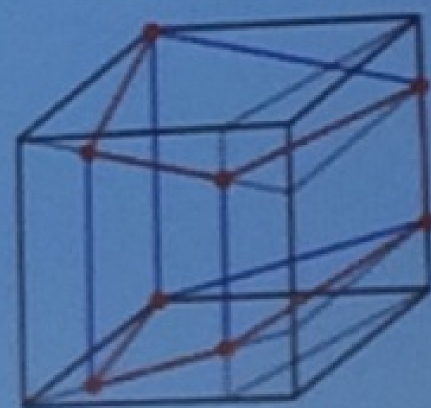
Simplekso algoritmo sudėtingumas

- Tiesinio programavimo uždavinio, užrašyto standartine forma, sprendinį galima rasti simplekso algoritmu.
- Sakysim, leistinas bazinis sprendinys žinomas, kadangi jį galima rasti išsprendus kitą panašų uždavinį.
- Kadangi simplekso algoritmas kaip potencialius sprendinius tikrina poliedro viršūnes, tai tikrinimų skaičius yra baigtinis, blogiausiu atveju sutampantis su poliedro viršūnių skaičiumi.
- Jei TPS apibrėžtas n-matėje erdvėje su m apribojimų, tai leistinų bazinių sprendinių (viršūnių) skaičius ne didesnis negu C_n^m.
- Sakysim, $n = 2m$. Tada, naudojantis Stirling'o formule viršūnių skaičių galima aproksimuoti $C_n^m \sim 2^{2m}/\sqrt{\pi m}$, kas yra astronomiškai didelis skaičius, kai m siekia vos kelias dešimtis.
- Net ir labai paprastos struktūros leistinosios srities, pvz. hiperkubo, viršūnių skaičius yra labai didelis: kai $n = 100$, viršūnių skaičius lygus $2^{100} \sim 10^{30}$.

Simplekso algoritmo sudėtingumas

- Egzistuoja tiesinio programavimo uždavinių pavyzdžiai, kai simplekso algoritmas, eidamas nuo pradinio iki optimalaus sprendinio, patikrina visas poliedro viršūnes.
- Taigi, augant uždavinio dydžiui, blogiausiu atveju uždavinio sprendimo simplekso algoritmu laikas auga eksponentiškai (2^n viršūnių).



- Jei praktiniai uždaviniai būtų panašūs į blogiausio atvejo uždavinius, simplekso algoritmas būtų visai nenaudingas, nes per priimtiną laiką juo nebūtų įmanoma išspręsti bent kiek didesnio uždavinio.
- Laimei, praktiniai uždaviniai palankesni simplekso algoritmui: daugeliui praktinių uždavinių sprendimo laikas auga ne greičiau negu $2m$.

Simplekso algoritmo sudėtingumas

- Vis dėlto, kyla svarbus teorinis klausimas, ar egzistuoja algoritmai, kurie blogiausio atvejo požiūriu paprastesni negu simplekso algoritmas.
- Simplekso algoritmo sudėtingumo įvertis gaunamas įvertinant poliedro viršūnių skaičių ir įrodant, kad egzistuoja uždaviniai, kuriuos sprendžiant patikrinamos visos poliedro viršūnės.
- Gautasis sudėtingumo įvertis išreiškiamas šitaip $\tau(m) = \Omega(2^{2m})$, čia $\tau(\cdot)$ yra uždavinio sprendimo laikas, o $\Omega(\cdot)$ reiškia funkciją, augančią ne lėčiau negu jos argumentas.

Polinominis ir eksponentinis sudėtingumas

- Vėliau pateiksime polinominio sudėtingumo TPSS algoritmų pavyzdžius.
- Polinominis sudėtingumas reiškia, kad skaičiavimo laikas gali būti apréžtas polinomine uždavinio dydžio funkcija

$$\tau(\nu) = O(\nu^N),$$

  čia $O(\cdot)$ reiškia funkciją, kuri auga ne greičiau negu jos argumentas, N priklauso nuo uždavinio duomenų.
- Kadangi eksponentinė funkcija auga greičiau už polinominę, tai pakankamai dideliems uždaviniams polinominio sudėtingumo algoritmai bus greitesnis negu simplekso algoritmas.
- Priminsime, kad algoritmai lyginami blogiausio atvejo požiūriu.

Uždavinio dydžio matas sudėtingumo tyrime

- Vertinant sudėtingumą bendru atveju reikia apibrėžti uždavinio dydžio matą ν ir įvertinti uždavinio sprendimo laiko τ priklausomybę nuo uždavinio dydžio.
- Sprendimo laikas paprastai suprantamas kaip reikalingų uždaviniui išspręsti kompiuteriu vykdomų operacijų skaičius.
- Realiai kompiuteriu atliekami veiksmai su dvejetainiais kodais. Kiekvienas dvejetainis kodas gali būti interpretuojamas kaip dvejetainis skaičius.
- Algoritmų sudėtingumo tyrimuose dažniausiai abstrahuojamasi nuo kitų skaičiavimo kompiuteriu ypatybių ir nagrinėjami uždaviniai, kurių duomenys yra sveikieji skaičiai.
- TPS atveju tas reikštų prielaidą, kad visi matricos A bei vektorių B, C elementai yra sveikieji skaičiai; TPS uždavinį su sveikaisiais koeficientais sutrumpintai žymėsime TPSS.

Sudėtingumo tyrimas

- TPSS algoritmų sudėtingumui analizuoti patogesnis uždavinio dydžio matas

$$L = m \times n + \lceil \log_2 |P| \rceil + n \lceil \log_2 |n| \rceil.$$

- Kadangi L patenkina nelygybę $L \leq \nu^2$, tai iš algoritmo polinominio sudėtingumo L atžvilgiu išplaukia jo polinominis sudėtingumas ν atžvilgiu: $L^M \leq \nu^{2M}$.
- Simplekso algoritmu optimalaus sprendinio ieškoma tikrinant leistinosios srities viršūnes.
- Toliau nagrinėjami metodai generuoja taškų, nesutampančių su srities viršūnėmis, sekas.
- Tokios sekos asimptotiškai konverguoja į optimalią viršūnę.

Sudėtingumo tyrimas

- Begalinės sekos nutraukimo sąlygai apibrėžti ir tiksliam TPSS uždavinio (kurio dydis lygus L) sprendiniui apskaičiuoti pagal gautą apytikslį sprendinį svarbios toliau suformuluotos bazinių sprendinių savybės.
- **Lema**. Jei X yra bazinis sprendinys, tai egzistuoja sveikieji skaičiai $D_0, D_1, \ldots, D_n$, tokie, kad $x_i = D_i/D_0$, $D_0 \neq 0$, $D_i \leq 2^L$, $|x_i| < 2^L$.
- **Lema**. Sakysim X ir Y du baziniai sprendiniai ir patenkinta nelygybė
$$CX - CY \leq 2^{-2L}.$$
Tada $CX = CY$.

Elipsoidų metodas

- Elipsoidai naudojami konstruojant optimizavimo metodus įvairioms uždavinių klasėms.
- Čia trumpai aptariamas elipsoidų metodas tiesinio programavimo uždaviniams.
- Šį metodą 1979 m. paskelbė L.Chačijanas, remdamasis visai kitomis negu simplekso algoritmo idėjomis.
- Šio metodo žingsnių skaičius, augant uždavinio dydžiui, blogiausiu atveju auga polinomo greičiu, t.y. metodas priklauso polinominio sudėtingumo klasei.
- Šiuo požiūriu elipsoidų metodas žymiai pranašesnis už eksponentinio sudėtingumo klasei priklausantį simplekso algoritmą.

Teorema

- TPSS polinominio sudėtingumo algoritmas egzistuoja tada ir tik tada, kai egzistuoja polinominio sudėtingumo algoritmas tiesinių nelygybių su sveikaisiais koeficientais sistemoms spręsti.
- TPSS sprendimą, remiantis dualumo teorijos rezultatais, galima pakeisti lygčių ir nelygybių sistemos su sveikaisiais koeficientais

  $$AX = B, X \geq 0, A^t Y \leq C, CX - BY = 0$$

  sprendimu. Iš dualumo teorijos žinoma, kad ši sistema turi sprendinį, jei TPSS aprėžtas. Naudodamiesi algoritmu per polinominį laiką apskaičiuosime šios sistemos sprendinį (X_*, Y_*), arba įsitikinsime, kad ji neturi sprendinio.
- Kadangi sistemos dydis nedidesnis už trigubą TPSS dydį, tai TPSS sprendinys X_* bus surastas per polinominį laiką, arba bus nustatyta, kad TPSS sprendiniai neaprėžti.

Teorema

- Nelygybių su sveikaisiais koeficientais sistema $AX \leq B$, kurios dydis L, turi sprendinį tada ir tik tada, kai $AX < B'$ turi sprendinį, čia $b'_i = b_i + \varepsilon, \varepsilon = 2^{-2L}$. Egzistuoja polinominio sudėtingumo L atžvilgiu algoritmas sistemos $AX \leq B$ sprendiniui apskaičiuoti remiantis sistemos $AX < B'$ sprendiniu.
- Teorema remiantis galima teigti, kad egzistuoja polinominio sudėtingumo TPSS algoritmas, jei polinominio sudėtingumo algoritmas egzistuoja griežtų tiesinių nelygybių sistemoms su sveikaisiais koeficientais spręsti.
- Iš tikrųjų, remiantis dualumo teorija, TPSS per tiesinį laiką gali būti pakeistas ekvivalenčiu negriežtų tiesinių nelygybių su sveikaisiais koeficientais sistemos $\bar{A}Z \leq D$ sprendimo uždaviniu, kurio dydis L ne daugiau kaip tris kartus didesnis už TPSS dydį.

TPSS uždavinio sprendimas

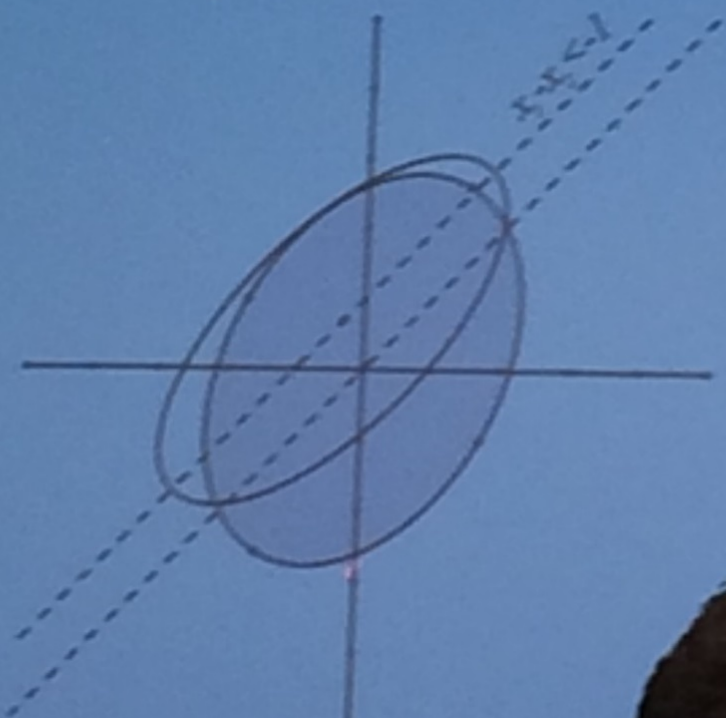
- Sudarykime nelygybių sistemą $\tilde{A}'Z < D'$, $\tilde{A}' = \tilde{A} \cdot 2^{2L}$, $D' = D \cdot 2^{2L} + I$, I – vienetinis vektorius. Pastarosios sistemos dydis ne didesnis negu $2L^2$.
- Jei pastarajai sistemai spręsti žinomas polinominio sudėtingumo algoritmas, tai jos sprendimo laikas apréžtas ir polinomu L atžvilgiu.
- Suradę nelygybių sistemos $\tilde{A}'Z < D'$ sprendinį, sistemos $\tilde{A}Z \leq D$ sprendinį, galima atstatyti (tuo pačiu surasti ir TPSS sprendinį) per polinominį laiką.
- Kadangi polinominių įverčių kompozicija duoda polinominį įvertį, tai ir bendras TPSS uždavinio sprendimo algoritmas yra polinominio sudėtingumo.

Elipsoidų algoritmas

- Elipsoidų algoritmas skirtas griežtų tiesinių nelygybių sistemoms spręsti.
- Pažymėkime nagrinėjamąją nelygybių sistemą $AX < B$.
- Inicializavimo žingsnyje sukuriamas pradinis elipsoidas Ξ_0, kuris apima nelygybių sistemos sprendinių aibę T arba (jei, pavyzdžiui, aibė neaprėžta) jos dalį.
- k-tajame algoritmo žingsnyje tikrinama, ar hiperelipsoido Ξ_{k-1} centras ϑ_k patenkina nelygybių sistemą. Jei taip, tai uždavinys išspręstas.

Elipsoidų algoritmas

- Akcentuosime svarbią hiperelipsoidų savybę: nesunku sukonstruoti hiperelipsoidą, kuris apima padalinto hiperelipsoido pusę ir kurio hipertūris reikšmingai mažesnis už padalinto hiperelipsoido tūrį. Remiantis šia savybe sudaromas hiperelipsoidas Ξ_k. $k := k + 1$, ir žingsnis kartojamas.



Elipsoidų algoritmo sustojimas

- Galima parodyti, kad po baigtinio žingsnių skaičiaus bus gautas nelygybių sistemos sprendinys.
- Algoritmas be papildomos sustojimo sąlygos būtų nekorektiškas, nes tuščios aibės T atveju būtų vykdomas begalinis ciklas.
- Tačiau, remiantis informacija apie uždavinio duomenis, teoriškai galima įvertinti minimalų hiperelipsoido tūrį netuščios leistinosios srities atveju.
- Jei vykdant algoritmą gaunamas mažesnio tūrio hiperelipsoidas, tai algoritmas stabdomas, ir šitoks sustojimas reiškia, kad nelygybių sistema neturi sprendinio.
- Sakysim, pradinis hiperelipsoidas yra sfera su centru koordinačių pradžioje ir radiusu $n \cdot 2^L$. Tada ne vėliau kaip po $K = 16 \cdot n \cdot (n+1) \cdot L$ žingsnių algoritmas sustos.
- Tas reiškia, kad blogiausio atvejo sprendimo laikas yra polinominis uždavinio dydžio atžvilgiu.

Elipsoidų algoritmo sudėtingumas

- Nepaisant to, kad elipsoidų algoritmas (blogiausio atvejo) sudėtingumo kriterijaus požiūriu yra žymiai geresnis už simplekso algoritmą, jis pasirodė kaip prastas pastarojo konkurentas sprendžiant praktinius uždavinius.
- Viena iš pagrindinių priežasčių ta, kad simplekso algoritmo žingsnis realizuojamas žymiai paprastesniais skaičiavimais negu elipsoidų algoritmo žingsnis.
- Be to, praktiniuose uždaviniuose simplekso algoritmo vykdomų žingsnių skaičius daug daug mažesnis negu blogiausiu atveju, o elipsoidų algoritmui tokia savybė (kurią sunku net tiksliai suformuluoti) nėra būdinga.

Elipsoidų algoritmo schema

- Toliau pateikiama elipsoidų algoritmo schema. k-žingsnyje hiperelipsoidą aprašanti matrica pažymėta H_k:

$$\Xi_k = \{X : (X - \vartheta_k)^t \cdot H_k^{-1} \cdot (X - \vartheta_k) \leq 1\}.$$

1. $k = 0$, $K = 16 \cdot n \cdot (n+1) \cdot L$, $\vartheta_0 = (0, \ldots, 0)^t$, $H_0 = n^2 2^{2L} I$.
2. **For** $k = 0$ **to** K **do**
   If $A\vartheta_k < B$ **then** Print (ϑ_k) and **Stop**
   else
   Rasti stulpelį A_i tokį, kad $A_i^t \vartheta_k \geq b_i$,
   $D = A_i$,

$$\vartheta_{k+1} = \vartheta_k - \frac{1}{n+1} \cdot \frac{H_k \cdot D}{\sqrt{D^t \cdot H_k \cdot D}},$$

$$H_{k+1} = \frac{n^2}{n^2 - 1} \left(H_k - \frac{2}{n+1} \frac{(H_k \cdot D)(H_k \cdot D)^t}{D^t \cdot H_k \cdot D} \right).$$

3. Print ("neturi sprendinio") and **Stop**.

Vidinio taško metodai

- Praėjus keliems metams po elipsoidų metodo paskelbimo, N.Karmarkar pasiūlė kitokią idėją, pradėjusią naują, taip vadinamų vidinio taško metodų, kryptį.
- Buvo įrodyta, kad šis, kaip ir elipsoidų, metodas priklauso polinominio sudėtingumo metodų klasei.
- Be to, Karmarkar'o metodo sudėtingumą aprašančio polinomo laipsnis žemesnis negu elipsoidų metodo sudėtingumą aprašančio polinomo laipsnis.
- Ypač svarbu, kad šis metodas sėkmingai konkuravo su simplekso algoritmu sprendžiant praktinius uždavinius.
- Karmarkar'o algoritmas tiesiogiai tinka specialiam TPS atvejui, kai visų, išskyrus vieną, apribojimų dešiniosios pusės lygios nuliui.
- Išskirtinis apribojimas yra toks: $x_1 + x_2 + \ldots + x_n = 1$.
- Be to, reikalaujama, kad leistinajai sričiai priklausytų taškas $V_0 = \frac{I}{n}$, čia I - vienetinis vektorius.

Karmarkar'o algoritmas

- **Apibrėžtis**. Politopas $K = \{X \in \mathbb{R}^n : X \geq 0, \sum x_i = 1\}$ vadinamas standartiniu $n-1$ matmenų simpleksu, o taškas $V = \frac{I}{n}$ jo centru.
- **Apibrėžtis**. TP uždavinys vadinamas Karmarkar'o standartiniu uždaviniu (TPKS), jei, leistinoji sritis yra apibrėžta šitaip:

  $$G = K \cap P, P = \{X : AX = 0\},$$

  čia A yra sveikųjų skaičių matrica, $V \in G$, tikslo funkcijos koeficientai C yra sveikieji skaičiai ir tikslo funkcijos reikšmės CX neneigiamos, kai $X \in G$. Reikia rasti srities G tašką, kuriame tikslo funkcijos reikšmė lygi nuliui arba nustatyti, kad toks taškas neegzistuoja.
- TPKS formuluojamas taip, kad nereikalaujama rasti optimalaus sprendinio, jei minimali tikslo funkcijos reikšmė nelygi nuliui. Galima įrodyti, kad TPS per polinominį laiką gali būti pakeistas TPKS.

Apribojimai optimizavimo uždavinyje

- Formuluojant uždavinį matematiškai, apribojimais vadinamos leistinąją sritį apibrėžiančios lygybės ir nelygybės, pavyzdžiui,

$$
\begin{aligned}
\min f(X), X &= (x_1, \ldots, x_n), \\
g_i(X) &\leq 0, i = 1, \ldots, k, \\
g_i(X) &= 0, i = k+1, \ldots, m,
\end{aligned}
$$

  reiškia funkcijos $f(X)$ minimizavimą leistinoje srityje, apibrėžtoje funkcijų $g_i(X)$ neteigiamumo arba lygybės nuliui reikalavimais.
- Patenkinantis apribojimus taškas X vadinamas (optimizavimo uždavinio) leistinu sprendiniu.
- Minimumo taškas vadinamas optimaliu sprendiniu, arba trumpiau, sprendiniu.
- Pirmieji k apribojimų vadinami nelygybiniais, kiti – lygybiniais.

Optimizavimo uždavinių klasifikacija

- Apribojimai klasifikuojami į tiesinius ir netiesinius, žiūrint kokios funkcijos $g_i(X)$.
- Jei bent viena iš tikslo arba apribojimų funkcijų yra netiesinė, toks optimizavimo uždavinys vadinamas netiesinio programavimo uždaviniu, jei jos visos iškilosios – iškilojo programavimo uždaviniu.
- Uždavinių su apribojimais lokaliojo optimizavimo metodai sudaromi iš metodų be apribojimų, juos modifikuojant taip, kad būtų įvertinama ne tik funkcijos mažėjimo kryptis, bet ir apribojimai.

Minimumo sąlygos

- Anksčiau nagrinėta būtina minimumo sąlyga uždaviniams be apribojimų, išreikšta funkcijos gradiento lygybe nuliui.
- Esant apribojimams, funkcijos gradientas gali būti nelygus nuliui visoje leistinoje srityje.
- Tada minimumas pasiekiamas taške X^*, esančiame ant leistinosios srities krašto.
- Būtiną minimumo sąlygą galima paaiškinti geometriškai: jei taške X^* pasiekiamas lokalusis minimumas, tai leistinoje srityje jokia kryptimi negalima sumažinti tikslo funkcijos reikšmės.
- Todėl tikslo funkcijos gradientas taške X^* turi būti ortogonalus leistinosios srities liečiamajai hiperplokštumai.
- Nelygybiniai apribojimai, kurie taške X patenkinami kaip lygybės, vadinami aktyviais; jų indeksų aibę pažymėsime $I^*(X)$, ir $I(X) = I^*(X) \cup \{k+1, \ldots, m\}$.

Nepatenkintų reguliarumo sąlygų pavyzdys

Reguliarumo sąlygos netenkinamos uždavinio

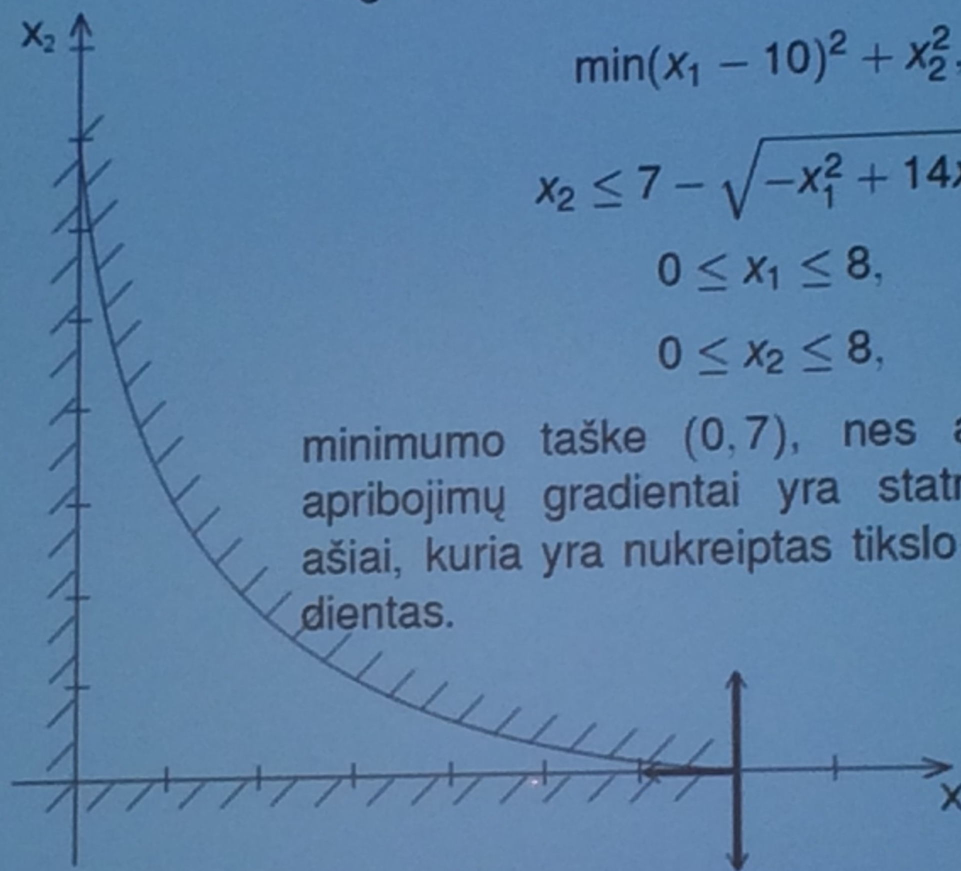
$$\min (x_1 - 10)^2 + x_2^2,$$

$$x_2 \leq 7 - \sqrt{-x_1^2 + 14x_1},$$

$$0 \leq x_1 \leq 8,$$

$$0 \leq x_2 \leq 8,$$

minimumo taške $(0, 7)$, nes abiejų aktyvių apribojimų gradientai yra statmeni abscisių ašiai, kuria yra nukreiptas tikslo funkcijos gradientas.



Minimumo sąlygos optimizavime su apribojimais

- Jei X^* yra lokaliojo minimumo taškas, tai egzistuoja tokie visi kartu nelygūs nuliui daugikliai $\lambda_i, i = 0, \dots, m$, kad $\lambda_i \geq 0, i = 1, \dots, k$,

$$\lambda_0 \nabla f(X^*) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i \nabla g_i(X^*) = 0,$$

$$\lambda_i g_i(X^*) = 0, \; i = 1, \dots, k.$$

- Svarbus šios teoremos atvejis $\lambda_0 \neq 0$ įrodomas esant papildomai reguliarumo prielaidai, pavyzdžiui, $\nabla g_i(X^*), i \in I(X^*)$ yra tiesiškai nepriklausomi.
- Tada teoremos formulavime galima rašyti $\lambda_0 = 1$, o gautos būtinos minimumo sąlygos vadinamos Karush-Kuhn-Tucker (KKT) sąlygomis

$$\nabla f(X^*) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i \nabla g_i(X^*) = 0,$$

$$\lambda_i \geq 0, \; \lambda_i g_i(X^*) = 0, \; i = 1, \dots, k.$$

Lagrange'o funkcija

- Daugelis netiesinio programavimo metodų susiję su Lagrange'o funkcija

$$L(X,\Lambda) = f(X) + \sum \lambda_i \cdot g_i(X).$$

- Jei Lagrange'o funkcija diferencijuojama, tai ką tik įrodytas minimumo sąlygas (priėmus reguliarumo prielaidą) galima užrašyti naudojantis Lagrange'o funkcija

$$\begin{aligned} \nabla_X L(X,\Lambda) &= 0, \\ \lambda_i &\geq 0, i \in I^*(X^*), \\ \lambda_i g_i(X^*) &= 0, i = 1, \ldots, k. \end{aligned}$$

- Lagrange'o funkcijos terminais galima suformuluoti būtinas minimumo sąlygas, kurios nereikalauja, kad funkcijos $f(X)$, $g_i(X), i = 1, \ldots, m$, būtų diferencijuojamos.

Būtinos minimumo sąlygos

- Tarkime, optimizavimo uždavinys turi tik nelygybinius apribojimus, visos šio uždavinio funkcijos iškilosios ir apribojimai tenkina reguliarumo sąlygą: egzistuoja toks taškas X, kuriame nelygybės tenkinamos griežtai: $g_i(X) > 0, i = 1, \ldots, k$.
- Tada lokaliojo minimumo taškas X^* lemia Lagrange'o funkcijos balno tašką, t. y. egzistuoja tokie $\lambda_{0i} \geq 0, i = 1, \ldots, k$, kad

$$L(X^*, \Lambda) \leq L(X^*, \Lambda_0) \leq L(X, \Lambda_0)$$

  su visais $\lambda_i \geq 0, X \in \mathbb{R}^n$.
- Tas rodo, kad lokaliojo minimumo su sudėtingais apribojimais ieškojimas gali būti pakeistas Lagrange'o funkcijos balno taško ieškojimu esant paprastiems apribojimams $\lambda_i \geq 0$.
- Šios būtinos minimumo sąlygos vadinamos (Kuhn-Tucker) teorema apie balno tašką.

Dualumo savybės

- Sakysim X yra leistinas **P** uždavinio sprendinys, o (U,V) – leistinas **D** uždavinio sprendinys. Tada galioja nelygybė

$$f(X) \geq \Theta(U,V).$$

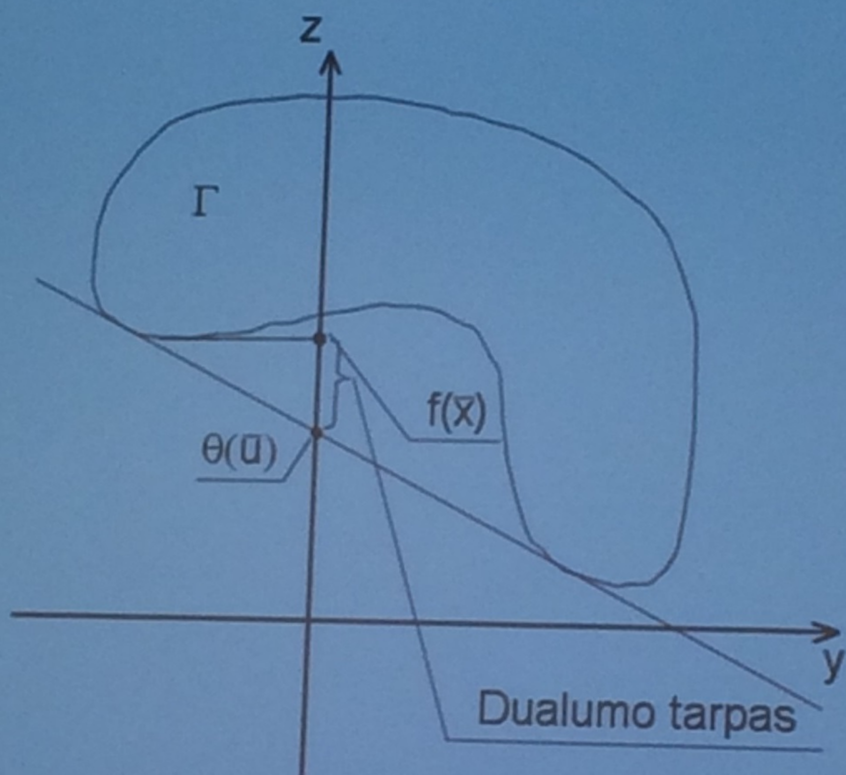
- Savybės:

$$\inf_{X \in A} f(X) \geq \sup_{U \geq 0,\ V \in \mathbb{R}^m} \Theta(U,V).$$

- Jei $f(\overline{X}) = \Theta(\overline{U},\overline{V})$, $\overline{X} \in A$, $\overline{U} \geq 0$, tai $\overline{X}$ ir $(\overline{U},\overline{V})$ yra **P** ir **D** uždavinių sprendiniai.
- Jei, $\inf_{X \in A} f(X) = -\infty$, tai ir $\Theta(U,V) = -\infty$, $\forall U \geq 0$. Jei $\sup_{U \geq 0} \Theta(U,V) = \infty$, tai **P** neturi leistinų sprendinių.

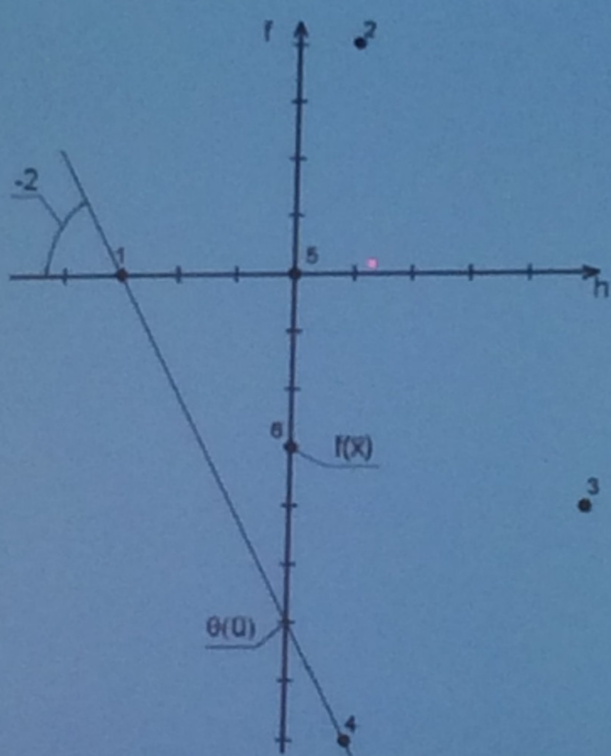
Dualumo tarpas

- Bendru atveju galioja nelygybė, t.y. **P** uždavinio minimumas ne mažesnis už **D** maksimumą.
- Kai jie nesutampa, skirtumas vadinamas dualumo tarpu.



Dualumo tarpo pavyzdys

- **P**: $\min f(X) = \min(-2x_1 + x_2)$, $h(X) = x_1 + x_2 - 3 = 0$, $A_0 = \{(0,0),(0,4),(4,4),(4,0),(1,2),(2,1)\}$.
- Lygybinį apribojimą patenkina du aibės A_0 taškai, o minimumo taškas yra $\overline{X} = (2,1)$; $f(\overline{X}) = -3$.



Baudos ir barjerų metodai

- Paprastumo dėlei tarkime, kad tikslo funkcija apibrėžta su visais $X \in \mathbb{R}^n$, ir žinomas leistinosios srities vidaus taškas X_1.
- Pradiniu tašku parinkus X_1, lokalųjį minimumą, jei toks egzistuotų srities viduje, galima būtų rasti naudojant metodą, skirtą uždaviniams be apribojimų.
- Tačiau techniniuose bei ekonominiuose optimizavimo uždaviniuose minimumas dažniausiai pasiekiamas leistinosios srities ribiniame taške.
- Pagal ieškojimo be apribojimų metodą gauta trajektorija, prasidedanti taške X_1, šiuo atveju išeina už leistinosios srities, pažeisdama apribojimą $g_i(X) \leq 0$.
- Trajektorijos dalis iki susikirtimo su apribojimu galėtų būti gauta ir pagal metodą be apribojimų.
- Trajektorijos tąsa turi kompromisiškai suderinti funkcijos mažėjimo kryptį ir apribojimus.

Baudos funkcija

- Bendrą funkcijos reikšmės sumažėjimą ir apribojimų pažeidimą įvertina vadinamoji baudos funkcija

$$B(X,r) = f(X) + \frac{1}{r} b(X),$$

  čia $b(X) = 0$, jei apribojimai nepažeisti:
  $g_i(X) \geq 0, i = 1, \ldots, k$, $g_i(X) = 0, i = k+1, \ldots, m$, ir
  $b(X) > 0$, jei apribojimai pažeisti; $r > 0$.
- Antrasis baudos funkcijos dėmuo rodo, kad apribojimų pažeidimas ekvivalentus tam tikram tikslo funkcijos reikšmės padidėjimui.
- Dažnai naudojamos kvadratinė ir absoliuti baudos:

$$b(X) = \sum_{i=1}^{k} (\max(0, g_i(X))^2 + \sum_{i=k+1}^{m} (g_i(X))^2,$$

$$b(X) = \sum_{i=1}^{k} (\max(0, g_i(X)) + \sum_{i=k+1}^{m} |g_i(X)|.$$

Optimizavimas uždavinių seka

- Baudos funkcija $B(X,r)$ su pakankamai mažu r staigiai didėja už leistinosios srities ribų.
- Parametrui r artėjant prie nulio, $B(X,r)$ minimumo taškas artėja prie uždavinio sprendinio.
- Todėl optimizavimo uždavinys keičiamas seka uždavinių su diferencijuojama funkcija $b(X)$, apibrėžiama mažėjančia parametro r seka.
- Kiekvieno paskesnio uždavinio pradinis taškas yra ankstesnio uždavinio sprendinys.
- Paprastai, mažinant r, griežtinamos ir metodo be apribojimų sustojimo sąlygos.

Barjerų metodas

- Vartojant baudos metodus, generuojama seka taškų, artėjančių prie sprendinio iš leistinosios srities išorės.
- Kartais tikslo funkcija būna apibrėžta tik leistinoje srityje.
- Tada optimizavimo metodo generuojami taškai turi likti srities viduje viso minimizavimo proceso metu.
- Barjerų funkcija skiriasi nuo baudos tuo, kad ji ima staigiai didėti artėjant prie apribojimų ir dar jų nepažeidus.
- Metodu be apribojimų gauta tokios funkcijos minimizavimo trajektorija ima krypti išilgai uždavinio apribojimų, jų dar nepasiekus.
- Aišku, barjerų metodas vartotinas tik tuo atveju, kai apribojimai nelygybiniai ir leistinosios srities hipertūris nelygus nuliui.
- Plačiausiai vartojama logaritminė barjerų funkcija

$$B(X,r) = f(X) - r\sum_{l=1}^{k} \ln(-g_i(X)).$$

Barjerų ir baudos metodų analogija

- Vartojant barjerų metodą, uždavinys su apribojimais keičiamas uždavinių be apribojimų seka su $r \to 0$.
- Analogija tarp barjerų ir baudos metodų akivaizdi. Dėl šios analogijos abu metodai dažnai vadinami baudos metodais, tik vienas išorinės baudos, o kitas vidinės baudos metodu.
- Sustojimo sąlyga nustatoma pagal mažą minimumo taško pokytį keliems gretimiems uždaviniams be apribojimų, t. y. su keliomis mažėjančiomis parametro r reikšmėmis.

Leistinųjų krypčių metodo apibendrinimai

- Šį metodą galima modifikuoti uždaviniams su netiesiniais apribojimais.
- Aktyvieji apribojimai taške X_k aproksimuojami tiesiniais, t.y. $g_i(X) \approx g_i(X_k) + \nabla g_i(X_k)(X_k - X)$.
- Kaip ir anksčiau, leistinoji kryptis nustatoma aproksimuotam uždaviniui.
- Minimizuojant tikslo funkciją šia kryptimi, gaunamas naujas taškas X_{k+1} ir t. t.
- Šį metodą galima apibendrinti, įvertinant tikslo funkcijos, išskleistos Taylor'o eilute, aukštesnės eilės narius.
- Tada ieškoma krypties, tenkinančios ištiesintus apribojimus ir mažiausiai besiskiriančios nuo krypties, rodančios į aproksimuotos kvadratine funkcija tikslo funkcijos minimumo tašką.
- Suprantama, aproksimuoja[illegible] kvadratinė funkcija turi būti teigiamai apibrėžt[illegible]
- Jei apribojimai laba[illegible] neefektyvūs dėl trumpo žingsnio k[illegible]

Gradientų projekcijų ir redukcijų metodai

- Projekcijų metodai plačiai taikomi uždaviniams su tiesiniais apribojimais spręsti.
- Jie ypač efektyvūs (palyginti su kitais), kai yra daug kintamųjų.
- Remiantis išdėstytomis idėjomis, kintamosios metrikos metodai be apribojimų nesunkiai modifikuojami uždaviniams su tiesiniais apribojimais.
- Tereikia modifikuoti hesiano perskaičiavimo formules taip, kad būtų įvertinami aktyvių apribojimų aibės pasikeitimai, t.y. jos sumažėjimas arba papildymas naujais apribojimais.

Rosen'o metodas

- Rosen'o metodas – vienas iš plačiausiai naudojamų gradientų projekcijų metodų.
- Juo realizuojama ortogonali gradiento projekcija į ištiesintus aktyvius apribojimus.
- Dėl paprastumo tarkime, kad apribojimai tiesiniai.
- Iš pradinio taško pagal minimizavimo be apribojimų metodą einama iki trajektorijos sankirtos su leistinosios srities riba.
- Gali atsitikti ir taip, kad antigradientas kai kurių iš apribojimų, kurie tenkinami kaip lygybės, atžvilgiu nukreiptas į leistinosios srities vidų. Tada tokie apribojimai išbraukiami iš aktyvių apribojimų sąrašo.
- Antigradientas projektuojamas į aktyvių apribojimų sankirtą. Projekcija apskaičiuojama dauginant antigradientą iš matricos, sudarytos iš aktyvių apribojimų (tiesinių nelygybių) koeficientų. Šia kryptimi ieškoma tikslo funkcijos minimumo.
- Nauja iteracija pradedama aktyvių apribojimų sąrašo sudarymu ir t.t.

Lagrange'o funkcijų metodai

- Nagrinėdami būtinas minimumo sąlygas, pabrėžėme Lagrange'o funkcijos reikšmę netiesinio programavimo uždaviniams analizuoti.
- Jos pagrindu galima konstruoti ir minimizavimo metodus.
- Kaip jau buvo minėta, Lagrange'o funkcijos balno taškas nusako iškilo programavimo uždavinio sprendinį.
- Todėl metodas balno taškui ieškoti kartu yra ir metodas iškilojo programavimo uždaviniui spręsti.
- Priminsime, kad Lagrange'o funkcija vadinama

$$L(X,\Lambda) = f(X) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i g_i(X), \ \lambda_i \geq 0.$$

- Reikia rasti tašką (X_*,Λ_*), tenkinantį nelygybes

$$L(X_*,\Lambda) \leq L(X_*,\Lambda_*) \leq L(X,\Lambda_*), \ \lambda_{*i} \geq 0.$$

Lagrange'o funkcijų metodai

- Bendru atveju tegalima teigti, kad Lagrange'o funkcija yra stacionari minimumo taške: jei X_* – lokaliojo minimumo taškas, ir aktyviųjų ribojimų gradientai $\nabla g_i(X_*), i \in I_*$, tiesiškai nepriklausomi, tai egzistuoja toks Λ_*, kad

$$\nabla f(X_*) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_{*i} \nabla g_i(X_*) = 0,$$

  ir X_* yra funkcijos $L(X, \Lambda_*)$ stacionarus taškas.
- Šiuo metodu pradinio uždavinio minimumo taškas nebūtinai bus rastas. Taip gali atsitikti, jei Lagrange'o funkcijos stacionarus taškas bus ne minimumo, o perlinkio arba maksimumo taškas.
- Iš čia išplaukia natūralus noras "pataisyti" Lagrange'o funkciją taip, kad stacionarus taškas virstų minimumo

Lagrange'o funkcijų metodai

- Baudos daugiklio r įtaką nesunku suprasti, prisiminus baudos metodų aptarimą.
- Parinkę per mažą r reikšmę, turėsime staigiai kylantį funkcijos reljefo šlaitą tuoj už leistinosios srities ribos.
- Anksčiau buvo pabrėžta, kad tokią funkciją minimizuoti sunku, ypač kai srities riba kreiva.
- Kai r reikšmė per didelė, gali nepavykti transformuoti Lagrange'o funkcijos stacionaraus taško į minimumo tašką.
- Jei būtų žinoma daugiklių vektoriaus reikšmė Λ_*, tai netiesinio programavimo uždavinį galėtume išspręsti, vieną kartą minimizuodami modifikuotą Lagrange'o funkciją (be apribojimų).
- Tačiau sprendžiant realius uždavinius Λ_* būna nežinomas, ir jį tenka vertinti naudojantis informacija apie $f(X)$ ir $g_i(X)$, $i = 1, \ldots, m$, gauta ankstesnėse iteracijose.

Lagrange'o funkcijų metodai

- Panagrinėsime specialų minimizavimo uždavinio atvejį, kai nėra nelygybinių apribojimų

$$\min_{G(X)=0} f(X),\ G(X) = (g_1(X), \ldots, g_m(X))^t.$$

- Šiuo atveju modifikuota Lagrange'o funkcija lygi

$$L(X,\Lambda,r) = f(X) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i g_i(X) + \frac{1}{2r} \sum_{i=1}^{m} g_i^2(X),$$

o jos gradientas išreiškiamas formule

$$\nabla_X L(X,\Lambda,r) = \nabla f(X) + \sum_{i=1}^{m} (\lambda_i + \frac{1}{r} g_i(X)) \nabla g_i(X).$$

Netiesinio programavimo metodų aptarimas

- Paprasčiausi yra uždaviniai su diferencijuojamomis tikslo funkcijomis ir tiesiniais apribojimais.
- Jiems spręsti sukurta daug efektyvių metodų ir juos realizuojančios programinės įrangos.
- Uždaviniai su tiesiniais apribojimais netgi paprastesni už uždavinius be apribojimų ta prasme, kad dėl ribojimų sumažėja leistinosios aibės dimensija.
- Uždaviniams su tiesiniais apribojimais efektyvūs projekcijų ir redukcijų metodai, nes šie metodai realizuojami nesudėtingomis matricų daugybos operacijomis.
- Lagrange'o funkcijų metodai taip pat tinka minimizavimo uždaviniams su tiesiniais apribojimais.
- Tais atvejais, kai tikslo funkcija daugiaekstremė arba jai būdingi kitokie nereguliarumai, retai pavyksta pasinaudoti tiesinių apribojimų [illegible]

Netiesinio programavimo metodų aptarimas

- Lokaliojo minimizavimo su netiesiniais apribojimais uždaviniams, kai tikslo ir apribojimų funkcijos diferencijuojamos, o kintamųjų nelabai daug (iki kelių šimtų), efektyviausi yra Lagrange'o funkcijų metodai.
- Jie visapusiškai ištyrinėti, juos realizuojančios kompiuterių programos eksploatuojamos ilgus metus.
- Todėl programų konstrukcija yra išbaigta, sukurti gana tobuli pagalbinių uždavinių sprendimo metodai.
- Tačiau šie metodai nelabai tinka tais atvejais, kai tikslo ar apribojimų funkcijos nediferencijuojamos.
- Jei skaičiavimo paklaidos pernelyg didelės, tai skaitmeniškai vertinant dalines išvestines, galima gauti beprasmius rezultatus.

Netiesinio programavimo metodų aptarimas

- Paprasčiausi yra uždaviniai su diferencijuojamomis tikslo funkcijomis ir tiesiniais apribojimais.
- Jiems spręsti sukurta daug efektyvių metodų ir juos realizuojančios programinės įrangos.
- Uždaviniai su tiesiniais apribojimais netgi paprastesni už uždavinius be apribojimų ta prasme, kad dėl ribojimų sumažėja leistinosios aibės dimensija.
- Uždaviniams su tiesiniais apribojimais efektyvūs projekcijų ir redukcijų metodai, nes šie metodai realizuojami nesudėtingomis matricų daugybos operacijomis.
- Lagrange'o funkcijų metodai taip pat tinka minimizavimo uždaviniams su tiesiniais apribojimais.
- Tais atvejais, kai tikslo funkcija daugiaekstremė arba jai būdingi kitokie nereguliarumai, retai pavyksta pasinaudoti tiesinių apribojimų specifika.

Netiesinio programavimo metodų aptarimas

- Lokaliojo minimizavimo su netiesiniais apribojimais uždaviniams, kai tikslo ir apribojimų funkcijos diferencijuojamos, o kintamųjų nelabai daug (iki kelių šimtų), efektyviausi yra Lagrange'o funkcijų metodai.
- Jie visapusiškai ištyrinėti, juos realizuojančios kompiuterių programos eksploatuojamos ilgus metus.
- Todėl programų konstrukcija yra išbaigta, sukurti gana tobuli pagalbinių uždavinių sprendimo metodai.
- Tačiau šie metodai nelabai tinka tais atvejais, kai tikslo ar apribojimų funkcijos nediferencijuojamos.
- Jei skaičiavimo paklaidos pernelyg didelės, tai skaitmeniškai vertinant dalines išvestines, galima gauti beprasmius rezultatus.

Netiesinio programavimo metodų aptarimas

- Svarbi efektyvaus netiesinio programavimo metodų panaudojimo sąlyga yra tinkamas tikslo ir apribojimų funkcijų bei nepriklausomų kintamųjų mastelio parinkimas.
- Teoriškai metodai dažniausiai invariantiniai mastelių atžvilgiu, tačiau garantuoti, kad šią savybę turės ir jų realizacijos, negalima.
- Viena iš priežasčių ta, kad kompiuterio programos vykdo veiksmus ne tik su santykiniais bet ir su absoliučiais dydžiais.
- Pavyzdžiui, kompiuteriu minimizuojant ta pačia gradientinio tipo metodą realizuojančia kompiuterio programa funkcijas $f(X)$ ir $10^{-20}f(X)$, vargu ar galima tikėtis to paties atsakymo (suprantama, atsižvelgiant į funkcijos reikšmės mastelį) jau vien dėl to, kad antrajai funkcijai daugelis taškų bus laikoma optimaliais dėl mažesnės už kompiuterio programoje užfiksuotas ribines gradiento normos reikšmes.

Netiesinio programavimo metodų aptarimas

- Beveik visiems algoritmams nepageidautina, kad funkcijos variacija būtų artima nuliui.
- Taip pat nepageidautinos didelio absoliutaus didumo funkcijos reikšmės.
- Kuriant taikomojo uždavinio matematinį modelį, rekomenduotina funkcijos reikšmėms parinkti tokį mastelį, kad jos minimumas būtų apie vienetą, o maksimalios reikšmės, pakeltos kubu, būtų ne didesnės už maksimalų kompiuterio skaičių.
- Sudėtingiau parinkti nepriklausomų kintamųjų ir apribojimų funkcijų mastelius.
- Gerai apibrėžta laikoma tokia funkcija, kurios nepriklausomų kintamųjų vienodi pokyčiai sukelia tos pačios eilės funkcijos prieaugius.

Netiesinio programavimo metodų aptarimas

- Uždaviniams su apribojimais, kaip ir be jų, viena iš pagrindinių rekomendacijų – panaudoti kuo išsamesnę informaciją apie funkcijų išvestines.
- Kai tikslo ir netiesinės apribojimų funkcijos diferencijuojamos, efektyviausi yra Lagrange'o funkcijų metodai.
- Tą patvirtina gausūs eksperimentinių tyrimų rezultatai paskelbti literatūroje.
- Tačiau šie metodai netinka uždaviniams, kurių tikslo funkcija neapibrėžta už leistinosios srities ribų.
- Tokiu atveju vartotinas barjerų metodas.

Netiesinio programavimo metodų aptarimas

- Daug sudėtingiau parinkti efektyvų metodą, kai funkcijų reikšmes tegalima apskaičiuoti duotuoju algoritmu, kurio paklaidos tokios didelės, kad skaitmeniškai diferencijuoti beprasmiška.
- Tada apribojimai įvertinami baudos arba barjerų metodais, o uždavinys be apribojimų sprendžiamas pagal vieną iš tiesioginio ieškojimo algoritmų.
- Kuriant tokius metodus, daug ką tenka spręsti euristiškai. Todėl sunku apibrėžti jų racionalaus panaudojimo sritį.

Netiesinio programavimo metodų aptarimas

- Daugiaekstremiai uždaviniai su bendro pobūdžio netiesiniais apribojimais baudos metodu dažniausiai pakeičiami uždaviniais su paprastais apribojimais, kuriems skirta dauguma globaliojo minimizavimo metodų.
- Šis būdas grindžiamas tuo, kad kuriant globaliuosius metodus, apie tikslo funkciją paprastai daromos tik labai bendros prielaidos.
- Taigi natūralu perkelti į tikslo funkciją visus uždavinio sunkumus, nes pagrindinės prielaidos lieka patenkintos.
- Kadangi baudos daugiklis parenkamas gana laisvai, o globaliojo minimizavimo metodais minimumas nustatomas labai apytiksliai, tai tokiu metodu gautą sprendinį verta patikslinti lokaliojo netiesinio programavimo metodu, kuris parenkamas atsižvelgiant į tikslo funkcijos ir apribojimų savybes.

Netiesinio programavimo metodų aptarimas

- Kai kuriuose, dažniausiai atsitiktinio globaliojo ieškojimo, metoduose apribojimai vertinami taip: minimizuojama hiperstačiakampyje, aprašytame apie leistinąją sritį.
- Jei taškas patenka į leistinąją sritį, imama tikslo funkcijos reikšmė, jei ne – koks nors didelis skaičius.
- Tačiau šis metodas visiškai netinka dažnai pasitaikantiems uždaviniams, kurių leistinosios srities hipertūris yra labai mažas palyginti su aprašyto hiperstačiakampio, t.y. tikimybė pataikyti į leistinąją sritį artima nuliui.
- Beje šį metodą galima interpretuoti kaip baudos metodą su trūkia baudos funkcija.

Netiesinio programavimo metodų aptarimas

- Kartais kyla nesusipratimų dėl gauto optimizavimo uždavinio sprendinio tikslumo.
- Dažnas nepatyręs vartotojas, nurodęs baigimo sąlygų parametrą ε, tikisi, kad rastas sprendinys skiriasi nuo tikrojo ne daugiau ε.
- Tokia nuomonė susiformuoja naudojantis paprastesnių uždavinių sprendimo algoritmais, kurie garantuoja randamo sprendinio tikslumą.
- Pavyzdžiui, pagal standartines sinuso arba kvadratinės šaknies radimo paprogrames funkcijos reikšmė apskaičiuojama mašininiu tikslumu.
- Netiesinio programavimo metodai gali garantuoti randamo sprendinio tikslumą tik labai specialiais atvejais.
- Praktiškai baigimo sąlygos apibrėžiamos keliais būdais.

Netiesinio programavimo metodų aptarimas

- Gradientinio tipo metodų viena iš baigimo sąlygų yra būtinų minimumo sąlygos patenkinimas metodo vartotojo užduotu tikslumu.
- Tačiau tokias sąlygas (ypač neiškiliųjų funkcijų atveju) gali tenkinti taškai, esantys toli nuo lokaliojo minimumo taško.
- Todėl sustojimo sąlyga gali būti tenkinama ne tik lokaliojo minimumo aplinkoje, bet ir nutolusiuose nuo jo “spąstuose”.
- Kitos, ypač tiesioginio ieškojimo metodų, sustojimo sąlygos išreiškia minimizavimo proceso sulėtėjimą, t.y. menką rastojo taško bei funkcijos reikšmės kitimą keliose iš eilės einančiose iteracijose.
- Tai būdinga lokaliojo minimumo aplinkai, bet vėlgi ne tik jai.
- Galima pabandyti iš gauto arba kito taško minimizuoti tuo pačiu metodu su kitais parametrais arba kitu metodu.
- Dažnai sprendinio analizei būna naudinga tikslo ir apribojimų funkcijų pjūvius per gautąjį tašką pavaizduoti grafiškai.