2^2}{x_2} \\ x_1 + x_2 \le I \\ x_1 \ge 0, x_2 \ge 0\end{cases}$$

unde a_1 , a_2 , $I > 0$ sunt constante.

a) Să se arate că f este o funcţie convexă pe domeniul $\{(x_1,x_2) \in R^2 \mid x_1 > 0 , x_2 > 0\}$; (se va observa că f este separabilă şi se va cercete convexitatea componentelor)

b) Scrieţi condiţiile de optimalitate K - T pentru programul convex (P);

c) Determinaţi soluţia optimă a programului (P). Discuţie.

11. Să se rezolve programul patratic:

$$(P)\begin{cases} (min) f(x_1,x_2) = -x_1 - x_2 + x_1^2 - x_1x_2 + \frac{1}{2}x_2^2 \\ x_1 + x_2 \le 3 \\ 3x_1 + 2x_2 \ge 6 \\ x_1 \ge 0, x_2 \ge 0 \end{cases}$$

folosind condiţiile de optimalitate K - T şi algoritmul simplex (vezi secţiunea 8.2)