FAKULTA MATEMATIKY, FYZIKY

A INFORMATIKY

UNIVERZITY KOMENSKÉHO

v Bratislave

DIPLOMOVÁ PRÁCA

2004 **Peter ČERNICKÝ**

FAKULTA MATEMATIKY, FYZIKY
A INFORMATIKY
UNIVERZITY KOMENSKÉHO
v Bratislave

DIPLOMOVÁ PRÁCA

Metódy rozšírených Lagrangeových funkcií v konvexnom programovaní.

Autor: Peter ČERNICKÝ
Vedúci diplomovej práce: Doc. RNDr. Milan HAMALA, CSc.

Bratislava 2004

Čestne vyhlasujem, že som túto diplomovú prácu
vypracoval samostatne len s použitím uvedenej literatúry.

....

V Bratislave 31. marca 2004 Peter ČERNICKÝ

Poďakovanie.

Aj touto cestou ďakujem Doc. RNDr. Milanovi HAMALOVI, CSc. za cenné rady a diskusie pri písaní tejto diplomovej práce a Prof. Olimu T. MANGASARIANOVI za sprístupnenie literatúry.

Obsah.

Úvod.

S rýchlym rozvojom na poli ekonómie, vedy a techniky po Druhej svetovej vojne bolo treba čeliť stále zložitejším optimalizačným problémom medzi ktoré patrili aj rôzne typy úloh na viazaný extrém. Toto spôsobilo vznik a postupný vývin nového odvetvia matematiky – *„nelineárneho programovania“*. Zvýšená potreba riešiť tieto stále novo sa vyvíjajúce úlohy nelineárneho programovania mala za následok vznik rôznych algoritmov na ich riešenie. Väčšina z nich sa však ukázala ako nevhodná na praktické použitie. Takto to bolo aj pri rôznych dovtedy existujúcich algoritmoch, používajúcich penalizáciu porušenia ohraničení v účelovej funkcii. Začiatkom šesťdesiatych rokov Everett [13] ukázal, že aj použitie klasickej Lagrangeovej funkcie na hľadanie viazaného optima je nevhodné. Preto aké bolo prekvapenie, keď Hestenes [16] a nezávisle na ňom aj Powell [22] v 1969 navrhli na riešenie úlohy na viazaný extrém s ohraničeniami v tvare rovností nový typ Lagrangeovej funkcie spolu aj s príslušným algoritmom (Hestenes). Táto funkcia obsahovala vo svojom vyjadrení kvadratický výraz penalizujúci porušenie ohraničení. Dosahované výsledky získané použitím tohto algoritmu na úlohu nelineárneho programovania s ohraničeniami v tvare rovností boli veľmi dobré, no neskôr sa ukázalo, že táto funkcia nie je veľmi vhodná na riešenie úloh viazanej optimalizácie s ohraničeniami v tvare nerovností (Miele, Moseley, Cragg [21]). Toto malo za následok vznik novej triedy *„rozšírených Lagrangeových funkcií“* zažívajúcej veľký „boom“ hlavne v sedemdesiatych rokoch dvadsiateho storočia. V roku 1970 Rockafellar [23] predstavil, spolu aj s modifikovaným algoritmom, rozšírenú Lagrangeovu funkciu vhodnú na riešenie úloh s ohraničeniami v tvare nerovností, ktorú odvodil priamo z funkcie navrhnutej Hestenesom. V roku 1971 Arrow, Gould a Howe [1] zaviedli všeobecnú podtriedu rozšírených Lagrangeových funkcií, na ktoré sa však vzťahovala podmienka nezápornosti podobne, ako tomu bolo pri klasickej Lagrangeovej funkcii pre úlohu s ohraničeniami v tvare nerovností sformulovanej v roku 1951 Kuhnom – Tuckerom [18]. V roku 1973 bola Mangasarianom [20] predstavená nová, všeobecná rozšírená Lagrangeova funkcia, ktorá je dvakrát spojite diferencovateľná.

Ako sme už spomínali, trieda rozšírených Lagrangeových funkcií sa tešila veľkému záujmu hlavne v sedemdesiatych rokoch dvadsiateho storočia, o čom svedčí aj zvýšená publikačná činnosť. Z tohoto obdobia by sme mohli okrem už vyššie zmienených diel spomenúť: Di Pillo, Grippo [9], Han [15], Hestenes [17], Rockafellar [24, 25]. V osemdesiatych rokoch dvadsiateho storočia patrili medzi hlavných predstaviteľov tohto smeru Bertsekas [2, 3], Boggs, Tolle [5], Di Pillo, Grippo [10, 11].

Aj keď sa už v súčasnosti trieda rozšírených Lagrangeových funkcií neteší takej pozornosti ako tomu bolo v nedávnej minulosti, stále možno nájsť medzi najnovšími publikáciami aj články z tejto oblasti: Bertsekas, Ozdaglar [4], Conn, Gould, Toint [8], Di Pillo, Lucidi [12], Lewis, Torczon [19], Rockafellar [26], ... A tak aj napriek tomu, že v súčasnosti sú v centre pozornosti mnohé modernejšie metódy, nemožno ani v tomto smere vývoj považovať za úplne ukončený.

V tejto diplomovej práci sa budeme venovať niektorým vybraným typom rozšírených Lagrangeových funkcií. Diplomová práca je rozdelená do troch častí. V prvej časti si sa oboznámime so základnými pojmami a formuláciámi. V druhej časti sa venujeme motivácii vzniku triedy rozšírených Lagrangeových funkcií, postupne si predstavíme viacero funkcií z tejto triedy, u niektorých aj s algoritmami na ich použitie. V poslednej, tretej časti, sa venujeme numerickým experimentom a stručnému popisu generátora úloh, ktorým sme generovali úlohy, na ktorých potom jednotlivé experimenty prebiehali.

1. Symbolika, základné pojmy a formulácie.

V tejto časti si zadefinujeme najprv niekoľko základných pojmov, slúžiacich na lepší prehľad v danej problematike, prípadne ktoré budú neskôr použité a zavedieme symboliku, aby sme sa vyhli prípadným ťažkostiam a nedorozumeniam. Neskôr si sformulujeme úlohu konvexného programovania a niektoré základné, prípadne povšimnutiahodné vlastnosti, súvisiace s tou-ktorou formuláciou.

DEF 1: *Funkcia* $f:\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ *je* <u>*triedy* C^k</u>*, ak je k-krát spojite diferencovateľná (na* $\mathbb{R}^n$*).*

Nech $f:\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$. Pod gradientom funkcie $f(\mathbf{x})$ budeme rozumieť n-rozmerný stĺpcový vektor $\nabla f(\mathbf{x}) = \left(\frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_1}, \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_2}, ..., \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_n} \right)$.

Symbolom.

$$\nabla^2 f(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_1^2}, \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_1 \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_n \partial x_1}, \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_n \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_n^2} \end{pmatrix}$$

budeme označovať *Hessovu maticu*[1] dimenzie $n \times n$.

Podobne, ak $f(\mathbf{x}, \mathbf{y}): \mathbb{R}^{n+m} \to \mathbb{R}$, potom

$$\nabla_x^2 f(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f(\mathbf{x}, \mathbf{y})}{\partial x_1^2}, \frac{\partial^2 f(\mathbf{x}, \mathbf{y})}{\partial x_1 \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f(\mathbf{x}, \mathbf{y})}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f(\mathbf{x}, \mathbf{y})}{\partial x_n \partial x_1}, \frac{\partial^2 f(\mathbf{x}, \mathbf{y})}{\partial x_n \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f(\mathbf{x}, \mathbf{y})}{\partial x_n^2} \end{pmatrix}$$

je matica druhých parciálnych derivácií podľa premennej $\mathbf{x} = (x_1, x_2, ..., x_n)^T$.

[1] V prípade, že funkcia $f:\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ je triedy C^2, tak (Hessova) matica druhých parciálnych derivácií je symetrická, a teda nezáleží na poradí, v akom sme jednotlivé derivácie vykonali.

Nech teraz $\mathbf{f(x)}$ je vektorová funkcia, t.j. $\mathbf{f}:\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$.

Píšeme $\mathbf{f(x)} = (f_1(\mathbf{x}), f_2(\mathbf{x}), ..., f_m(\mathbf{x}))^T$, kde T v hornom indexe označuje transponovanie. Deriváciu vektorovej funkcie $\mathbf{f(x)}$ podľa všetkých premenných budeme označovať

$$\nabla \mathbf{f}(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1(\mathbf{x})}{\partial x_1}, \frac{\partial f_1(\mathbf{x})}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_1(\mathbf{x})}{\partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_m(\mathbf{x})}{\partial x_1}, \frac{\partial f_m(\mathbf{x})}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_m(\mathbf{x})}{\partial x_n} \end{pmatrix}^T,$$

čo je transponovaná *Jacobiho matica*.

Parciálna derivácia vektorovej funkcie $\mathbf{f(x)}$ podľa j-tej premennej je m-rozmerný stĺpcový vekor a budeme ju označovať symbolom

$$\frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{x})}{\partial x_j} = \left(\frac{\partial f_1(\mathbf{x})}{\partial x_j}, \frac{\partial f_2(\mathbf{x})}{\partial x_j}, ..., \frac{\partial f_m(\mathbf{x})}{\partial x_j} \right)^T.$$

Podobne, ak $\mathbf{f(x,y)}:\mathbb{R}^{n+m} \to \mathbb{R}^k$, potom

$$\nabla_x f(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1(\mathbf{x},\mathbf{y})}{\partial x_1}, \frac{\partial f_1(\mathbf{x},\mathbf{y})}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_1(\mathbf{x},\mathbf{y})}{\partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_k(\mathbf{x},\mathbf{y})}{\partial x_1}, \frac{\partial f_k(\mathbf{x},\mathbf{y})}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_k(\mathbf{x},\mathbf{y})}{\partial x_n} \end{pmatrix}^T$$

označuje parciálnu deriváciu vektorovej funkcie $\mathbf{f(x,y)}$ podľa premennej $\mathbf{x}$.

Symbolom $\|\cdot\|$ budeme označovať klasickú Euklidovskú normu v $\mathbb{R}^n$.

Nech $\mathbf{x} = (x_1, x_2, ..., x_n)^T$, $\mathbf{y} = (y_1, y_2, ..., y_n)^T$. Zápisom $\mathbf{x} \le 0$ budeme označovať „celkovú nekladnosť" vektora **x**, teda $\forall i = 1,2,...,n$ je $x_i \le 0$. Zápisom $\max[\mathbf{x},\mathbf{y}]$ chápeme vektor nasledujúceho tvaru:

$$\max[\mathbf{x},\mathbf{y}] = (\max[x_1, y_1], \max[x_2, y_2], ..., \max[x_n, y_n])^T.$$

DEF 2: *Nech* $f: X \to \mathbb{R}$, $g_i: X \to \mathbb{R}$; $i = 1,2,...,m$, *kde* $X \ne \varnothing$, $X \subseteq \mathbb{R}^n$.

<u>Štandardnou úlohou nelineárneho programovania</u> nazývame úlohu nasledovného tvaru:

(ŠÚ) $\quad$ ***Min*** $\quad \{ f(\mathbf{x}) \mid g_i(\mathbf{x}) \le 0;\ i = 1,2,...,m \}$.

Množinu prípustných riešení (ŠÚ) budeme označovať $\mathcal{F}$. Teda

$$\mathcal{F} = \{\mathbf{x} \in X \mid g_i(\mathbf{x}) \le 0; i = 1,2,...,m\}.$$

Funkciu $f(\mathbf{x})$ nazývame *účelovou funkciou* a funkcie $g_i(\mathbf{x})$ nazývame *ohraničeniami*.

Ak úloha nelineárneho programovania nie je v štandardnom tvare, vieme ju na takýto previesť a to nasledovnými úpravami:

T1 Každú maximalizačnú úlohu prevedieme na ekvivalentnú (ŠÚ) tak, že budeme minimalizovať funkciu $-f(\mathbf{x})$.

T2 ohraničenia v tvare k rovností $g_j(\mathbf{x}) = 0$; $j = 1,2,...,k$ nahradíme nasledujúcimi ekvivalentnými k+1 nerovnosťami:

$$g_1(\mathbf{x}) \le 0, \quad g_2(\mathbf{x}) \le 0, ..., \ g_k(\mathbf{x}) \le 0, \quad -\sum_{j=1}^{k} g_j(\mathbf{x}) \le 0 \ .$$

Poznámka: Mohli by sme sa spýtať, prečo dávať prednosť ohraničeniam v tvare nerovností pred ohraničeniami v tvare rovností, keď predsa m ohraničení $g_i(\mathbf{x})$ z úlohy (ŠÚ) vieme previesť pridaním doplnkovej premennej $z_i \in \mathbb{R}$; $i = 1,2,...,m$ na m ohraničení v tvare rovností

$$g_1(\mathbf{x}) + z_1^2 = 0, \quad g_2(\mathbf{x}) + z_2^2 = 0, ..., \quad g_m(\mathbf{x}) + z_m^2 = 0 \ ,$$

a teda ako vidíme počet ohraničení sa nezväčší. To je síce pravda, ale v takejto úlohe by nám vystupovalo n+m premenných, čím by sa nám v prípade veľkého počtu nerovností veľmi zväčšila dimenzia úlohy, čo by mohlo byť zdrojom neskorších ťažkostí, prípadne nepresností pri hľadaní optimálneho riešenia takejto úlohy. Ďalší dôvod prečo dávame prednosť takémuto tvaru (ŠÚ) si ukážeme neskôr.

DEF 3: *Pre (ŠÚ)*[2] *definujeme na definičnom obore* $X \times \mathbb{R}_+^m$ *klasickú Lagrangeovu funkciu*:

$$(1.1) \qquad L(\mathbf{x},\mathbf{y}) = f(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^{m} y_i g_i(\mathbf{x}); \ \mathbf{x} \in X, \ y_i \ge 0; \ i = 1,2,...m \ ,$$

[2] Pre úlohu min $f: X \to \mathbb{R}$, $X \subseteq \mathbb{R}^n$ s r ohraničeniami v tvare rovností $g_i(\mathbf{x}) = 0$ bude Lagrangeova funkcia $L(\mathbf{x},\mathbf{y})$ vyzerať tak isto ako pre (ŠÚ), len je definovaná na inom definičnom obore, konkrétne na $X \times \mathbb{R}^m$, teda vektor Lagrangeových multiplikátorov $\mathbf{y}$ nemusí byť nezáporný:

$$L(\mathbf{x},\mathbf{y}) = f(\mathbf{x}) + \mathbf{y}^T g(\mathbf{x}) \ , \ \mathbf{x} \in X, \ \mathbf{y} \in \mathbb{R}^m .$$

prípadne vo vektorovom tvare

(1.2) $L(\mathbf{x},\mathbf{y}) = f(\mathbf{x}) + \mathbf{y}^T g(\mathbf{x});\ \mathbf{x} \in X,\ \mathbf{y} \geq \mathbf{0}$.

Vektor $\mathbf{y} = (y_1, y_2, ..., y_m)^T$ *sa nazýva vektor Lagrangeových multiplikátorov.*

DEF 4: *Ohraničenie* $g_i(\mathbf{x})$ *budeme nazývať aktívnym v bode* $\overline{\mathbf{x}}$, *ak* $g_i(\overline{\mathbf{x}}) = 0$. *Množinu indexov aktívnych ohraničení v bode* $\overline{\mathbf{x}}$ *budeme označovať* $I_0(\overline{\mathbf{x}})$. *Teda*

$$I_0(\overline{\mathbf{x}}) = \{ i \mid g_i(\overline{\mathbf{x}}) = 0;\ i = 1,2,...,m \} .$$

Pre (ŠÚ) vieme sformulovať nutné podmienky optimality prvého rádu[3], známe pod názvom *KUHN-TUCKEROVE podmienky* (skrátene KT podmienky) [18], niekedy nazývané aj *KARUSH-KUHN-TUCKEROVE podmienky* (KKT podmienky), majúc na mysli, že k týmto podmienkam sa ako prvý dopracoval vo svojej práci Karush už v roku 1939. O KT podmienkach pre (ŠÚ) nám hovorí nasledovná veta:

VETA 1 (KUHN-TUCKER 1951): *Nech funkcie* $f(\mathbf{x})$, $g_i(\mathbf{x});\ i = 1,2,...,m$ *sú triedy* C^1, $\hat{\mathbf{x}}$ *je optimálnym riešením (ŠÚ) a nech vektory* $\nabla g_i(\hat{\mathbf{x}})$ *sú lineárne nezávislé*[4] *pre* $i \in I_0(\hat{\mathbf{x}})$.

Potom existuje vektor Lagrangeových multiplikátorov $\hat{\mathbf{y}} \in \mathbb{R}^m$, *že platí:*

(1.3) $$\nabla f(\hat{\mathbf{x}}) + \sum_{i=1}^{m} \hat{y}_i \nabla g_i(\hat{\mathbf{x}}) = \mathbf{0} ,$$

(1.4) $$g_i(\hat{\mathbf{x}}) \leq 0 \ ;\ \forall i = 1,2,...,m ,$$

---

[3] Ak sú funkcie $f(\mathbf{x})$ a $g_i(\mathbf{x});\ i = 1,2,...,m$ triedy C^1, pričom gradienty všetkých ohraničení sú lineárne nezávislé, potom nutné podmienky optimality prvého rádu pre úlohu nelineárneho programovania s ohraničeniami v tvare rovností (nazývané aj *LAGRANGEOVE PODMIENKY*) budú vyzerať:

$$\nabla_x L(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \mathbf{0}$$
$$\nabla_y L(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \mathbf{0} .$$

[4] V originálnej verzii vety 1 vystupoval slabší predpoklad – a síce, že pre $\hat{x}$ platí: *pre všetky nenulové riešenia* y *sústavy* $\nabla g_i(\hat{x})^T y \leq 0;\ i \in I_0(\hat{x})$, *existuje diferencovateľná krivka* $h(t): \mathbb{R} \to \mathbb{R}^n$; $0 \leq t \leq 1$, *ktorá celá leží v množine prípustných riešení, teda* $g_i(h(t)) \leq 0;\ i = 1,2,...,m$ *a pre ktorú platí* $h(0) = \hat{\mathbf{x}}$, $\frac{dh(0)}{dt} = \lambda \mathbf{y}$, $\lambda > 0$. V takomto znení vety 1 by však Lagrangeov multiplikátor $\hat{\mathbf{y}}$ nemusel byť daný jednoznačne oproti tomu, ktorý vystupuje v nami použitej vete 1. Toto je však, ako vidieť, dosť „krkolomná“ definícia a preto kôli ľahšej overiteľnosti sa ako pre nás vhodnejší javí predpoklad lineárnej nezávislosti použitý vo vete.

(1.5) $$\hat{y}_i g_i(\hat{\mathbf{x}}) = 0 \ ; \ \forall i = 1,2,...,m \ ,$$

(1.6) $$\hat{y}_i \geq 0 \ ; \ \forall i = 1,2,...,m \ .$$

Takúto dvojicu $(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}})$ *nazývame* *KT pár* *a vektor* $\hat{\mathbf{y}}$ *vektorom KT multiplikátorov*. *Podmienku lineárnej nezávislosti vektorov* $\nabla g_i(\hat{\mathbf{x}})$ *nazývame* *podmienkou regularity*.

DEF 5: *Hovoríme, že bod* $(\overline{\mathbf{x}}, \overline{\mathbf{y}})$ *spĺňa postačujúce podmienky druhého rádu pre (ŠÚ), ak spĺňa KT podmienky a zároveň* $\forall \mathbf{z} \in \mathbb{R}^n$, $\mathbf{z} \neq \mathbf{0}$ *spĺňajúce*

(1.7) $$\nabla g_i(\overline{\mathbf{x}})^T \mathbf{z} = \mathbf{0}, \ i \in \{ i \in I_0(\overline{\mathbf{x}}) \mid \overline{y}_i > 0 \} \ ,$$

(1.8) $$\nabla g_i(\overline{\mathbf{x}})^T \mathbf{z} \leq \mathbf{0}, \ i \in \{ i \in I_0(\overline{\mathbf{x}}) \mid \overline{y}_i = 0 \}$$ [5]

platí $\mathbf{z}^T \nabla_x^2 L(\overline{\mathbf{x}}, \overline{\mathbf{y}}) \mathbf{z} > 0$.

DEF 6: *Hovoríme, že bod* $(\overline{\mathbf{x}}, \overline{\mathbf{y}})$ *spĺňa silnú podmienku komplementarity pre ŠÚ, ak*

(1.9) $$\overline{y}_i \neq 0, \ \forall i \in I_0(\overline{\mathbf{x}})$$ [6].

DEF 7: *Množinu* $K \subseteq \mathbb{R}^n$ *nazývame konvexnou množinou, ak* $\forall \lambda$ *také, že* $0 < \lambda < 1$, *platí:*

$$\lambda \mathbf{x} + (1-\lambda) \mathbf{y} \in K \ .$$

DEF 8: *Funkciu* $f(\mathbf{x}) : K \to \mathbb{R}$, $K \subseteq \mathbb{R}^n$ *konvexná, naývame konvexnou funkciou, ak* $\forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in K$, $\mathbf{x} \neq \mathbf{y}$ *a* $\forall \lambda$ *také, že* $0 < \lambda < 1$ *platí:*

$$f(\lambda \mathbf{x} + (1-\lambda)\mathbf{y}) \leq \lambda f(\mathbf{x}) + (1-\lambda) f(\mathbf{y}).$$

VETA 2: *Každé lokálne minimum konvexnej funkcie je zároveň aj jej globálnym minimom a množina všetkých miním konvexnej funkcie tvorí konvexnú množinu.*

[5] Pre úlohu s ohraničeniami v tvare rovností sú podmienky rovnaké ako (1.7) a (1.8), len s tým rozdielom, že platí pre všetky indexy $i = 1,2,...,m$.

[6] Pre úlohu s ohraničeniami v tvare rovností je striktná podmienka (1.9) rovnaká, len s tým rozdielom, že platí pre všetky indexy $i = 1,2,...,m$.

VETA 3: *Nech funkcia* $g(\mathbf{x}) : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ *je konvexná na* $\mathbb{R}^n$.

Potom $\forall b \in \mathbb{R}^n$ *je množina* $B = \{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid g(\mathbf{x}) \le b \}$ *konvexná a uzavretá. Množina B sa niekedy nazýva aj úrovňová množina.*

V ďaľšom texte, pokiaľ nebude spomenuté ináč, budeme predpokladať, že funkcie $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, $g_i : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ sú triedy C^1.

Poznámka: Vieme, že prienik konvexných množín je tiež konvexná množina. Množinu $K = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid g_i(\mathbf{x}) \le 0; \ i = 1,2,...,m\}$ si môžeme napísať ako

$K = \{\mathbf{x} \mid g_1(\mathbf{x}) \le 0\} \cap \{\mathbf{x} \mid g_2(\mathbf{x}) \le 0\} \cap ... \cap \{\mathbf{x} \mid g_m(\mathbf{x}) \le 0\}$,

a teda množina prípustných riešení (ŠÚ) je konvexná, ak $g_i(\mathbf{x})$ sú konvexné funkcie.

Poznajúc všetky potrebné pojmy môžme pristúpiť k formulácii úlohy, ktorá, ako už napovedá samotný názov tejto práce, nás bude najviac zaujímať – a to k formulácii štandardnej úlohy konvexného programovania.

DEF 9: *Nech funkcie* $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, $g_i : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ sú ***konvexné***.

Štandardnou úlohou konvexného programovania nazývame úlohu tvaru

$$\textbf{(KÚ)} \qquad \textbf{Min} \quad \{ f(\mathbf{x}) \mid g_i(\mathbf{x}) \le 0; \ i = 1,2,...,m \} .$$

Poznámka: Mohli by sme si položiť jednoduchú otázku a síce prečo nás má zajímať práve úloha konvexného programovania? Odpoveď je ešte jednoduchšia – lebo má pekné vlastnosti. O aké vlastnosti ide? Z toho, čo vieme doteraz, môžme vyčítať tieto dve:

I. *každé (lokálne) optimálne riešenie (KÚ) je zároveň aj jej globálnym riešením (pričom množina jej optimálnych riešení je konvexná).*
II. *množina prípustných riešení* $\mathcal{F}$ *je konvexná a uzavretá, a teda každý bod nachádzajúci sa na úsečke tvorenej* $\forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathcal{F}$ *tiež patrí do množiny prípustných riešení.*

naviac platí ešte aj

III. KT podmienky pre (KÚ) sú nutnými, a zároveň aj postačujúcimi podmienkami pre optimálne riešenie $\hat{\mathbf{x}}$[7].

Keďže o všetkých zúčastnených funkciách predpokladáme, že sú konvexné, môžme si ukázať dôvod práve na takúto formuláciu (KÚ). Ak by sme mali naformulovanú úlohu pomocou ohraničení $g_i(\mathbf{x})$ v tvare rovností, tak aby sme mohli povedať, že táto úloha je konvexná, museli by byť tieto ohraničenia *afinné* a to kôli tomu, aby po vykonaní transformácie T2 boli všetky nerovnosti (resp. funkcie vzniknuté takouto syntézou pôvodných ohraničení) konvexné. Afinnosť takýchto ohraničení by nás však veľmi obmedzovala a tak by sme takouto formuláciou mohli pokryť iba nepatrnú časť konvexných úloh (KÚ).

[7] Na to, aby platili predchádzajúce tri vlastnosti stačí predpokladať *pseudokonvexnosť* účelovej funkcie $f(\mathbf{x})$ (*funkcia* $f:\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, $f \in C^1$ *je pseudokonvexná, ak* $\forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$ *platí:*

$$\nabla f(\mathbf{y})^T(\mathbf{x}-\mathbf{y}) \geq 0 \quad \Rightarrow \quad f(\mathbf{x}) \geq f(\mathbf{y}) \;)$$

a *kvázikonvexnosť* ohraničení $g_i(\mathbf{x})$ (*funkcia* $g:\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ *sa nazýva kvázikonvexná, ak* $\forall \mathbf{x} \neq \mathbf{y}$, $0 < \lambda < 1$ *platí*

$$f(\lambda\mathbf{x} + (1-\lambda)\mathbf{y}) \leq max\{f(\mathbf{x}), f(\mathbf{y})\}\;)$$

Vo všeobecnosti však neexistujú jednoduché pravidlá pre syntézu týchto funkcií, v tom zmysle, že napríklad súčet dvoch pseudokonvexných funkcií nemusí byť pseudokonvexná funkcia. Tieto vlastnosti sa tak tažšie overujú ako konvexnosť a preto pre naše potreby budeme radšej predpokladať konvexnosť u všetkých zúčastnených funkcií. Platí úplnosť však ešte dodáme, že platí nasledovná implikácia: *konvexnosť* $\Rightarrow$ *pseudokonvexnosť* $\Rightarrow$ *kvázikonvexnosť*.

2. Rozšírené Lagrangeove funkcie.

2.1 Úvod do problematiky.

Vďaka vlastnosti III. z predchádzajúcej časti by sme sa mohli domnievať, že na nájdenie optimálneho riešenia (KÚ), spĺňajúcej podmienku regularity, nám stačí nájsť také $\hat{\mathbf{x}}$ a spolu s ním taký vektor KT multiplikátorov $\hat{\mathbf{y}}$, ktoré by spĺňali podmienky (1.3) – (1.6). To je síce pravda, no ukazuje sa, že úloha „stačí nájsť“ vôbec nie je taká jednoduchá, ako by sa na prvý pohľad mohlo zdať. Vyjadrime si tieto podmienky pomocou Lagrangeovej funkcie (1.2). Máme:

(2.1) $$\nabla_x L(\hat{\mathbf{x}},\hat{\mathbf{y}}) = \mathbf{0} \ ,$$

(2.2) $$\nabla_y L(\hat{\mathbf{x}},\hat{\mathbf{y}}) \le \mathbf{0} \ ,$$

(2.3) $$\hat{\mathbf{y}}^T \nabla_y L(\hat{\mathbf{x}},\hat{\mathbf{y}}) = \mathbf{0} \ ,$$

(2.4) $$\hat{\mathbf{y}} \ge \mathbf{0} \ .$$

Ak použijeme pojem aktívneho ohraničenia v bode $\hat{\mathrm{x}}$ z Definície 4, t. j.

$\mathrm{I}_0(\hat{\mathbf{x}}) = \{\mathrm{i} \mid \mathrm{g}_\mathrm{i}(\hat{\mathbf{x}}) = 0; \mathrm{i} = 1,2,...,\mathrm{m}\}$

a vyjadríme si tieto vzťahy pomocou jednotlivých parciálnych derivácií dostaneme:

(2.5) $$\frac{\partial L(\hat{\mathbf{x}},\hat{\mathbf{y}})}{\partial x_j} = 0 \ ; \ j = 1,2,...,n \ ,$$

(2.6) $$\frac{\partial L(\hat{\mathbf{x}},\hat{\mathbf{y}})}{\partial y_i} = g_i(\hat{\mathbf{x}}) = 0 \ ; \ i \in I_0(\hat{\mathbf{x}}) \ ,$$

(2.7) $$\hat{\mathbf{y}}_i \ge 0 \ ; \ i \in I_0(\hat{\mathbf{x}}) \ ,$$

(2.8) $$\frac{\partial L(\hat{\mathbf{x}},\hat{\mathbf{y}})}{\partial y_i} = g_i(\hat{\mathbf{x}}) < 0 \ ; \ i \in \{1,2,...,m\} - I_0(\hat{\mathbf{x}}) \ ,$$

(2.9) $$\hat{\mathbf{y}}_i = 0 \ ; \ i \in \{1,2,...,m\} - I_0(\hat{\mathbf{x}}) \ .$$

Predpokladajme, že poznáme množinu aktívnych ohraničení $\mathrm{I}_0(\hat{\mathbf{x}})$. Keďže každé optimálne riešenie spolu s príslušným vektorom KT multiplikátorov musí spĺňať vzťahy (2.5) a (2.6), mohli by sme sa nechať zlákať nájsť takéto riešenie hľadaním riešenia tejto sústavy rovníc. Tieto rovnice bývajú zväčša nelineárne a nájsť riešenie takéhoto systému môže byť zložitejšie, ako nájsť optimálne rišenie (KÚ) pomocou iných metód. Keďže však chceme ešte len nájsť riešenie $\hat{\mathbf{x}}$, my v skutočnosti nepoznáme množinu indexov aktívnych ohraničení $I_0(\hat{\mathbf{x}})$ vo vzťahu (2.6) a preto by sme museli vyriešiť tento systém pre všetky podmnožiny množiny indexov $\{1,2,...,m\}$ alebo lepšie povedané až pokiaľ by sa nám nepodarilo nájsť riešenie spĺňajúce aj (2.7)-(2.9), čo je konkrétne 2^m možností a pre veľký počet ohraničení m je toto obrovské číslo. Naviac, ako sme už práve spomenuli, ak sa nám predsa len podarí nájsť riešenie tohoto systému, treba ešte skontrolovať splnenie podmienok (2.7)-(2.9) a ak je splnené aj toto, tak až vtedy máme nájdené skutočné optimálne riešenie (KÚ). Ako však už bolo spomenuté, celý tento proces si môže vyžiadať veľké množstvo uskutočnených operácií a kvôli tomuto sa javí ako nevhodný pre riešenie (KÚ). Preto je nutné vydať sa inou cestou. Jednou z možností je zovšeobecniť definíciu klasickej Lagrangeovej funkcie $L(\mathbf{x},\mathbf{y})$. Ešte predtým však jedna potrebná definícia.

DEF 10: *Majme funkciu* $f(\mathbf{x},\mathbf{y}): X\times Y \to \mathbb{R}$, $\mathbf{x}\in X\subseteq \mathbb{R}^n$, $\mathbf{y}\in Y\subseteq\mathbb{R}^m$.

Hovoríme, že $(\hat{x},\hat{y})$ *je* <u>*sedlový bod typu minmax*</u> *funkcie* $f(\mathbf{x},\mathbf{y})$, *ak* $\forall\mathbf{x}\in X$, $\forall\mathbf{y}\in Y$ *platí:*

(2.10) $$f(\hat{\mathbf{x}},\mathbf{y})\le f(\hat{\mathbf{x}},\hat{\mathbf{y}})\le f(\mathbf{x},\hat{\mathbf{y}}) .$$

VETA 4 (ROODE 1969): *Nech* $f: X\to\mathbb{R}$, $X\subseteq\mathbb{R}^n$. *Uvažujme všeobecnú úlohu na viazaný extrém*

(2.11) $$\textbf{\textit{Min}}\ \{ f(\mathbf{x}) \mid \mathbf{x}\in M \},\ M\subseteq X .$$

Nech $Y\subseteq\mathbb{R}^m$ *a nech funkcia* $r: X\times Y\to\mathbb{R}$ *má nasledovné vlastnosti:*

R1 $\forall\mathbf{y}\in Y$, $\forall\mathbf{x}\in M$ *platí:* $r(\mathbf{x},\mathbf{y})\le 0$.

R2 $\exists\bar{\mathbf{y}}\in Y$, $\forall\mathbf{x}\in M$ *platí:* $r(\mathbf{x},\bar{\mathbf{y}})=0$.

R3 $\forall\mathbf{x}\notin M$ *platí:* $\sup_{y\in Y} r(\mathbf{x},\mathbf{y})=+\infty$.

Potom platí implikácia:

Ak $(\hat{\mathbf{x}},\hat{\mathbf{y}})$ *je sedlovým bodom typu minmax funkcie*

(2.12) $$\varphi(\mathbf{x},\mathbf{y})=f(\mathbf{x})+r(\mathbf{x},\mathbf{y})$$

na množine $X\times Y$, *tak* $\hat{\mathbf{x}}$ *je optimálnym riešením úlohy* (2.11).

Všimnime si, že v tejto vete sa nepredpokladá žiadna špeciálna vlastnosť účelovej funkcie $f(\mathbf{x})$, ani množiny prípustných riešení M a v tom spočíva zároveň aj jej veľká sila. Ak nájdeme sedlový bod funkcie (2.12) spĺňajúcej vyššie spomenuté vlastnosti, potom sme našli zároveň aj optimálne riešenie pôvodnej úlohy (2.11). Zároveň v porovnaní s KT podmienkami pre takúto úlohu, tu ide o postačujúce podmienky optimality. Toto teda stavia sedlový bod do centra pozornosti záujmu.

Ľahko sa možno presvedčiť, že klasická Lagrangeova funkcia spĺňa axiómy R1–R3, a teda jej sedlový bod (ak existuje) určuje optimálne riešenie príslušnej úlohy.

V nasledujúcich dvoch príkladoch ilustrujeme skutočnosť, že klasická Lagrangeova funkcia nemusí mať sedlový bod, aj keď príslušná úloha má optimálne riešenie.

PR 1: Majme úlohu: $X = \mathbb{R}^2$, $\quad Min \ \{2x_1x_2 \mid x_1 - x_2 = 0\}$.

Z ohraničenia dostávame $x_2 = x_1$.

Dosadením do účelovej funkcie dostávame výraz $2x_1^2$.

Uvedený výraz dosahuje minimum v bode $\hat{x}_1 = 0$, a teda riešením danej úlohy je bod

$$\hat{\mathbf{x}} = (\hat{x}_1, \hat{x}_2)^T = (0,0)^T .$$

Napriek tomu klasická Lagrangeova funkcia

$$L(\mathbf{x}, y) = L(x_1, x_2, y) = 2x_1x_2 + y(x_1 - x_2), \qquad x_1, x_2 \in \mathbb{R}^2,\ y \in \mathbb{R}$$

sedlový bod $(\overline{\mathbf{x}}, \overline{y}) = (\overline{x}_1, \overline{x}_2, \overline{y})$ nemá. Kandidáta naň nájdeme medzi stacionárnymi bodmi klasickej Lagrangeovej funkcie:

$$\begin{aligned} \frac{\partial L(x_1, x_2, y)}{\partial x_1} &= 2x_2 + y = 0 \\ \frac{\partial L(x_1, x_2, y)}{\partial x_2} &= 2x_1 - y = 0 \quad , \\ \frac{\partial L(x_1, x_2, y)}{\partial y} &= x_1 - x_2 = 0 \end{aligned}$$

teda $\overline{x}_1 = \overline{x}_2 = \overline{y} = 0$.

Otestujme či platí podmienka sedlového bodu (2.10)

$$L(\overline{x}_1, \overline{x}_2, y) \le L(\overline{x}_1, \overline{x}_2, \overline{y}) \le L(x_1, x_2, \overline{y}), \qquad \forall x_1, x_2 \in \mathbb{R},\ \forall y \in \mathbb{R} .$$

Keďže $\bar{x}_1 - \bar{x}_2 = 0$, tak prvá nerovnosť platí vždy. Teraz ešte ostáva vyvrátiť platnosť druhej nerovnosti:

Po dosadení $(\bar{x}_1, \bar{x}_2, \bar{y})$ a $(x_1, x_2, \bar{y})$ do Lagrangeovej funkcie dostávame

$$0 \le 2x_1x_2 \ ,$$

čo zrejme neplatí (napr. $x_1 = 1$, $x_2 = -1$), a teda Lagrangeova funkcia skutočne nemá sedlový bod.

Pr 2: Majme úlohu: $X = \mathbb{R}^2$, $\quad$ *Min* $\{-\ln(x_1^2 + 1) + x_2^2 \mid x_1 + x_2^2 + 1 = 0\}$

Ak si vyjadríme premennú x_1 z väzby dostneme $\quad x_1 = -1 - x_2^2$.

Takto minimalizujeme výraz $-\ln(x_2^4 + 2x_2^2 + 2) + x_2^2$.

Tento dosahuje minumum v bode $\hat{x}_2 = 0$, a teda riešením danej úlohy je bod

$$\hat{\mathbf{x}} = (\hat{x}_1, \hat{x}_2)^T = (-1, 0)^T \ .$$

Napriek tomu Lagrangeova funkcia

$$L(\mathbf{x}, y) = L(x_1, x_2, y) = -\ln(x_1^2 + 1) + x_2^2 + y(x_1 + x_2^2 + 1), \quad x_1, x_2 \in \mathbb{R},\ y \in \mathbb{R}$$

sedlový bod $(\bar{\mathbf{x}}, \bar{y}) = (\bar{x}_1, \bar{x}_2, \bar{y})$ nemá. Podobne ako v príklade 1 kandidáta naň nájdeme medzi stacionárnymi bodmi klasickej Lagrangeovej funkcie:

$$\begin{aligned} \frac{\partial L(x_1, x_2, y)}{\partial x_1} &= -\frac{2x_1}{x_1^2 + 1} + y = 0 \\ \frac{\partial L(x_1, x_2, y)}{\partial x_2} &= 2x_2 + 2yx_2 = 0 \quad , \\ \frac{\partial L(x_1, x_2, y)}{\partial y} &= x_1 + x_2^2 + 1 = 0 \end{aligned}$$

ktorého riešením je bod $(\bar{x}_1, \bar{x}_2, \bar{y}) = (-1, 0, -1)$.

Otestujme či platí podmienka sedlového bodu (2.10)

$$L(\bar{x}_1, \bar{x}_2, y) \le L(\bar{x}_1, \bar{x}_2, \bar{y}) \le L(x_1, x_2, \bar{y}), \qquad \forall x_1, x_2 \in \mathbb{R},\ \forall y \in \mathbb{R} \ .$$

Keďže $\bar{x}_1 + \bar{x}_2^2 + 1 = 0$, tak prvá nerovnosť platí vždy. Teraz ešte ostáva vyvrátiť platnosť druhej nerovnosti:

Po dosadení $(\bar{x}_1, \bar{x}_2, \bar{y})$ a $(x_1, x_2, \bar{y})$ do Lagrangeovej funkcie dostávame

$$-\ln 2 \le -\ln(x_1^2 + 1) - x_1 - 1 \ .$$

Táto nerovnosť však neplatí napr. pre $x_1 = 0$ (x_2 ľubovoľné), a teda klasická Lagrangeova funkcia nemá sedlový bod.

Na týchto jednoducých príkladoch si môžme všimnúť, že existencia optimálneho riešenia neimplikuje existenciu sedlového bodu klasickej Lagrangeovej funkcie. Teda ak by sme sa vydali cestou hľadania optimálneho riešenia pomocou hľadania sedlového bodu príslušnej Lagrangeovej funkcie, nemuseli by sme sa dostať k cieľu. A práve neschopnosť klasickej Lagrangeovej funkcie zaručiť existenciu sedlového bodu motivovalo vznik ***Rozšírených Lagrangeových funkcií*** *(Zovšeobecnených Lagrangeových funkcií)*, ktoré zažili veľký boom najmä v sedemdesiatych rokoch dvadsiateho storočia.

Čo to teda vlastne rozšírené Lagrangeove funkcie sú? Voľne by sme ich mohli charakterizovať nasledovne:

Rozšírená Lagrangeova funkcia je funkcia, ktorá vznikne z klasickej Lagrangeovej funkcie pridaním výrazu penalizujúceho prípadné porušenie podmienok prípustnosti.

Ako sme si už na predchádzajúcich príkladoch ukázali, klasická Lagrangeova funkcia nie je veľmi vhodná na praktické použitie (Everett [13]). Pridaním vhodného penalizačného výrazu však môžme dosiahnuť zlepšenie jednak v teoretickom, ako aj praktickom aspekte.

2.2 Hestenesova rozšírená Lagrangeova funkcia.

Za vôbec prvú rozšírenú Lagrangeovu funkciu považujeme funkciu predstavenú v roku 1969 *Hestenesom* [16] spolu aj s algoritmom na nájdenie jej sedlového bodu. Táto funkcia je skonštruovaná pre úlohu s ohraničeniami v tvare rovností:

(RÚ) **Min** $\{ f(\mathbf{x}) \mid g_i(\mathbf{x}) = 0;\ i = 1,2,\dots,m \}$,

kde $f : X \to \mathbb{R}$, $g_i : X \to \mathbb{R}$, $X \subseteq \mathbb{R}^n$, a má nasledujúci tvar:

$$H(\mathbf{x},\mathbf{y};\eta) = f(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^{m} y_i g_i(\mathbf{x}) + \frac{\eta}{2}\sum_{i=1}^{m} g_i(\mathbf{x})^2 \ , \ \mathbf{x} \in X,\ \mathbf{y} \in \mathbb{R}^m \tag{2.13}$$

a kde $\eta > 0$ je parameter.

Ako vidieť táto funkcia je afinná v premennej **y**.

Gradient Hestenesovej funkcie vyzerá nasledovne:

$$\nabla_x H(\mathbf{x},\mathbf{y};\eta) = \nabla f(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^{m} [y_i + \eta g_i(\mathbf{x})] \nabla g_i(\mathbf{x}) \ , \tag{2.14}$$

$$\nabla_y H(\mathbf{x},\mathbf{y};\eta) = \mathbf{g(x)} \ , \tag{2.15}$$

kde $\mathbf{g(x)} = (g_1(\mathbf{x}), g_2(\mathbf{x}), ..., g_m(\mathbf{x}))^T$.

Ďalej ak sú funkcie $f(\mathbf{x})$ a $g_i(\mathbf{x})$; $i = 1,2,...,m$ triedy C^k, potom tiež Hestenessova funkcia $H(\mathbf{x},\mathbf{y};\eta)$ je triedy C^k.

Nech $(\hat{\mathbf{x}},\hat{\mathbf{y}})$ je stacionárnym bodom funkcie $H(\mathbf{x},\mathbf{y};\eta)$ a nech je splnená príslušná podmienka regularity (teda gradienty $\nabla g_i(\hat{\mathbf{x}})$; $i \in I_0(\hat{\mathbf{x}})$ sú lineárne nezávislé). Potom z (2.15) máme

$$g_i(\hat{\mathbf{x}}) = 0$$

a po dosadení do (2.14) dostávame

$$\nabla f(\hat{\mathbf{x}}) + \sum_{i=1}^{m} \hat{y}_i \nabla g_i(\hat{\mathbf{x}}) = \mathbf{0} \ .$$

Posledné dve rovnosti sú však Lagrangeovými podmienkami pre úlohu (RÚ), t. j. $(\hat{\mathbf{x}},\hat{\mathbf{y}})$ spĺňa Lagrangeove podmienky optimality pre takúto úlohu. Podobne platí aj opačná implikácia, teda ak $(\hat{\mathbf{x}},\hat{\mathbf{y}})$ spĺňa Lagrangeove podmienky tejto úlohy, potom je zároveň aj stacionárnym bodom Hestenesovej funkcie.

Ľahko možno overiť, že časť Hestenesovej funkcie

$$h(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \sum_{i=1}^{m} y_i g_i(\mathbf{x}) + \frac{\eta}{2}\sum_{i=1}^{m} g_i(\mathbf{x})^2$$

spĺňa všetky Roodeho vlastnosti R1 – R3, kde $Y = \mathbb{R}^m$ a $M = \{\mathbf{x} \in X \mid \mathbf{g(x)} = \mathbf{0}\}$. Teda podľa Vety 4, ak $(\overline{\mathbf{x}},\overline{\mathbf{y}})$ je sedlovým bodom funkcie $H(\mathbf{x},\mathbf{y};\eta)$, potom $\overline{\mathbf{x}}$ je optimálnym riešením úlohy. Ostáva ešte teoretická otázka existencie sedlového bodu Hestenesovej funkcie $H(\mathbf{x},\mathbf{y};\eta)$. V závere tejto časti (Veta 5) ukážeme existenciu sedlového bodu. Bolo by teda dobré vedieť nejaký algoritmus na nájdenie takéhoto sedlového bodu typu minmax. Jednou z možností by mohol byť nasledovný postup. Z nejakého počiatočného bodu $(\mathbf{x}^0, \mathbf{y}^0)$ sa striedavo podľa **x** „spúšťať dole" v spádovom smere $-\nabla_x H(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \eta)$ a následne sa podľa **y** „šplhať hore" v smere nárastu $\nabla_y H(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \eta)$ Hestenesovej funkie. Vylepšením tohto postupu je možnosť nájdenia minima funkcie $H(\mathbf{x}, \mathbf{y}^k; \eta)$ pri zafixovanej hodnote $\mathbf{y}^k$ premennej **y**. Na zabezpečenie existencie lokálneho minima funkcie $H(\mathbf{x}, \mathbf{y}^k; \eta)$ nám slúži práve parameter η. Totiž pre malé hodnoty η^k parametra η minimum nemusí existovať, avšak pre dostatočne veľké hodnoty zrejme existuje[8], ak samozrejme pôvodná úloha má optimálne riešenie. Keďže Hestenesova funkcia je afinná v premennej **y**, tak analogické vylepšenie tohto postupu, teda nájsť maximum funkcie $H(\mathbf{x}^k, \mathbf{y}; \eta)$ pri zafixovanej hodnote $\mathbf{x}^k$ premennej **x**, nie je možné. Pri modifikácii premennej **y** je teda nutné postupovať ináč. Ako, to nám ukáže napríklad už vyššie spomenutý Hestenesov algoritmus.

Algoritmus Hestenesa:

HA1 Zvoliť $\eta^0 > 0$, $\mathbf{y}^0 \in \mathbb{R}^m$, presnosť $\varepsilon > 0$ a nastaviť „počítadlo" $k = 0$.

HA2 Nájsť minimum $\mathbf{x}^k \in X$ funkcie $H(\mathbf{x}, \mathbf{y}^k; \eta^k)$. Ak takéto neexistuje zväčši hodnotu parametra η^k a vykonaj krok HA2 ešte raz.

HA3 Test presnosti: ak $\left\| g(\mathbf{x}^k) \right\| < \varepsilon$, $\mathbf{x}^k$ je riešením úlohy. STOP.

HA4 Modifikácia vektora Lagrangeových multiplikátorov: $y_i^{k+1} = y_i^k + \eta^k g_i(\mathbf{x}^k)$; $i = 1, 2, ..., m$, $\eta^{k+1} = \eta^k$.

HA5 $k = k + 1$, GOTO HA2.

Všimnime si, že hlavná časť algoritmu je sústredená v kroku HA2. Tu na nájdenie voľného minima funkcie $H(\mathbf{x}, \mathbf{y}^k; \eta^k)$ môžeme použiť rôzne iteračné metódy. Keďže vo všeobecnosti riešenie $\mathbf{x}^{k,j}$ získané pomocou niektorej z týchto metód konverguje k optimálnemu riešeniu $\mathbf{x}^k$ len pre $j \to \infty$, tak je vhodné pri testovaní

[8] Voľne povedané pre dostatočne veľké η nám výraz $\frac{\eta}{2}\sum_{i=1}^{m} g_i(\mathbf{x})^2$ „konvexifikuje" funkciu $H(\mathbf{x}, \mathbf{y}^k; \eta^k)$ na nejakom okolí $O(\overline{\mathbf{x}})$, kde $\overline{\mathbf{x}}$ je lokálne minimum funkcie $H(\mathbf{x}, \mathbf{y}^k; \eta)$, pri zafixovanej hodnote $\mathbf{y}^k$ premennej **y**.

optimality nájdeného minima $\mathbf{x}^k$ nahradiť nevhodnú podmienku stacionarity $\nabla_x H(\mathbf{x}^k, \mathbf{y}^k; \eta^k) = 0$, upravenou podmienkou, napr. $\left\| \nabla_x H(\mathbf{x}^k, \mathbf{y}^k; \eta^k) \right\| < \mu$, kde μ je nejaká požadovaná „vnútorná“ presnosť. Na detekciu neexistencie môžme použiť napr. obmedzenie maximálneho počtu iterácií, počas ktorých by sa nám malo podariť splniť túto upravenú podmienku stacionarity. Ak sa nám to nepodarí, zväčšíme hodnotu parametra η^k a začneme hľadať minimum znovu. Je vhodné použiť za štartovací bod posledný bod do ktorého sme dospeli pred zväčšením parametra η^k. Kvôli spomínanej presnosti získaného riešenia z kroku HA2 nie je v kroku HA3 podmienkou, aby $\left\| g(\mathbf{x}^k) \right\| = 0$, ale je prítomná modifikovaná podmienka $\left\| g(\mathbf{x}^k) \right\| < \varepsilon$ prípustnosti získaného riešenia. Ako sme už skôr spomenuli, Hestenesova funkcia $H(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \eta)$ je afinná v premennej $\mathbf{y}$, a teda pri modifikácii $\mathbf{y}$ nie je možné postupovať maximalizáciou funkcie $H(\mathbf{x}^k, \mathbf{y}; \eta^k)$ v premennej $\mathbf{y}$, pri zafixovanej hodnote $\mathbf{x}^k$. Modifikácia $\mathbf{y}$ je zabezpečená v kroku HA4. Pre takto zvolené $\mathbf{y}^k$ z HA2 a (2.14) dostaneme $\nabla_x L(\mathbf{x}^k, \mathbf{y}^{k+1}) = \mathbf{0}$ (kde $L(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ je klasická Lagrangeova funkcia), alebo lepšie povedané $\left\| \nabla_x L(\mathbf{x}^k, \mathbf{y}^{k+1}) \right\| \le \mu$, a teda takto získaný sedlový bod $(\bar{\mathbf{x}}, \bar{\mathbf{y}})$ bude (približne) spĺňať nutné Lagrangeove podmienky optimality.

Ako sme už vyššie spomínali, jednou z nevýhod klasickej Lagrangeovej funkcie $L(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ bolo, že sme pri nej nevedeli zabezpečiť existenciu sedlového bodu. U Hestenesovej funkcie, nám za splnenia určitých podmienok tento problém odpadá, o čom nám hovorí nasledovná veta:

VETA 5: a) *Nech $f(\mathbf{x})$ a $g_i(\mathbf{x})$; $i = 1, 2, ..., m$, sú triedy C^2. Nuch úloha (RÚ) má optimálne riešenie a nech bod* $(\bar{\mathbf{x}}, \bar{\mathbf{y}})$ *spĺňa postačujúce podmienky optimality druhého rádu (1.7), (1.8) a silné podmienky komplementarity [9](1.9).*

Potom pre dostatočne veľkú (no konečnú) hodnotu parametra η je na nejakom okolí $O(\bar{\mathbf{x}})$ funkcia $H(\bar{\mathbf{x}}, \bar{\mathbf{y}}; \eta)$ konvexná v premennej x a zároveň

$$(2.16) \qquad H(\bar{\mathbf{x}}, \mathbf{y}; \eta) \le H(\bar{\mathbf{x}}, \bar{\mathbf{y}}, \eta) \le H(\mathbf{x}, \bar{\mathbf{y}}; \eta), \ \forall \mathbf{x} \in O(\bar{\mathbf{x}}), \ y \in \mathbb{R}^m.$$

Naviac ak ide o úlohu konvexného programovania, potom $O(\bar{\mathbf{x}}) = \mathbb{R}^n$.

[9] Ak by sme sa vrátili späť ku príkladu 2, zistili by sme, že všetky podmienky z časti a) Vety 5 sú pre túto úlohu splnené, no ako sme už ukázali príslušná klasická Lagrangeova funkcia nemá sedlový bod.

b) *Naopak, ak platí (2.16) pre nejaké* $\eta > 0$, *potom* $\overline{\mathbf{x}}$ *je optimálnym riešením pôvodnej úlohy (RÚ) s ďalším ohraničením* $\mathbf{x} \in O(\overline{\mathbf{x}})$ *(kde podobne ako bolo spomínané už v časti a) v prípade konvexnej úlohy* $O(\overline{\mathbf{x}}) = \mathbb{R}^n$*).*

Dôkaz: Je možné nájsť v Mangasarian [20], str. 778.

V nasledujúcom príklade si ukážeme, že Hestenesova funkcia môže mať sedlový bod aj napriek tomu, že nie sú splnené všetky predpoklady z vety 5.

PR 3: Uvažujme nám už dobre známu úlohu na viazaný extrém

$$\mathrm{X} = \mathbb{R}^2, \qquad Min \quad \{ 2x_1x_2 \mid x_1 - x_2 = 0 \} .$$

Vieme, že optimálne riešenie tejto úlohy je $\hat{x}_1 = \hat{x}_2 = 0$ a príslušný Lagrangeov multiplikátor $\hat{y} = 0$. Hestenesova funkcia pre takúto úlohu bude vyzerať:

$$H(\mathbf{x}, y; \eta) = 2x_1x_2 + y(x_1 - x_2) + \frac{\eta}{2}(x_1^2 + x_2^2 - 2x_1x_2) \ , \ y \in \mathbb{R}, \ \eta > 0 .$$

Podmienku (2.14) si môžeme vyjadriť pomocou jednotlivých parciálnych derivácií podľa premennej x_1 a x_2 ako sústavu dvoch rovníc:

$$\begin{aligned} \frac{\partial H(x, y; \eta)}{\partial x_1} &= \eta x_1 + (2 - \eta)x_2 + y \\ \frac{\partial H(x, y; \eta)}{\partial x_2} &= (2 - \eta)x_1 + \eta x_2 - y \end{aligned} . \tag{2.17}$$

Podmienku (2.15) si vyjadríme pomocou jednej rovnosti:

$$\frac{\partial H(x, y; \eta)}{\partial y} = x_1 - x_2 . \tag{2.18}$$

Skúsme teraz nájsť optimálne riešenie tejto úlohy pomocou Hestenesovho algoritmu.

Nech $y^0 = 1$, $\eta^0 = 1$ a zvoľme presnosť $\varepsilon = 10^{-5}$. Teraz môžme až do ukončenia algoritmu vykonávať postupnosť krokov HA2 až HA5. V kroku HA2 budeme minimum $\mathbf{x}$ hľadať ako riešenie sústavy (2.17). Ak bude treba, tak v kroku HA2 Hestenesovho algoritmu budeme zvyšovať hodnotu parametra η podľa predpisu $\eta^k = 2\eta^k$.

Takto získané hodnoty si zapíšme do Tabuľky 1.

i	x_1^i	x_2^i	y^i	η^i	$x_1^i - x_2^i$
0	neexistuje	neexistuje	1	1	N/A
1	-0,5	0,5	1	2	-1
2	0,17	-0,17	-1	4	0,33
3	-0,024	0,024	0,33	4	-0,048
4	0,0016	-0,0016	-0,048	4	0,0032
5	-0,00005	0,00005	0,0032	4	-0,00010
6	0,000001	-0,000001	-0,00010	4	0,000002

Tabuľka 1: Riešenie získané Hestenesovým algoritmom aplikovaným na Hestenesovu funkciu

Ako vidieť pri zvolenej presnosti sme k riešeniu s požadovanou presnosťou dospeli za 7 iterácií. Z Tabuľky 1 si tiež môžeme všimnúť, že iterované riešenia nemusia konvergovať k presnému riešeniu monotónne.
Nájdime teraz stacionárne body Hestenesovej funkcie

$$H(\mathbf{x}, y; \eta) = 2x_1x_2 + y(x_1 - x_2) + \frac{\eta}{2}(x_1^2 + x_2^2 - 2x_1x_2) \ .$$

Nech $\eta = 2$. Z podmienok (2.17) a (2.18) dostaneme už známe riešenie

$$\overline{x}_1 = \overline{x}_2 = \overline{y} = 0 \ .$$

Spĺňa takéto riešenie podmienku sedlovosti (2.16)? Po dosadení známych hodnôt do tejto podmienky dostaneme:

$$0 \le 0 \le x_1^2 + x_2^2 \ , \qquad \forall (x_1, x_2) \in O(\overline{\mathbf{x}}) \ .$$

Toto platí vždy, a teda $O(\overline{\mathbf{x}}) = \mathbb{R}^2$. Všimnime si, že pri tejto úlohe nie sú splnené všetky predpoklady z časti a) vety 5, konkrétne silná komplementarita, lebo $y = 0$. Napriek tomu tvrdenie z časti a) pre túto úlohu platí.

2.3 Rockafellarova rozšírená Lagrangeova funkcia.

Ako sme však už v úvodnej časti tejto práce spomínali, nás predovšetkým zaujíma úloha nelineárneho programovania s ohraničeniami v tvare nerovností.

Uvažujme preto teraz štandardnú úlohu nelineárneho programovania (ŠÚ). Túto si pomocou už skôr zmienenej transformácie vieme pomocou m doplnkových premenných vieme pretransformovať na úlohu s ohraničeniami v tvare rovností. Na takúto úlohu by sme teraz mohli použiť Hestenesovu funkciu. Pri takejto transformácii, ako už bolo spomenuté skôr, nám však pri veľkom počte m ohraničení narastie dimenzia takejto transformovanej úlohy (konkrétne počet premenných bude $n+m$). Takýto veľký nárast počtu premenných však má veľký vplyv na kvalitu získaných riešení takejto úlohy. Toto sa premietalo aj do riešení získaných použitím Hestenesovej funkcie, a preto sa táto ukázala ako nie veľmi vhodná na použitie pri hľadaní optimálnych riešení úlohy s ohraničeniami v tvare nerovností (Miele, Moseley, Cragg [21]). V roku 1970 však pre úlohu s ohraničeniami v tvare nerovností bola *Rockafellarom* [23] predstavená nová funkcia získaná modifikáciou Hestenesovej funkcie spolu aj s upraveným Hestenesovým algoritmom na jej použitie,. Ako už bolo spomínané táto funkcia je skonštruovaná pre úlohu s ohraničeniami v tvare nerovností (u nás označovanú ako štandardnú úlohu ŠÚ), teda:

$$\textbf{(ŠÚ)} \qquad \textbf{Min} \quad \{f(\mathbf{x}) \mid g_i(\mathbf{x}) \le 0;\ i=1,2,...,m\}\ ,$$

kde $f : X \to \mathbb{R}$, $g_i : X \to \mathbb{R}$, $X \subseteq \mathbb{R}^n$.

Rockafellarova rozšírená Lagrangeova funkcia má nasledovný tvar:

$$\text{(2.19)} \qquad R(\mathbf{x},\mathbf{y};\eta) = f(\mathbf{x}) + \frac{1}{2\eta}\sum_{i=1}^{m}(\max[0,\eta g_i(\mathbf{x}) + y_i]^2 - y_i^2)\ ,$$

alebo ekvivalentne

$$\text{(2.20)} \qquad R(\mathbf{x},\mathbf{y};\eta) = f(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^{m} \begin{cases} y_i g_i(\mathbf{x}) + \dfrac{\eta}{2} g_i^2(\mathbf{x}); & \text{ak } g_i(\mathbf{x}) \ge -\dfrac{y_i}{\eta} \\ -\dfrac{1}{2\eta} y_i^2; & \text{ak } g_i(\mathbf{x}) < -\dfrac{y_i}{\eta} \end{cases}\ ,$$

$\mathbf{x} \in X \subseteq \mathbb{R}^n$, $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^m$ a kde $\eta > 0$ je parameter.

Spomínali sme, že táto Rockafellarova funkcia bola odvodená z Hestenesovej funkcie. Aj keď sa to na prvý pohľad nezdá, naozaj je tomu tak. Pomocou m doplnkových premenných z_i prevedieme úlohu (ŠÚ) tvar

$$\text{Min} \quad \{f(\mathbf{x}) \mid g_i(\mathbf{x}) + z_i^2 = 0; i = 1,2,...,m\},$$

$\mathbf{z} = (z_1, z_2, ..., z_m)^T \in \mathbb{R}^m$.

Hesnessova funkcia pre takúto úlohu potom nadobúda tvar

(2.21) $$H(\mathbf{x},\mathbf{z},\mathbf{y};\eta) = f(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^{m} y_i(g_i(\mathbf{x}) + z_i^2) + \frac{\eta}{2}\sum_{i=1}^{m}(g_i(\mathbf{x}) + z_i^2)^2$$

Ako sme si už ukázali, Lagrangeove podmienky optimality úlohy s ohraničeniami v tvare rovností sú ekvivalentné s podmienkami stacionarity príslušnej Hestenesovej funkcie. Zderivujme teraz vzťah (2.21) podľa premennej **z** alebo lepšie povedané podľa jednotlivých premenných z_i $i = 1,2,...,m$ a vyjadrime si podmienku stacionarity. Dostaneme:

(2.22) $$2y_i z_i + 2\eta(g_i(\mathbf{x}) + z_i^2)z_i = 0 \;;\quad i = 1,2,...,m \;.$$

Po úprave z (2.22) dostaneme nasledujúcu rovnosť

$$(\eta g_i(\mathbf{x}) + \eta z_i^2 + y_i)z_i = 0 \;;\quad i = 1,2,...,m \;.$$

Keďže $z_i \in \mathbb{R}$, tak táto podmienka je splnená, ak položíme $\forall i = 1,2,...,m$

$$z_i = \sqrt{-(g_i(\mathbf{x}) + \frac{y_i}{\eta})} \;; \qquad \text{ak } g_i(\mathbf{x}) + \frac{y_i}{\eta} < 0 \;,$$

$$z_i = 0 \;; \qquad \text{ak } g_i(\mathbf{x}) + \frac{y_i}{\eta} \geq 0 \;.$$

Vieme, že táto podmienka stacionarity je jednou z nutných podmienok optimality pre optimálne riešenie danej úlohy. Ak teda nájdeme optimálne riešenie, príslušné doplnkové premenné z_i budú vždy nadobúdať takýto tvar. Dosadením takýchto výrazov namiesto premenných z_i do funkcie (2.21) nestratíme optimálne riešenie, pričom táto funkcia bude ďalej len funkciou premenných **x**, **y** a parametra η. Takto z (2.21) dostaneme:

$$H(\mathbf{x},\mathbf{y};\eta) = f(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^{m} \begin{cases} y_i g_i(\mathbf{x}) + \frac{\eta}{2} g_i(\mathbf{x})^2; & \text{ak } g_i(\mathbf{x}) + \frac{y_i}{\eta} \geq 0 \\ -\frac{y_i^2}{2\eta}; & \text{ak } g_i(\mathbf{x}) + \frac{y_i}{\eta} < 0 \end{cases},$$

čo je však funkcia identická s Rockafellarovou funkciou (2.20), ktorú je možné previesť na ekvivalentný tvar (2.19).

Rockafellarova funkcia $R(\mathbf{x},\mathbf{y};\eta)$ je konvexná v premennej **x** pokiaľ ide o úlohu konvexného programovania a je (vždy) konkávna v premennej **y**. Ak sú funkcie $f(\mathbf{x})$ a $g_i(\mathbf{x})$ triedy C^1, potom aj $R(\mathbf{x},\mathbf{y};\eta)$ je triedy C^1 a jej gradient (podľa premennej **x** a **y**) vyzerá nasledovne:

(2.23) $$\nabla_x R(\mathbf{x},\mathbf{y};\eta) = \nabla f(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^{m} \max[0, \eta g_i(\mathbf{x}) + y_i]\nabla g_i(\mathbf{x}) ,$$

(2.24) $$\nabla_y R(\mathbf{x},\mathbf{y};\eta) = \max[\mathbf{0}, \mathbf{g}(\mathbf{x}) + \frac{\mathbf{y}}{\eta}] - \frac{\mathbf{y}}{\eta} .$$

Ak sú jednotlivé funkcie $f(\mathbf{x})$ a $g_i(\mathbf{x})$ triedy C^2, tak Rockafellarova funkcia $R(\mathbf{x},\mathbf{y};\eta)$ je triedy C^2 iba v bodoch **x** a **y**, kde $\eta g_i(\mathbf{x}) + y_i \neq 0$; $i = 1,2,...,m$,

kvôli svojej štruktúre obsahujúcej „nehladký“ výraz tvaru $\max[\mathbf{0}, \mathbf{g}(\mathbf{x}) + \frac{\mathbf{y}}{\eta}]$ v rovnici (2.23). Všimnime si, že pri použití Rockafellarovej funkcie nie je na vektor KT multiplikátorov **y** kladená žiadna podmienka v podobe nezápornosti ako tomu bolo pri použití klasickej Lagrangeovej funkcie. Napriek tomu sa ukáže, že optimálnemu riešeniu $\hat{\mathbf{x}}$ úlohy (ŠÚ), bude prislúchať vektor $\hat{\mathbf{y}} \geq \mathbf{0}$.

Teraz si okrem množiny indexov $I_0(\mathbf{x})$ z definície 4 kvôli jednoduchosti výkladu zadefinujme ešte 4 ďaľšie indexové množiny:

$$\begin{aligned} I_0(\mathbf{x}) &= \{i \mid g_i(\mathbf{x}) = 0; i = 1,2,...,m\} \\ I_-(\mathbf{x}) &= \{i \mid g_i(\mathbf{x}) < 0; i = 1,2,...,m\} \\ J_-(\mathbf{x},\mathbf{y}) &= \{j \mid \eta g_j(\mathbf{x}) + y_j < 0; j = 1,2,...,m\} \\ J_0(\mathbf{x},\mathbf{y}) &= \{j \mid \eta g_j(\mathbf{x}) + y_j = 0; j = 1,2,...,m\} \\ J_+(\mathbf{x},\mathbf{y}) &= \{j \mid \eta g_j(\mathbf{x}) + y_j > 0; j = 1,2,...,m\} \end{aligned} .$$

Nech $(\hat{\mathbf{x}},\hat{\mathbf{y}})$ je stacionárnym bodom funkcie $R(\mathbf{x},\mathbf{y};\eta)$ a nech je splnená príslušná podmienka regularity. Potom z (2.24) pre jednotlivé indexy $i = 1,2,...,m$ máme:

(2.25) $$\max\{0, g_i(\hat{\mathbf{x}}) + \frac{\hat{y}_i}{\eta}\} - \frac{\hat{y}_i}{\eta} = 0 .$$

Uvedený vzťah teraz analyzujme pre jednotlivé indexové množiny $J_-(\hat{\mathbf{x}},\hat{\mathbf{y}})$, $J_0(\hat{\mathbf{x}},\hat{\mathbf{y}})$, $J_+(\hat{\mathbf{x}},\hat{\mathbf{y}})$.

Zo vzťahu (2.25) pre všetky indexy i také, že $i \in J_-(\hat{\mathbf{x}},\hat{\mathbf{y}})$ dostávame $-\frac{\hat{y}_i}{\eta} = 0$,

čo nám implikuje $\hat{y}_i = 0$ a následne z definície indexovej množiny $J_-(\hat{\mathbf{x}},\hat{\mathbf{y}})$ dostávame

$$g_i(\hat{\mathbf{x}}) < 0 .$$

Pre $i \in J_0(\hat{\mathbf{x}},\hat{\mathbf{y}})$ dostaneme podobným postupom ako pred chvíľou $\hat{y}_i = 0$ a $g_i(\hat{\mathbf{x}}) = 0$.

Pre $i \in J_+(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}})$ zo vzťahu (2.25) dostaneme $g_i(\hat{\mathbf{x}}) = 0$, a následne z definície indexovej množiny $i \in J_+(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}})$ dostávame $\hat{y}_i > 0$.

Toto všetko nám však dohromady implikuje splnenie KT podmienok (1.4)-(1.6).

Pre stacionárny bod $(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}})$ ďalej zo vzťahu (2.23) dostávame

(2.26)
$$\nabla f(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^{m} \max[0, \eta g_i(\mathbf{x}) + y_i] \nabla g_i(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \ .$$

Toto si môžme ďalej prepísať ako $\nabla f(\hat{\mathbf{x}}) + \sum_{j \in J_+(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}})} \max[0, \eta g_i(\hat{\mathbf{x}}) + \hat{y}_i] \nabla g_i(\hat{\mathbf{x}}) = 0$,

z čoho však v rámci predchádzajúcich záverov pre množinu $J_+(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}})$ dostávame

$$\nabla f(\hat{\mathbf{x}}) + \sum_{j \in J_+(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}})} \hat{y}_i \nabla g_i(\hat{\mathbf{x}}) = 0 \ .$$

Keďže však pre indexy $i \in J_-(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}}) \cup J_0(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}})$ platí $\hat{y}_i = 0$, tak potom aj

$$\nabla f(\hat{\mathbf{x}}) + \sum_{j \in J_-(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}}) \cup J_0(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}}) \cup J_+(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}})} \hat{y}_i \nabla g_i(\hat{\mathbf{x}}) = 0 \ ,$$

čo je však splnenie KT podmienky (1.3), a teda každý stacionárny bod $(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}})$ funkcie $R(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \eta)$ je zároveň aj KT párom pre úlohu ŠÚ.

Nech teraz bod $(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}})$ je KT párom pre úlohu ŠÚ. Potom z KT podmienok (1.4)-(1.6) pre jednotlivé množiny indexov $I_-(\hat{\mathbf{x}})$ a $I_0(\hat{\mathbf{x}})$ dostávame:

$$\hat{y}_i = 0, \ i \in I_-(\hat{\mathbf{x}}) \ ,$$
$$\hat{y}_i \geq 0, \ i \in I_0(\hat{\mathbf{x}}) \ .$$

Keďže však $I_-(\hat{\mathbf{x}}) \cup I_0(\hat{\mathbf{x}}) = \{1, 2, ..., m\}$ dostávame, že vzťah (2.24) je v bode $(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}})$ rovný **0**. Rovnosť (2.23) si môžme zapísať ako

$$\nabla_x R(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}}; \eta) = \nabla f(\hat{\mathbf{x}}) + \sum_{i \in I_-(\hat{\mathbf{x}})} \max[0, \eta g_i(\hat{\mathbf{x}}) + \hat{y}_i] \nabla g_i(\hat{\mathbf{x}}) + \sum_{i \in I_0(\hat{\mathbf{x}})} \max[0, \eta g_i(\hat{\mathbf{x}}) + \hat{y}_i] \nabla g_i(\hat{\mathbf{x}})$$

z čoho dostaneme $\nabla_x R(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}}; \eta) = \nabla f(\hat{\mathbf{x}}) + \sum_{i \in I_0(\hat{\mathbf{x}})} \hat{y}_i \nabla g_i(\hat{\mathbf{x}})$.

Keďže však $\hat{y}_i = 0$, $\forall i \in I_-(\hat{\mathbf{x}})$, tak KT podmienka (1.3) je ekvivalentná podmienke

$$\nabla f(\hat{\mathbf{x}}) + \sum_{i \in I_0(\hat{\mathbf{x}})} \hat{y}_i \nabla g_i(\hat{\mathbf{x}}) = \mathbf{0} \ ,$$

a teda vzťah (2.23) je v bode $(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}})$ rovný **0**.

Tým sme ukázali, že KT pár $(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}})$ je stacionárnym bodom Rockafellarovej funkcie $R(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \eta)$.

Ako sme práve pred chvíľou ukázali, stacionárne body $(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}})$ funkcie $R(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \eta)$ sú ekvivalentné KT bodom príslušnej úlohy a v prípade úlohy konvexného programovania je $\hat{\mathbf{x}}$ optimálnym riešením úlohy. Pri tejto príležitosti si môžme všimnúť hneď jednu z výhod Rockafellarovej funkcie oproti klasickej Lagrangeovej funkcii. Ak by sme sa pri úlohe konvexného programovania KÚ pri hľadaní optimálneho riešenia vydali cestou hľadať toto riešenie pomocou KT podmienok, tak namiesto hľadania riešenia systému rovníc (2.5), (2.6) a následnej kontroly splnenia podmienok (2.7)-(2.9) pre potenciálne všetky indexové množiny $I_0(\hat{\mathbf{x}})$, nám pri použití Rockafellarovej funkcie $R(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \eta)$ stačí vyriešiť systém $n+m$ rovníc (2.23) a (2.24), čo je vo všeobecnosti oveľa menej ako vo vyššie spomenutom postupe s použitím klasickej Lagrangeovej funkcie $L(\mathbf{x}, \mathbf{y})$.

Ako sme však už párkrát spomínali nájsť koreň takéhoto homogénneho systému nemusí byť jednoduché a navyše, pokiaľ nejde o úlohu konvexného programovania aj nie každý takýto bod, alebo presnejšie povedané jeho $\mathbf{x}$-ová zložka, je zároveň aj optimálnym riešením pôvodnej úlohy.

Ľahko možno overiť, že časť Rockafellarovej funkcie

$$r(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{1}{2\eta} \sum_{i=1}^{m} (\max[0, \eta g_i(\mathbf{x}) + y_i]^2 - y_i^2)$$

spĺňa všetky Roodeho vlastnosti R1 – R3, kde $Y = \mathbb{R}^m$ a $M = \{\mathbf{x} \in X \mid g(\mathbf{x}) \leq 0\}$. Ak teda nájdeme sedlový bod $(\overline{\mathbf{x}}, \overline{\mathbf{y}})$ Rockafellarovej funkcie $R(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \eta)$, potom $\overline{\mathbf{x}}$ je optimálnym riešením pôvodnej úlohy. Ako teda postupovať pri hľadaní tohoto sedlového bodu? Môžme použiť Rockafellarovu modifikáciu Hestenesovho algoritmu:

Algoritmus Rockafellara:

RA1 Zvoliť $\eta^0 > 0$, $\mathbf{y}^0 > \mathbf{0}$, presnosť $\varepsilon > 0$ a nastaviť „počítadlo“ $k = 0$.

RA2 Nájsť minimum $\mathbf{x}^k \in X$ funkcie $R(\mathbf{x}, \mathbf{y}^k; \eta^k)$. Ak takéto neexistuje zväčši hodnotu parametra η^k a vykonaj krok RA2 ešte raz.

RA3 Test presnosti: ak $g_i(\mathbf{x}^k) < \varepsilon$; $\forall i = 1, 2, ..., m$, $\mathbf{x}^k$ je ε-približným riešením úlohy. STOP.

RA4 Modifikácia vektora Lagrangeových multiplikátorov:

$$y_i^{k+1} = \max[0, \eta g_i(\mathbf{x}^k) + y_i^k];\ i = 1,2,...,m,\ \eta^{k+1} = \eta^k.$$

RA5 $k = k+1$, GOTO RA2.

Takisto ako v Hestenesovom algoritme aj tu hlavná časť algoritmu prebieha v kroku RA2. Ak v pôvodnej úlohe (ŠÚ) optimálne riešenie $\hat{\mathbf{x}}$ existuje, potom pre dostatočne veľkú hodnotu parametra η^k existuje minimum $\mathbf{x}^k$ Rockafellarovej funkcie $R(\mathbf{x}, \mathbf{y}^k; \eta^k)$. Parameter η^k nám teda slúži na zabezpečenie existencie minima Rockafellarovej funkcie $R(\mathbf{x}, \mathbf{y}^k; \eta^k)$. V kroku RA3 kontrolujeme, podobne ako aj v Hestenesovom algoritme, upravenú podmienku prípustnosti. Použitie metódy rozšírených Lagrangeových funkcií nesie známky metód vonkajšieho bodu, a teda ak optimálne riešenie $\hat{\mathbf{x}}$ pôvodnej úlohy (ŠÚ) leží na hranici množiny prípustných riešení $\mathcal{F}$, tak sa môže stať, že k optimálnemu riešeniu $\hat{\mathbf{x}}$ pôvodnej úlohy (ŠÚ) sa budeme blížiť z vonkajšej strany, t. j. v jednotlivých iteráciách budú minimá $\mathbf{x}^k$ Rockafellarovej funkcie $R(\mathbf{x}, \mathbf{y}^k; \eta^k)$ konvergovať k optimálnemu riešeniu $\hat{\mathbf{x}}$ úlohy (ŠÚ) smerom z množiny neprípustných riešení. Preto v kroku RA3 testujeme modifikovanú podmienku prípustnosti s požadovanou presnosťou ε. KT multiplikátory y_i budú vďaka spôsobu modifikácie v kroku RA4 nezáporné. Pre takto zvolené hodnoty KT multiplikátorov $\mathbf{y}^k$ z kroku RA2 zo vzťahu (2.23) dostaneme $\nabla_x L(\mathbf{x}^k, \mathbf{y}^{k+1}) = \mathbf{0}$ [10], kde ($L(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ je klasická Lagrangeova funkcia), a teda takto získaný sedlový bod $(\overline{\mathbf{x}}, \overline{\mathbf{y}})$ bude (približne) spĺňať nutné KT podmienky optimality.

Na záver si v nasledujúcej vete, podobne ako aj v predchádzajúcej časti, ukážeme výhodu Rockafellarovej funkcie $R(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \eta)$ oproti klasickej Lagrangeovej $L(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ v tom, že pri splnení istých podmmienok vieme garantovať existenciu jej sedlového bodu $(\overline{\mathbf{x}}, \overline{\mathbf{y}})$.

VETA 6: a) *Nech $f(\mathbf{x})$ a $g_i(\mathbf{x})$; $i = 1,2,...,m$, sú triedy C^2. Nuch úloha (ŠÚ) má optimálne riešenie a nech bod $(\overline{\mathbf{x}}, \overline{\mathbf{y}})$ spĺňa postačujúce podmienky optimality druhého rádu (1.7), (1.8) a silné podmienky komplementarity (1.9).*

---

[10] Alebo lepšie povedané približné splnenie tejto podmienky, teda $\left\|\nabla_x L(\mathbf{x}^k, \mathbf{y}^{k+1})\right\| \leq \mu$ viď komentár k Hestenessovmu algoritmu.

Potom pre nejakú dostatočne veľkú (no konečnú) hodnotu parametra η *je na nejakom okolí* $O(\overline{\mathbf{x}})$ *funkcia* $R(\overline{\mathbf{x}},\overline{\mathbf{y}};\eta)$ *konvexná v premennej x a zároveň*

(2.27) $$R(\overline{\mathbf{x}},\mathbf{y};\eta)\le R(\overline{\mathbf{x}},\overline{\mathbf{y}},\eta)\le R(\mathbf{x},\overline{\mathbf{y}};\eta)\ ,\ \forall\mathbf{x}\in O(\overline{\mathbf{x}}),\ y\in\mathbb{R}^m\ .$$

Naviac ak ide o úlohu konvexného programovania, potom $O(\overline{\mathbf{x}})=\mathbb{R}^n$.

b) *Naopak, ak platí (2.27) pre nejaké* $\eta>0$, *potom* $\overline{\mathbf{x}}$ *je optimálnym riešením pôvodnej úlohy (ŠÚ) s ďalším ohraničením* $\mathbf{x}\in O(\overline{\mathbf{x}})$, *kde podobne ako bolo spomínané už v časti a) v prípade konvexnej úlohy* $O(\overline{\mathbf{x}})=\mathbb{R}^n$.

Dôkaz: Je možné nájsť v Mangasarian [20], str. 778.

2.4 Mangasarianova trieda rozšírených Lagrangeových funkcií.

Ako sme už spomínali skôr, tvar rozšírenej Lagrangeovej funkcie pre tú-ktorú úlohu nie je pevne daný a naozaj, okrem už spomínaných predchádzajúcich dvoch funkcií s kvadratickou penalizáciou, poznáme aj mnoho iných. Za splnenia istých rozumných predpokladov však tieto môžme zaradiť do triedy, kde jednotlivé funkcie majú podobné (alebo rovnaké) vlastnosti čo sa týka sedlovosti a existencie stacionárnych bodov. V tejto časti si predstavíme Mangasarianovu triedu rozšírených Lagrangeových funkcií (pôvodne predstavenú v roku 1973) pre ŠÚ, do ktorej patrí aj Rockafellarova funkcia.

Najprv si zadefinujme nové symboly

$$(\mathrm{x})_+=\begin{cases}\mathrm{x}; & \text{ak } \mathrm{x}\ge 0\\ 0; & \text{ak } \mathrm{x}<0\end{cases}.$$

Analogicky pre funkciu $\psi:\mathbb{R}\to\mathbb{R}$ definujeme

$$\psi(\mathrm{x})_+=\begin{cases}\psi(\mathrm{x}); & \text{ak } \mathrm{x}\ge 0\\ 0; & \text{ak } \mathrm{x}<0\end{cases}.$$

Symbol ψ', ψ'' označuje prvú, resp. druhú deriváciu funkcie ψ.

Nech v ďaľšom funkcia $\psi:\mathbb{R}\to\mathbb{R}$ spĺňa nasledovné vlastnosti:

M1 ψ je triedy C^2 a $\psi''(\mathrm{x})>0$ ak $\mathrm{x}\ne 0$.

M2 ψ' je bijektívne zobrazenie z $\mathbb{R}$ na $\mathbb{R}$ a $\psi'(0) = 0$.

M3 $\psi(0) = 0$.

Keďže $\psi \in C^2$, tak z vlastnosti M1 dostávame, že v bode $x = 0$ platí $\psi''(x) > 0$, prípadne $\psi''(x) = 0$ (prípad $\psi''(x) < 0$ nemôže nastať, lebo potom $\psi''(x)$ by nebola spojitá v bode 0, a teda nebola triedy C^2). Z tohoto dostávame, že funkcia ψ je konvexná. Z vlastnosti M2 zas vidíme, že ψ má v bode 0 stacionárny bod, v ktorom dosahuje hodnotu 0. Z konvexnosti však vieme, že tento stacionárny bod je bodom minima, a teda ψ je nezáporná funkcia.

Uvažujme teraz úlohu

(ŠÚ) **Min** $\{f(\mathbf{x}) \mid g_i(\mathbf{x}) \le 0; i = 1, 2, ..., m\}$,

kde $f : X \to \mathbb{R}$, $g_i : X \to \mathbb{R}$, $X \subseteq \mathbb{R}^n$.

Nech $\psi : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ má vlastnosti M1, M2, M3. Potom Mangasarianova funkcia má tvar:

(2.28) $$M(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \eta) = f(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^{m} (\psi(\eta g_i(\mathbf{x}) + y_i)_+ - \psi(y_i)) \ , \ \mathbf{x} \in X, \ \mathbf{y} \in \mathbb{R}^m$$

a kde $\eta > 0$ je parameter.

Poznámka: Poznamenávame, že pre funkciu $\psi(x) = \dfrac{x^2}{2\eta}$ Mangasarianova funkcia sa redukuje na Rockafellarovu funkciu $R(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \eta)$.

Všimnime si, že vďaka vlastnosti M2 platí $(\psi(x)_+)' = \psi'(x)_+$, $\forall x \in \mathbb{R}$, a teda aj Mangasarianova funkcia je triedy C^1 a jej gradient podľa premenných **x** a **y** vyzerá:

(2.29) $$\nabla_x M(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \eta) = \nabla f(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^{m} \psi'(\eta g_i(\mathbf{x}) + y_i)_+ \nabla g_i(\mathbf{x}) \ ,$$

(2.30) $$\nabla_y M(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \eta) = (\psi'(\eta g_1(\mathbf{x}) + y_1)_+ - \psi'(y_1), ..., \psi'(\eta g_2(\mathbf{x}) + y_2)_+ - \psi'(y_2) \ .$$

Na druhej strane však vo všeobecnosti $(\psi(x)_+)'' = \psi''(x)_+$ len pre $x > 0$ (toto je aj prípad Rockafellarovej funkcie kde $\psi(x) = \dfrac{x^2}{2\eta}$), pričom rovnosť bude platiť $\forall x \in \mathbb{R}$ len ak k vlastnostiam M1-M3 funkcie $\psi(x)$ pridáme požiadavku aby $\psi''(0) = 0$. Ak teda sú v (ŠÚ) jednotlivé funkcie $f(\mathbf{x})$ a $g_i(\mathbf{x})$ triedy C^2 a $\psi''(0)=0$, potom je všeobecná Mangasarianova funkcia $M(\mathbf{x},\mathbf{y};\eta)$ tiež triedy C^2. Funkcia $\psi(x)$ s týmito vlastnosťami je napríklad niektorá z nasledujúcich funkcií:

a) $\psi(x)=\dfrac{|x|^{\alpha}}{\eta\alpha}$; $\eta>0$, $\alpha>2$ (pre $\alpha=2$, ide o Rockafellarovu funkciu).

b) $\psi(x)=\cosh(x)-(\dfrac{x^2}{2})-1$; kde $\cosh(x)=\dfrac{1}{2}(e^x+e^{-x})$.

Keďže sme už spomínali že všeobecná Mangasarianova funkcia $M(\mathbf{x},\mathbf{y};\eta)$ môže nadobúdať tvar funkcie $R(\mathbf{x},\mathbf{y};\eta)$, z tohoto by sme mohli už intuitívne vytušiť vzťah medzi KT bodmi úlohy ŠÚ a stacionárnymi bodmi Mangasarianovej funkcie. A naozaj ekvivalenciu medzi KT bodmi a stacionárnymi bodmi Rockafellarovej funkcie (ktorú sme si už ukázali vyššie) môžme zovšeobecniť aj na stacionárne body Mangasarianovej funkcie, o čom nám vlastne hovorí nasledovná veta.

VETA 7: *Nech sú funkcie $f(\mathbf{x})$ a $g_i(\mathbf{x})$; $i=1,2,\ldots,m$ triedy C^1 a nech $\eta>0$.*

Ak $(\hat{\mathbf{x}},\hat{\mathbf{y}})$ je KT bod úlohy ŠÚ, potom $(\hat{\mathbf{x}},\hat{\mathbf{u}})$, kde $\psi'(\hat{u}_i)=\dfrac{\hat{y}_i}{\eta}$; $i=1,2,\ldots,m$[11], je stacionárnym bodom funkcie $M(\mathbf{x},\mathbf{y};\eta)$. Naopak, ak $(\hat{\mathbf{x}},\hat{\mathbf{u}})$ je stacionárny bod funkcie $M(\mathbf{x},\mathbf{y};\eta)$, potom $(\hat{\mathbf{x}},\hat{\mathbf{y}})$ je KT bod úlohy ŠÚ, kde $\hat{y}_i=\eta\psi'(\eta g_i(\hat{\mathbf{x}})+\hat{u}_i)_+$; $i=1,2,\ldots,m$[12].

Dôkaz: Je možné nájsť v Mangasarian [20], str. 776.

Ak by sme sa pri úlohe konvexného programovania KÚ pri hľadaní optimálneho riešenia vydali cestou nájsť toto riešenie pomocou KT podmienok, tak namiesto hľadania riešenia systému rovníc (2.5), (2.6) a následnej kontroly splnenia podmienok

[11] Všimnime si, keďže z vlastnosti M2 máme, že $\psi'(x)$ je bijekcia, tak $\forall \hat{y}_i$ existuje práve jedno $\hat{u}_i$. Pre Rockafellarovu funkciu máme $\psi(x)=\dfrac{x^2}{2\eta}$, preto $\psi'(x)=\dfrac{x}{\eta}$, a teda $\hat{u}_i=\hat{y}_i$.

[12] Tu platí pre funkciu $\psi(x)$ to isté, ako v predchádzajúcej poznámke, pre Rockafellarovu funkciu dostaneme $\hat{y}_i=(\eta g_i(\hat{\mathbf{x}})+\hat{u}_i)_+$ (funkciu $\psi(x)$ sme v tomto prípade derivovali podľa premennej u_i); $i=1,2,\ldots,m$, a teda $\hat{y}_i=\begin{cases}\eta g_i(\hat{\mathbf{x}})+\hat{u}_i; & \eta g_i(\hat{\mathbf{x}})+\hat{u}_i\ge 0\\ 0; & \eta g_i(\hat{\mathbf{x}})+\hat{u}_i<0\end{cases}$.

(2.7)-(2.9) pre potenciálne všetky indexové množiny $I_0(\hat{\mathbf{x}})$, sa nám táto úloha pri použití ľubovoľnej funkcie z Mangasarianovej triedy redukuje na jednoduchšiu úlohu nájdenia nulového riešenia systému $n+m$ rovníc (2.29) a (2.30).

Podobne ako v predchádzajúcom prípade môžeme zovšeobecniť aj znenie Vety 6, hovoriacej o vzťahu optimálneho riešenia ŠÚ a sedlového bodu Rockafellarovej funkcie, do znenia nasledovnej vety.

VETA 8: a) *Nech $f(\mathbf{x})$ a $g_i(\mathbf{x})$; $i=1,2,...,m$, sú triedy C^2. Nuch úloha (ŠÚ) má optimálne riešenie a nech bod* $(\overline{\mathbf{x}},\overline{\mathbf{y}})$ *spĺňa postačujúce podmienky optimality druhého rádu (1.7), (1.8) a silné podmienky komplementarity (1.9).*

Potom pre nejakú dostatočne veľkú (no konečnú) hodnotu parametra η je na nejakom okolí $O(\overline{\mathbf{x}})$ funkcia $M(\overline{\mathbf{x}},\overline{\mathbf{y}};\eta)$ konvexná v premennej x a zároveň

(2.31) $$M(\overline{\mathbf{x}},\mathbf{y};\eta)\le M(\overline{\mathbf{x}},\overline{\mathbf{y}},\eta)\le M(\mathbf{x},\overline{\mathbf{y}};\eta)\ ,\ \forall\mathbf{x}\in O(\overline{\mathbf{x}}),\ y\in\mathbb{R}^m.$$

Naviac ak ide o úlohu konvexného programovania, potom $O(\overline{\mathbf{x}})=\mathbb{R}^n$.

b) *Naopak, ak platí (2.31) pre nejaké $\eta>0$, potom $\overline{\mathbf{x}}$ je optimálnym riešením pôvodnej úlohy (ŠÚ) s ďalším ohraničením $\mathbf{x}\in O(\overline{\mathbf{x}})$, kde podobne ako bolo spomínané už v časti a) v prípade konvexnej úlohy $O(\overline{\mathbf{x}})=\mathbb{R}^n$.*

Dôkaz: Je možné nájsť v Mangasarian [20], str. 778.

Aj keď sme to doteraz nikde explicitne nespomenuli, nie je nutné použiť v Mangasarianovej funkcii (2.28) spoločnú funkciu $\psi(x)$ pre všetky indexy $i=1,2,...,m$. Ak použijeme pre každý index $i=1,2,...,m$ inú funkciu $\psi_i(x)$ spĺňajúcu vlastnosti M1-M3, dostaneme všeobecnejšie vyjadrenie Mangasarianovej funkcie

(2.32) $$M(\mathbf{x},\mathbf{y};\eta)=f(\mathbf{x})+\sum_{i=1}^{m}(\psi_i(\eta g_i(\mathbf{x})+y_i)_+-\psi_i(y_i))\ ,\ \mathbf{x}\in X,\ \mathbf{y}\in\mathbb{R}^m,$$

$\eta>0$ je parameter;

majúcej všetky vyššie spomenuté vlastnosti.

Poznámka: Mangasarianovu triedu rozšírených Lagrangeových funkcií môžme samozrejme zovšeobecniť aj pre úlohu

(RÚ) **Min** $\{f(\mathbf{x}) \mid g_i(\mathbf{x}) = 0; i = 1,2,...,m\}$,

kde $f : X \to \mathbb{R}$, $g_i : X \to \mathbb{R}$, $X \subseteq \mathbb{R}^n$.

Nech $\psi : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ má vlastnosti M1, M2, M3. Potom pre takýto typ úlohy s ohraničeniami v tvare rovností bude Mangasarianova funkcia $M(\mathbf{x},\mathbf{y};\eta)$ nadobúdať tvar:

$$M(\mathbf{x},\mathbf{y};\eta) = f(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^{m} (\psi(\eta g_i(\mathbf{x}) + y_i) - \psi(y_i)) \ , \ \mathbf{x} \in X, \ \mathbf{y} \in \mathbb{R}^m$$

a kde $\eta > 0$ je parameter.

Ak za funkciu $\psi(x)$ zvolíme funkciu tvaru $\psi(x) = \dfrac{x^2}{2\eta}$, Mangasarianova funkcia $M(\mathbf{x},\mathbf{y};\eta)$ sa redukuje na Hestenesovu funkciu $H(\mathbf{x},\mathbf{y};\eta)$.

2.5 Di Pillo – Grippova rozšírená Lagrangeova funkcia.

Hovorili sme, že rozšírené Lagrangeove funkcie boli v centre diania hlavne v sedemdesiatych rokoch minulého storočia, čoho dôkazom sú aj spomínané predchádzajúce funkcie (Hestenesova funkcia z roku 1969, Rockafellarova funkcia 1970, trieda všeobecných Lagrangeových funkcií od Mangasariana 1975). Aj keď dnes sa pozornosť sústreďuje najmä na metódy vnútorného bodu a iné moderné metódy (mnohé založené na ideách rozšírených Lagrangeových funkcií), rozšírené Lagrangeove funkcie ako také ešte stále nemôžeme považovať za „mŕtve“, čoho dôkazom je aj nasledujúca *Di Pillo, Grippo, Lucidiho funkcia* [12] (ďalej len Di Pillova) z roku 2001 pre úlohu (ŠÚ).

Keďže sa nám táto funkcia od predošlých trošičku odlišuje, zavedieme si najprv kvôli jej formulácii niekoľko ešte nepoužitých pojmov. Matica $\mathbf{G(x)} \in \mathbb{R}_{m\times m}$ je definovaná nasledovne: $\mathbf{G(x)} = \operatorname{diag}(g_i(\mathbf{x}))$; $i = 1,2,...,m$.

Perturbáciou $\mathcal{P} \subset \mathbb{R}^n$ množiny prípustných riešení $\mathcal{F}$ budeme rozumieť množinu nasledujúceho tvaru:

$$\mathcal{P} = \{\mathbf{x} \in X \mid \sum_{i=1}^{m} \max[0, g_i(\mathbf{x})]^s < \alpha\}\ ;\ \ \alpha, s \in \mathbb{R}\ ,\ \alpha > 0\ ,\ s \geq 2\ .$$

Keďže pre množinu prípustných riešení $\mathcal{F}$ úlohy ŠÚ platí $g_i(\mathbf{x}) \leq 0$; $i = 1, 2, ..., m$,

$$\forall \mathbf{x} \in \mathcal{F}\ ,$$

je jasné, že $\mathcal{F} \subset \mathcal{P}$. Hranicu množiny $\mathcal{P}$ bodeme označovať $\partial\mathcal{P}$.

Ďalej si zadefinujeme nasledujúcu funkciu $a(\mathbf{x}) = \alpha - \sum_{i=1}^{m} \max[0, g_i(\mathbf{x})]^s$,

nadobúdajúcej nezáporné hodnoty na množine $\mathcal{P}$. Túto funkciu použijeme na konštrukciu nasledovnej funkcie $p(\mathbf{x}, \mathbf{y})$:

$$p(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{a(\mathbf{x})}{1 + \|\mathbf{y}\|^2}\ .$$

Pre túto funkciu platia nasledovné vlastnosti:

V1 $p(\mathbf{x}, \mathbf{y}) > 0$; $\quad \forall (\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in \mathcal{P} \times \mathbb{R}^m$.

V2 $\lim\limits_{x \to \partial\mathcal{P}} p(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = 0$.

Vďaka týmto svojim vlastnostiam bude hrať obrátená hodnota funkcie $p(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ v definícii nasledovnej Di Pillovej rozšírenej Lagrangeovej funkcie úlohu penalizačného parametra – oproti Rockafellarovej funkcii v nej bude už aj v penalizačnom parametri zohľadnené porušenie ohraničení. Pre (ŠÚ) bude mať teda už niekoľko krát spomínaná Di Pillova funkcia nasledovný tvar (v tejto časti kôli lepšiemu narábaniu budeme dávať prednosť vektorovému zápisu):

$$D(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \eta) = L(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \frac{\eta}{2p(\mathbf{x}, \mathbf{y})}\left(\|\mathbf{g}(\mathbf{x})\|^2 - \left\|\min\left[\mathbf{0}, \mathbf{g}(\mathbf{x}) + \frac{p(\mathbf{x}, \mathbf{y})\mathbf{y}}{\eta}\right]\right\|^2\right) + \\ + \left\|\nabla_x^T L(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \nabla \mathbf{g}(\mathbf{x}) + \mathbf{G}(\mathbf{x})^2 \mathbf{y}\right\|^2 , \tag{2.33}$$

kde $\mathbf{x} \in \mathcal{P} \subseteq \mathbb{R}^n$, $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^m$, $\eta > 0$ je parameter a $L(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ je klasická Lagrangeova funkcia.

Ľahko sa môžme presvedčiť, že táto funkcia má vlastnosti spomínané v Definícii 8.

Nech $(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}})$ je KT bod. Zo vzťahov (2.1) a (1.4)-(1.6) dostaneme, že posledný výraz v (2.33) je rovný nule. Ak $\mathbf{g}(\hat{\mathbf{x}}) < \mathbf{0}$, potom z (1.5) dostaneme $\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{0}$, a teda prostredný výraz je tiež rovný nule. Ak by sme mali $\mathbf{g}(\hat{\mathbf{x}}) = \mathbf{0}$, potom $\hat{\mathbf{y}} \geq \mathbf{0}$. Potom minimum v prostrednom výraze by bolo nulové a tým pádom celý prostredný výraz tiež. V oboch prípadoch by funkcia $D(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \eta)$ nadobúdala v KT bode $(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}})$ rovnaké hodnoty ako klasická Lagrangeova funkcia $L(\mathbf{x},\mathbf{y})$. Z týhto vzťahov a z konštrukcie klasickej Lagrangeovej funkcie (1.1) však ďalej dostávame, že $L(\hat{\mathbf{x}},\hat{\mathbf{y}}) = f(\hat{\mathbf{x}})$, a teda dostávame nasledovný vzťah

(2.34) $$D(\hat{\mathbf{x}},\hat{\mathbf{y}};\eta) = f(\hat{\mathbf{x}}) .$$

Poznámka: Všimnime si, že táto Di Pillova funkcia je, na rozdiel od predchádzajúcich definovaných na celom definičnom obore X, definovaná len pre $\mathbf{x} \in \mathcal{P}$. Zmenou hodnôt parametrov α a s však môžme meniť aj tvar množiny $\mathcal{P}$ a ich vhodnou voľbou tak môžeme pokryť všetky dôležité body $\mathbf{x}$ úlohy ŠÚ (prípadne ak X je ohraničená množina, tak táto môže byť potom zhodná s $\mathcal{P}$).

Pre naše potreby sa niekedy ako vhodnejší na ďalšiu analýzu ukáže nasledovný ekvivalentný zápis Di Pillovej funkcie[13]:

(2.35) $$\begin{aligned} D(\mathbf{x},\mathbf{y};\eta) &= f(\mathbf{x}) + \mathbf{y}^T \max\left[\mathbf{g}(\mathbf{x}), -\frac{p(\mathbf{x},\mathbf{y})}{\eta}\mathbf{y}\right] + \\ &+ \frac{\eta}{2p(\mathbf{x},\mathbf{y})}\left\|\max\left[\mathbf{g}(\mathbf{x}), -\frac{p(\mathbf{x},\mathbf{y})}{\eta}\mathbf{y}\right]\right\|^2 + \left\|\nabla_x^T L(\mathbf{x},\mathbf{y})\nabla\mathbf{g}(\mathbf{x}) + \mathbf{G}(\mathbf{x})^2\mathbf{y}\right\|^2 , \end{aligned}$$

kde $\mathbf{x} \in \mathcal{P} \subseteq \mathbb{R}^n$, $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^m$ a $\eta > 0$ je parameter .

S použitím Di Pillovej funkcie $D(\mathbf{x},\mathbf{y};\eta)$ je úzko spätá aj nasledovná definícia úrovňovej množiny $\Omega(\mathbf{x},\mathbf{y};\eta)$, ktorá nám, okrem iného, pomôže aj pri ďalšej analýze tejto funkcie.

DEF 11: *Zvoľme ľubovoľný bod* $(\boldsymbol{x}_0, \boldsymbol{y}_0) \in \mathcal{P} \times \mathbb{R}^m$.

Potom $\Omega(\boldsymbol{x}_0, \boldsymbol{y}_0;\eta) = \{(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) \in \mathcal{P} \times \mathbb{R}^m \mid D(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y};\eta) \le D(\boldsymbol{x}_0,\boldsymbol{y}_0;\eta)\}$.

Poznámka: Vďaka konštrukcii množiny $\mathcal{P}$ s výberom bodu $(\mathbf{x}_0,\mathbf{y}_0) \in \mathcal{P} \times \mathbb{R}^m$ v Definícii 11 nemáme problém. Za bod $(\mathbf{x}_0,\mathbf{y}_0)$ môžme zvoliť ľubovoľný bod $(\mathbf{x},\mathbf{y}) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m$ a potom nastavíme konštanty α a s tak, aby bolo splnené

---

[13] Preformulovaním do tvaru

$$D(\mathbf{x},\mathbf{y};\eta) = f(\mathbf{x}) + \frac{1}{2\eta p(\mathbf{x},\mathbf{y})}\sum_{i=1}^{m}(\max[\eta g_i(\mathbf{x}) + y_i p(\mathbf{x},\mathbf{y}),0]^2 - [y_i p(\mathbf{x},\mathbf{y})]^2) + \left\|\nabla_x^T L(\mathbf{x},\mathbf{y})\nabla\mathbf{g}(\mathbf{x}) + \mathbf{G}(\mathbf{x})^2\mathbf{y}\right\|^2$$

by sme zistili, že ak položíme $p(\mathbf{x},\mathbf{y}) \equiv 1$, tak bez výrazu $\left\|\nabla_x^T L(\mathbf{x},\mathbf{y})\nabla\mathbf{g}(\mathbf{x}) + \mathbf{G}(\mathbf{x})^2\mathbf{y}\right\|^2$ je tvar tejto funkcie totožný s tvarom Rockafellarovej funkcie $R(\mathbf{x},\mathbf{y};\eta)$.

$$\sum_{i=1}^{m} \max[0, g_i(\mathbf{x}_0)]^s < \alpha \ .$$

Ak sú jednotlivé funkcie $f(\mathbf{x})$ a $g_i(\mathbf{x})$; $i = 1,2,...m$ triedy C^1, potom je aj funkcia $D(\mathbf{x},\mathbf{y};\eta)$ triedy C^1 a jej gradient (podľa premennej **x** a **y**) vyzerá nasledovne:

$$\begin{aligned}\nabla_x D(\mathbf{x},\mathbf{y};\eta) = {} & \nabla_x L(\mathbf{x},\mathbf{y}) + \frac{\eta}{p(\mathbf{x},\mathbf{y})} \nabla g(\mathbf{x}) \max[\mathbf{g}(\mathbf{x}), -\frac{p(\mathbf{x},\mathbf{y})}{\eta}\mathbf{y}] + \\ & + \frac{s\eta}{2a(\mathbf{x})p(\mathbf{x},\mathbf{y})} \left\| \max[\mathbf{g}(\mathbf{x}), -\frac{p(\mathbf{x},\mathbf{y})}{\eta}\mathbf{y}] \right\|^2 \sum_{i=1}^{m} \nabla g_i(\mathbf{x}) \max[0, g_i(\mathbf{x})]^{s-1} + \\ & + \mathbf{Q}(\mathbf{x},\mathbf{y})[\nabla_x^T L(\mathbf{x},\mathbf{y}) \nabla \mathbf{g}(\mathbf{x}) + \mathbf{G}(\mathbf{x})^2 \mathbf{y}]\end{aligned} \tag{2.36}$$

kde $\mathbf{Q}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = 2[\nabla_x^2 L(\mathbf{x},\mathbf{y}) \nabla \mathbf{g}(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^{m} \nabla^2 g_i(\mathbf{x}) \nabla_x L(\mathbf{x},\mathbf{y}) \mathbf{e}_i^T + 2\nabla \mathbf{g}(\mathbf{x}) \mathbf{G}(\mathbf{x}) \mathbf{Y}]$,

$\mathbf{Y} \in \mathbb{R}_{m\times m}$, $\mathbf{Y} = \mathrm{diag}(y_i)$; $i = 1,2,...,m$ a $\mathbf{e}_i$ je m-rozmerný jednotkový vektor jednotkou na i-tom mieste.

$$\begin{aligned}\nabla_y D(\mathbf{x},\mathbf{y};\eta) = {} & \max[\mathbf{g}(\mathbf{x}), -\frac{p(\mathbf{x},\mathbf{y})}{\eta}\mathbf{y}] + \frac{\eta}{a(\mathbf{x})} \left\| \max[\mathbf{g}(\mathbf{x}), -\frac{p(\mathbf{x},\mathbf{y})}{\eta}\mathbf{y}] \right\|^2 \mathbf{y} + \\ & + 2\mathbf{M}(\mathbf{x})[\nabla_x^T L(\mathbf{x},\mathbf{y}) \nabla \mathbf{g}(\mathbf{x}) + \mathbf{G}(\mathbf{x})^2 \mathbf{y}]\end{aligned} , \tag{2.37}$$

kde $\mathbf{M}(\mathbf{x}) = [\nabla^T \mathbf{g}(\mathbf{x}) \nabla \mathbf{g}(\mathbf{x}) + \mathbf{G}(\mathbf{x})^2]$.

Poznámka: Všimnime si, že ak je splnená podmienka regularity, tak matica $\mathbf{M}(\mathbf{x})$ je kladne definitná, a teda je regulárna.

Keďže nasledujúci predpoklad bude niekoľkokrát použitý v ďaľšej časti, oplatí sa ho naformulovať zvlášť a kôli lepšiemu prehľadu ho budeme označovať DP.

DP Jedna z nasledujúcich dvoch podmienok je splnená:

a) $\forall \mathbf{x} \in \mathcal{P} \setminus \mathcal{F}$

$$\sum_{i: g_i(\hat{\mathbf{x}})>0} \left[1 + \frac{s}{2} \frac{\left\| \max[\mathbf{g}(\mathbf{x}), -\frac{p(\mathbf{x},\mathbf{y})}{\eta}\mathbf{y}] \right\|^2 g_i(\mathbf{x})^{s-2}}{a(\mathbf{x})} \right] g_i(\mathbf{x}) \nabla g_i(\mathbf{x}) < 0 \ .$$

b) $\mathbf{x}_0 \in \mathcal{F}$.

Nech $(\hat{\mathbf{x}},\hat{\mathbf{y}})$ je KT bodom (ŠÚ) (bod $\hat{\mathbf{x}}$ je prípustným riešením tejto úlohy, a teda predpoklad DP je splnený). Zo vzťahov (1.4)-(1.6) a vlastnosti V1 funkcie $p(\mathbf{x},\mathbf{y})$ máme, že $\max[\mathbf{g(x)},-\frac{p(\mathbf{x},\mathbf{y})}{\eta}\mathbf{y}]=\mathbf{0}$.

Zo vzťahu (2.1) a (1.5) podobne dostaneme, že $\left\|\nabla_x^T L(\mathbf{x},\mathbf{y})\nabla\mathbf{g(x)}+\mathbf{G(x)}^2\mathbf{y}\right\|=0$,

a teda platí $$\nabla_x D(\hat{\mathbf{x}},\hat{\mathbf{y}};\eta)=0\ ,$$

$$\nabla_y D(\hat{\mathbf{x}},\hat{\mathbf{y}};\eta)=0\ ,$$

z čoho je jasné, že $(\hat{\mathbf{x}},\hat{\mathbf{y}})$ je stacionárny bod funkcie $D(\mathbf{x},\mathbf{y};\eta)$.

Poznámka: Ako sme si práve ukázali, ak $(\hat{\mathbf{x}},\hat{\mathbf{y}})$ je KT bod (ŠÚ), potom je zároveň aj stacionárnym bodom Di Pillovej funkcie $D(\mathbf{x},\mathbf{y};\eta)$. Platí však aj opačná implikácia? Z určitej podobnosti s funkciou $R(\mathbf{x},\mathbf{y};\eta)$ (viď referencia 13) by sme mohli intuitívne usúdiť, že áno. Je ale tomu skutočne tak? Odpoveď skúsime nájsť v ďalšom pokračovaní.

VETA 9: *Nech je splnená podmienka regularity a predpoklad DP.*

Potom pre dostatočne veľké η a $\forall\boldsymbol{(x,y)}\in\Omega\boldsymbol{(x_0,y_0;}\eta\boldsymbol{)}$ platí

$$\left\|\max\boldsymbol{[g(x)},-\frac{p(x,y)}{\eta}\boldsymbol{y]}\right\|\le\left\|\nabla D(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y};\eta)\right\|\ .$$

Dôkaz: Je možné nájsť v Di Pillo, Lucidi [12], str. 388.

Nech $(\hat{\mathbf{x}},\hat{\mathbf{y}})\in\Omega(\mathbf{x}_0,\mathbf{y}_0;\eta)$ je stacionárnym bodom funkcie $D(\mathbf{x},\mathbf{y};\eta)$, hodnota parametra η je dostatočne veľká a je splnený predpoklad DP spolu s príslušnou podmienkou regularity. Z Vety 9 hneď dostávame, že $\left\|\max[g(\mathbf{x}),-\frac{p(\mathbf{x},\mathbf{y})}{\eta}\mathbf{y}]\right\|=0$,

a teda

$$\max[g_i(\mathbf{x}),-\frac{p(\mathbf{x},\mathbf{y})}{\eta}y_i]=0\ ;\ i=1,2,...,m\ . \tag{2.38}$$

Zo vzťahu (2.38) dostávame

$$g_i(\mathbf{x})\le 0\ ;\ i=1,2,...,m\ ,$$

čo je totožné s KT podmienkou (1.4). Z vlastnosti V1 funkcie $p(\mathbf{x},\mathbf{y})$ a podmienky (2.38) máme

$$y_i \geq 0 \ ; \ i = 1,2,...,m \ ,$$

čo je totožné s KT podmienkou (1.6). Z tohto a z podmienky (2.38) ďalej dostávame nasledovné implikácie:

$$\begin{aligned} g_i(\mathbf{x}) < 0 \quad &\Rightarrow \quad y_i = 0 \\ g_i(\mathbf{x}) = 0 \quad &\Rightarrow \quad y_i \geq 0 \end{aligned} ,$$

z čoho dostaneme, že podmienka (1.5) je splnená. Zo stacionarity funkcie $D(\mathbf{x},\mathbf{y};\eta)$ v bode $(\hat{\mathbf{x}},\hat{\mathbf{y}})$ dostávame nulovosť vzťahov (2.36) a (2.37). Z (2.37) a zo vzťahu (2.38) dostávame systém

$$2\mathbf{M}(\mathbf{x})[\nabla_x^T L(\mathbf{x},\mathbf{y})\nabla\mathbf{g}(\mathbf{x}) + \mathbf{G}(\mathbf{x})^2\mathbf{y}] = \mathbf{0} \ .$$

Keďže však matica $\mathbf{M}(\mathbf{x})$ je regulárna, musí platiť $[\nabla_x^T L(\mathbf{x},\mathbf{y})\nabla\mathbf{g}(\mathbf{x}) + \mathbf{G}(\mathbf{x})^2\mathbf{y}] = \mathbf{0}$.

Z tohto a z nulovosti vzťahu (2.36) dostávame nakoniec $\nabla_x L(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \mathbf{0}$, čo je splnenie KT podmienky (2.1), a teda takýto stacionárny bod $(\hat{\mathbf{x}},\hat{\mathbf{y}})$ je KT bodom (ŠÚ).

Poznámka: Ako sme si práve ukázali, ak sú splnené všetky predpoklady z Vety 9 a hodnota parametra η je dostatočne veľká, potom ak $(\hat{\mathbf{x}},\hat{\mathbf{y}}) \in \Omega(\mathbf{x}_0,\mathbf{y}_0;\eta)$ je stacionárnym bodom $D(\mathbf{x},\mathbf{y};\eta)$ potom je KT bodom (ŠÚ) a naopak. Keďže však bod $(\mathbf{x}_0,\mathbf{y}_0)$ v Definícii 11 bol ľubovoľný, tak táto bijekcia platí pre celú množinu $\mathcal{P} \times \mathbb{R}^m$.

Ľahko si môžme všimnúť, že na rozdiel od predošlých rozšírených Lagrangeových funkcií, Di Pillova funkcia $D(\mathbf{x},\mathbf{y};\eta)$ kôli prítomnosti výrazu $\left\|\nabla_x^T L(\mathbf{x},\mathbf{y})\nabla\mathbf{g}(\mathbf{x}) + \mathbf{G}(\mathbf{x})^2\mathbf{y}\right\|^2$ nespĺňa Roodeho podmienky R1-R3, a teda pri hľadaní optimálneho riešenia $\hat{\mathbf{x}}$ (ŠÚ) nemožno postupovať cestou hľadania sedlového bodu $(\overline{\mathbf{x}},\overline{\mathbf{y}})$, ako tomu bolo u predchádzajúcich funkcií. Vynára sa nám teda otázka: Aký charakter má stacionárny bod $(\hat{\mathbf{x}},\hat{\mathbf{y}})$ funkcie $D(\mathbf{x},\mathbf{y};\eta)$ zodpovedajúci (lokálne) optimálnemu riešeniu $\hat{\mathbf{x}}$ spolu s príslušným KT multiplikátorom $\hat{\mathbf{y}}$? Odpoveď na toto nájdeme v nasledovnej vete.

VETA 10: *Nech je splnená podmienka regularity a predpoklad DP.*

Potom pre dostatočne veľkú hodnotu parametra η, *ak* $(\overline{\mathbf{x}},\overline{\mathbf{y}})\in\Omega(\mathbf{x}_0,\mathbf{y}_0;\eta)$ *je voľné lokálne minimum funkcie* $D(\mathbf{x},\mathbf{y};\eta)$, *potom* $\overline{\mathbf{x}}$ *je lokálne optimálne riešenie (ŠÚ) a* $\overline{\mathbf{y}}$ *je príslušný KT multiplikátor z vety 1.*

Dôkaz: Je možné nájsť v Di Pillo, Lucidi [12], str. 391.

Ako vidíme z tejto vety, voľne povedané, úlohu sedlového bodu prevzal pri použití Di Pillovej funkcie $D(\mathbf{x},\mathbf{y};\eta)$ bod lokálneho minima $(\overline{\mathbf{x}},\overline{\mathbf{y}})$. Ak teda pre dostatočne veľkú hodnotu parametra η nájdeme voľné (lokálne) minimum $(\overline{\mathbf{x}},\overline{\mathbf{y}})\in\Omega(\mathbf{x}_0,\mathbf{y}_0;\eta)$ funkcie $D(\mathbf{x},\mathbf{y};\eta)$, potom sme zároveň našli (lokálne) optimálne riešenie $\overline{\mathbf{x}}$ (ŠÚ). Majúc stále na mysli poslednú poznámku toto platí pre každé takéto $(\overline{\mathbf{x}},\overline{\mathbf{y}})\in\mathcal{P}\times\mathbb{R}^m$.

Nech $\hat{\mathbf{x}}$ je teraz globálne optimálnym riešením (ŠÚ) a nech je splnená podmienka regularity. Potom k nemu existuje príslušný KT multiplikátor $\hat{\mathbf{y}}$ taký, že $(\hat{\mathbf{x}},\hat{\mathbf{y}})$ je KT párom (ŠÚ), a teda aj stacionárnym bodom funkcie $D(\mathbf{x},\mathbf{y};\eta)$. V takomto prípade, ako sme si už skôr ukázali, nám platí vzťah (2.34), teda $D(\hat{\mathbf{x}},\hat{\mathbf{y}};\eta)=f(\hat{\mathbf{x}})$. Nech teraz $(\overline{\mathbf{x}},\overline{\mathbf{y}})$ je globálnym voľným minimom funkcie $D(\mathbf{x},\mathbf{y};\eta)$ pre dostatočne veľké η. Nech $\mathbf{x}_0\in\mathcal{F}$. Je jasné, že $(\overline{\mathbf{x}},\overline{\mathbf{y}})\in\Omega(\mathbf{x}_0,\mathbf{y}_0;\eta)$. Keďže bod $(\overline{\mathbf{x}},\overline{\mathbf{y}})$ je bod minima funkcie $D(\mathbf{x},\mathbf{y};\eta)$, je zároveň jej stacionárnym bodom, a teda, ako sme si už ukázali, aj KT bodom (ŠÚ). Platí nám teda vzťah (2.34), $D(\overline{\mathbf{x}},\overline{\mathbf{y}};\eta)=f(\overline{\mathbf{x}})$. Keďže $(\overline{\mathbf{x}},\overline{\mathbf{y}})$ je bod minima, tak platí

$$f(\overline{\mathbf{x}})=D(\overline{\mathbf{x}},\overline{\mathbf{y}};\eta)\leq D(\hat{\mathbf{x}},\hat{\mathbf{y}};\eta)\ .$$

Na druhej strane, keďže $\hat{\mathbf{x}}$ je optimálnym riešením (ŠÚ) a $\hat{\mathbf{y}}$ je príslušný KT multiplikátor, tak platí

$$f(\hat{\mathbf{x}})\leq f(\overline{\mathbf{x}})=D(\overline{\mathbf{x}},\overline{\mathbf{y}};\eta)\ .$$

Z tohto teda dostávame, že

$$f(\hat{\mathbf{x}})=f(\overline{\mathbf{x}})$$

a

$$D(\overline{\mathbf{x}},\overline{\mathbf{y}};\eta)=D(\hat{\mathbf{x}},\hat{\mathbf{y}};\eta)\ .$$

Funkcie $f(\mathbf{x})$ a $D(\mathbf{x},\mathbf{y};\eta)$ nadobúdajú teda rovnaké hodnoty v každom bode, ktorý je na jednej strane globálne optimálnym riešením (ŠÚ), na druhej strane globálnym voľným minimom funckcie $D(\mathbf{x},\mathbf{y};\eta)$.

Na záver si toto všetko zhrnieme do nasledovnej vety.

VETA 11: *Nech $\mathcal{F} \neq \emptyset$ a nech e splnená podmienka regularity.*

Potom pre dostatočne veľkú hodnotu parametra η platí: Ak $\hat{\mathbf{x}}$ je globálne optimálnym riešením (ŠÚ) a $\hat{\mathbf{y}}$ je príslušným Lagrangeovým multiplikátorom, potom $(\hat{\mathbf{x}},\hat{\mathbf{y}})$ je globálnym minimom funkcie $D(\mathbf{x},\mathbf{y};\eta)$ na $\mathcal{P}\times\mathbb{R}^m$ a naopak.

Dôkaz: Je možné nájsť v Di Pillo, Lucidi [12], str. 391.

Ak by sme uvažovali úlohu (KÚ), tak každý KT bod $(\hat{\mathbf{x}},\hat{\mathbf{y}})$ nám označuje optimálne riešenie $\hat{\mathbf{x}}$ úlohy (KÚ) a príslušný KT multiplikátor $\hat{\mathbf{y}}$. Zároveň však vieme, že každé lokálne optimálne riešenie tejto úlohy je zároveň aj jej globálne optimálnym riešením. Ak sú splnené všetky podmienky z Vety 9, tak pre dostatočne veľkú hodnotu parametra η je každý stacionárny bod funkcie $D(\mathbf{x},\mathbf{y};\eta)$ zároveň KT bodom úlohy (KÚ). Každý KT pár (KÚ) je zároveň aj optimálnym riešením (jeho **x**-ová zložka) (KÚ) a podľa Vety 11 aj globálnym minimom funkcie $D(\mathbf{x},\mathbf{y};\eta)$. Teda každý stacionárny bod funkcie $D(\mathbf{x},\mathbf{y};\eta)$ je zároveň jej globálnym minimom. Z tohoto teda máme, že pre úlohu konvexného programovania (KÚ) je Di Pillova funkcia $D(\mathbf{x},\mathbf{y};\eta)$ pre dostatočne veľkú hodnotu parametra η konvexnou funkciou v oboch premenných **x** a **y**.

3. Numerické experimenty.

V tejto časti sa budeme zaoberať aplikovaním metódy rozšírených Lagrangeových funkcií na úlohu konvexného programovania (KÚ):

(KÚ) **Min** $\{ f(\mathbf{x}) \mid g_i(\mathbf{x}) \le 0; i = 1,2,...,m \}$,

kde $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, $g_i : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ sú *konvexné funkcie.*

Ako vidíme množinu prípustných riešení máme vyjadrenú pomocou ohraničení v tvare nerovností, preto sme v jednotlivých experimentoch použili Rockafellarovu rozšírenú Lagrangeovu funkciu

$$R(\mathbf{x},\mathbf{y};\eta) = f(\mathbf{x}) + \frac{1}{2\eta}\sum_{i=1}^{m}(\max[0,\eta g_i(\mathbf{x}) + y_i]^2 - y_i^2)$$

a zamerali sme sa predovšetkým na pozorovanie kvality získaných riešení a numerickú náročnosť použitého *Rockafellarovho algoritmu*:

RA1 Zvoliť $\eta^0 > 0$, $\mathbf{y}^0 > \mathbf{0}$, presnosť $\varepsilon > 0$ a nastaviť „počítadlo“ $k = 0$.

RA2 Nájsť minimum $\mathbf{x}^k \in X$ funkcie $R(\mathbf{x},\mathbf{y}^k;\eta^k)$. Ak takéto neexistuje zväčši hodnotu parametra η^k a vykonaj RA2 ešte raz.

RA3 Test presnosti: ak $g_i(\mathbf{x}^k) < \varepsilon$; $\forall i = 1,2,...,m$, $\mathbf{x}^k$ je ε-približným riešením úlohy. STOP.

RA4 Modifikácia vektora Lagrangeových multiplikátorov:

$$y_i^{k+1} = \max[0,\eta g_i(\mathbf{x}^k) + y_i^k];\ i = 1,2,...,m,\ \eta^{k+1} = \eta^k\ .$$

RA5 $k = k+1$, GOTO RA2.

3.1 Generátor úloh.

Všetky pozorovania boli vykonané na konvexnej úlohe s kvadratickou účelovou funkciou s lineárnymi ohraničeniami (LQ):

$$\textbf{(LQ)} \qquad \textit{Min} \quad \{\frac{1}{2}\mathbf{x}^T\mathbf{G}\mathbf{x} + \mathbf{h}^T\mathbf{x} \mid \mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b} \le 0\} \ ,$$

kde **G** je kladne definitná matica.

Úlohy boli generované pomocou generátora, ktorý vychádzal z nasledujúceho špeciálneho tvaru klasickej Lagrangeovej funkcie $L(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ pre úlohu LQ

$$L(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{1}{2}\mathbf{x}^T\mathbf{G}\mathbf{x} + \mathbf{h}^T\mathbf{x} + \mathbf{y}^T(\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}) \tag{3.1}$$

a z nej odvodených KT podmienok:

$$\mathbf{G}\hat{\mathbf{x}} + \mathbf{h} + \mathbf{A}^T\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{0} \ , \tag{3.2}$$

$$\mathbf{A}\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{b} \le \mathbf{0} \ , \tag{3.3}$$

$$\hat{\mathbf{y}}^T(\mathbf{A}\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{b}) = \mathbf{0} \ , \tag{3.4}$$

$$\hat{\mathbf{y}} \ge \mathbf{0} \ . \tag{3.5}$$

Keďže ide o úlohu konvexného programovania KT podmienky (3.2) - (3.5) sú nutnými a zároveň aj postačujúcimi podmienkami optimálneho riešenia úlohy (LQ). Tieto KT podmienky však možno sformulovať len za podmienky, že platí podmienka regularity pre ohraničenia, teda riadky $\mathbf{A}_i$ matice $\mathbf{A}_{n\times m}(\mathbb{R})$ musia byť pre všetky prvky $i \in I_0(\hat{\mathbf{x}})$ z množiny indexov aktívnych ohraničení lineárne nezávislé. Preto je rozumné žiadať, aby hodnosť matice **A** bola n.

Ďalej keďže pri hľadaní optimálneho riešenia úlohy (LQ) bol použitý Rockafellarov algoritmus, treba zebezpečiť existenciu sedlového bodu Rockafellarovej funkcie $R(\mathbf{x}, \mathbf{y}^k; \eta^k)$. Preto musí byť splnená podmienka silnej komplementarity (1.9), teda

$$\hat{y}_i \ne 0, \ \forall i \in I_0(\hat{\mathbf{x}})$$

a postačujúca podmienka optimality druhého rádu pre úlohu (LQ) (1.7), ktorú si môžme priamo odvodiť z Lagrangeovej funkcie $L(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ vystupujúcej vo vzťahu (3.1), teda

$\forall \mathbf{z} \in \mathbb{R}^n$, $\mathbf{z} \ne \mathbf{0}$ také, že $\mathbf{A}\mathbf{z} = \mathbf{0}$ platí $\mathbf{z}^T\mathbf{G}\mathbf{z} > 0$.

Preto sme pri generovaní úlohy (LQ) postupovali podľa nasledovnej schémy, kde sme si najprv zvolili ľubovoľné optimálne riešenie $\hat{\mathbf{x}}$ generovanej úlohy (LQ), vektor KT multiplikátorov $\hat{\mathbf{y}} \geq \mathbf{0}$, vhodné matice **G**, **A** a následne sme dopočítali vektor **h** z účelovej funkcie a vektor **b** z ohraničení:

Generátor úlohy (LQ)

G1 Zvoliť rozmery úlohy n (počet premenných) a m (počet ohraničení).

G2 Generovanie kladne definitnej matice $\mathbf{G}_{n\times n}$ [14] podľa predpisu $\mathbf{G} = \mathbf{B}^T\mathbf{B} + \mathbf{D}$, kde **B** je ľubovoľná matica a **D** je diagonálna matica s ľubovoľnými kladnými prvkami na hlavnej diagonále.

G3 Generovanie matice $\mathbf{A}_{m\times n}$ s hodnosťou n.

G4 Voľba optimálneho riešenia $\hat{\mathbf{x}} \in \mathbb{R}^n$.

G5 Voľba KT multiplikátorov $\hat{\mathbf{y}} \in \mathbb{R}^m$, $\hat{\mathbf{y}} \geq \mathbf{0}$ [15].

G6 Dopočítaj vektor $\mathbf{h} = -(\mathbf{G}\hat{\mathbf{x}} + \mathbf{A}^T\hat{\mathbf{y}})$.

G7 Ak $\hat{y}_i > 0$, potom $b_i = (\mathbf{A}\hat{\mathbf{x}})_i$;
ak $\hat{y}_i = 0$, potom $b_i = (\mathbf{A}\hat{\mathbf{x}})_i + \beta_i$ [16], kde β_i je ľubovoľné kladné číslo.

Ak máme takto nagenerovanú úlohu (LQ), môžme pristúpiť k skúmaniu numerickej zložitosti a vlastností riešení $\bar{\mathbf{x}}$ získaných aplikovaním metódy rozšírených Lagrangeových funkcií.

V nasledovných experimentoch sme pre každé nastavenie riešili 10 rôznych úloh a príslušné charakteristiky sme spriemerovali. Sledovali sme najmä tieto charakteristiky:

A*bsolútne presnosti*:

$\|\bar{\mathbf{x}} - \hat{\mathbf{x}}\|$ dosiahnutého riešenia $\bar{\mathbf{x}} = \mathbf{x}^k$,

$\|\bar{\mathbf{y}} - \hat{\mathbf{y}}\|$ KT multiplikátora $\bar{\mathbf{y}} = \mathbf{y}^k$.

Relatívne presnosti:

[14] Keďže G je kladne definitná matica, tak postačujúca podmienka druhého rádu je splnená automaticky pre každé $\mathbf{z} \neq \mathbf{0}$.
[15] Pri voľbe $\hat{\mathbf{u}}$ si však treba dať pozor, aby počet zvolených $u_i > 0$ nebol väčší, ako počet premenných $\hat{x}_i$, aby bolo možné splniť KT podmienku (3.4), teda $\forall i \in I_0(\hat{\mathbf{x}})$ musí platiť $(\mathbf{Ax} - \mathbf{b})_i = 0$. Viď krok G7.
[16] Takouto voľbou zložky b_i vektora **b** bude splnená silná podmienka komplementarity (1.9).

$\dfrac{\|\bar{\mathbf{x}}-\hat{\mathbf{x}}\|}{1+\|\hat{\mathbf{x}}\|}$ dosiahnutého riešenia $\bar{\mathbf{x}}=\mathbf{x}^k$,

$\dfrac{\|\bar{\mathbf{y}}-\hat{\mathbf{y}}\|}{1+\|\hat{\mathbf{y}}\|}$ KT multiplikátora $\bar{\mathbf{y}}=\mathbf{y}^k$.

Relatívnu presnosť účelovej funkcie, *priemerný počet iterácií* (z desiatich úloh, pričom počtom iterácií myslíme počet opakovaní krokov RA2 – RA5 z Rockafellarovho algoritmu) a *priemerný čas v sekundách*.

Poznámka: Pri riešení úloh v nasledovných experimentoch sme využili fakt, že keďže ide o úlohu konvexného programovania, tak Rockafellarova funkcia $R(\mathbf{x},\mathbf{y};\eta)$ je konvexná v premennej $\mathbf{x}$ a pre takúto úlohu je možné nájsť jej minimum v kroku RA2 pre ľubovoľnú kladnú hodnotu parametra η bez ďalšej prípadnej zmeny hodnoty parametra η v kroku RA2 počas aplikácie Rockafellarovho algoritmu.

Na záver ešte prezradíme, že všetky numerické experimenty boli vykonané v softweari „*Mathematica, ver. 4.0*“, a keďže vo všeobecnosti $R(\mathbf{x},\mathbf{y};\eta)\in C^1$, tak pri hľadaní voľného minima $\mathbf{x}^k$ Rockafellarovej funkcie $R(\mathbf{x},\mathbf{y}^k;\eta^k)$ v kroku RA2 sme použili Cauchyho metódu najväčšieho spádu, konkrétne aplikovaním príkazu FindMinimum[].

3.2 Prvý numerický experiment: Sledovanie vplyvu požadovanej presnosti na kvalitu získaných riešení a počet vykonaných iterácií.

V tomto experimente sme riešili úlohu so zafixovaným počtom pemenných $n=20$ a zafixovaným počtom ohraničení $m=15$. Testovaniu sme podrobili vplyv požadovanej presnosti ε z kroku RA3, teda $g_i(\bar{\mathbf{x}})<\varepsilon$; $i=1,2,...m$, na výslednú kvalitu získaných riešení $\bar{\mathbf{x}}$, $\bar{\mathbf{y}}$ a na počet iterácií (opakovaní) potrebných na získanie tohto riešenia. Hodnota „augmented“ parametra η bola pevne daná $\eta=1$. Za požadovanú presnosť sme postupne volili hodnoty $\varepsilon=10^{-1},10^{-2},...,10^{-6}$.

$n = 20,\ m = 15,\ \eta = 1$								
ε	*priemerný čas*	*priemerný počet iterácií*	$\lVert \bar{x} - \hat{x} \rVert$	$\lVert \bar{y} - \hat{y} \rVert$	$\frac{\lVert \bar{x} - \hat{x} \rVert}{1 + \lVert \hat{x} \rVert}$	$\frac{\lVert \bar{y} - \hat{y} \rVert}{1 + \lVert \hat{y} \rVert}$	$\frac{\lVert f(\bar{x}) - f(\hat{x}) \rVert}{1 + \lVert f(\hat{x}) \rVert}$
0,1	8,8	9,9	3,86E-02	2,08E-01	7,65E-04	4,37E-03	1,07E-05
0,01	10,9	12,6	5,29E-03	2,21E-02	1,08E-04	4,75E-04	1,10E-06
0,001	13,0	14,5	3,38E-04	1,59E-03	5,99E-06	3,08E-05	5,02E-08
0,0001	17,6	18,9	6,07E-05	2,27E-04	1,24E-06	4,82E-06	1,58E-08
0,00001	19,5	21,3	9,29E-06	1,06E-05	1,70E-07	2,29E-07	1,06E-09
0,000001	45,4	46,5	6,96E-06	5,11E-06	1,46E-07	1,16E-07	3,54E-10

Tabuľka 2: Vplyv požadovanej presnosti na kvalitu získaných riešení a počet iterácií.

Ako si môžeme pri zbežnom pohľade z výslednej tabuľky 2 všimnúť, výsledok v podstate zodpovedá intuitívnej predstave: čím sme požadovali vyššiu presnosť získaného riešenia, tým sme odstali aj kvalitnejšie optimálne riešenie $\bar{\mathbf{x}}$ spolu s príslušným vektorom KT multiplikátorov $\bar{\mathbf{y}}$. Ak sa však pozrieme na výsledky tohto experimentu bližšie, možno všimnúť, že kým počet iterácií potrebných na dosiahnutie požadovanej presnosti $\varepsilon = 10^{-1}$ až $\varepsilon = 10^{-5}$ rástol takmer lineárne, pri požadovanej presnosti $\varepsilon = 10^{-6}$ nastal v tomto trende výrazný zlom a počet potrebných iterácii nám neúmerne stúpol. Toto bolo zrejme dané štandardným nastavením presnosti reprezentácie čísel v pamäti počítača. Tiež si môžme všimnúť, že relatívna chyba získaných riešení je rádovo 100 krát nižšia ako požadovaná presnosť a môžme skonštatovať, že už aj pri relatívne malej presnosti $\varepsilon = 10^{-1}$ sme dostali pomerne veľmi kvalitné riešenia.

3.3 Druhý numerický experiment: Sledovanie vplyvu voľby hodnoty „augmented“ parametra η na kvalitu získaných riešení a počet vykonaných iterácií.

V tomto experimente sme, podobne ako aj v predchádzajúcom, riešili úlohu so zafixovaným počtom pemenných $n = 20$ a zafixovaným počtom ohraničení $m = 15$.

Testovaniu sme podrobili vplyv nastavenia hodnoty „augmented“ parametra η v Rockafellarovaj funkcii $R(\mathbf{x},\mathbf{y};\eta)$ na počet iterácií a získanú kvalitu riešení $\bar{\mathbf{x}}$ a $\bar{\mathbf{y}}$. Požadovaná presnosť bola pevne zvolená $\varepsilon = 10^{-5}$ a za hodnotu „augmented“ parametra η sme postupne volili hodnoty $\eta = 1,10,...,10^4$.

$n = 20,\ m = 15,\ \varepsilon = 10^{-5}$							
η	**priemerný čas**	**priemerný počet iterácií**	$\Vert\bar{x}-\hat{x}\Vert$	$\Vert\bar{y}-\hat{y}\Vert$	$\frac{\Vert\bar{x}-\hat{x}\Vert}{1+\Vert\hat{x}\Vert}$	$\frac{\Vert\bar{y}-\hat{y}\Vert}{1+\Vert\hat{y}\Vert}$	$\frac{\Vert f(\bar{x})-f(\hat{x})\Vert}{1+\Vert f(\hat{x})\Vert}$
1	21,9	24,8	6,06E-06	3,32E-04	3,13E-07	7,02E-06	2,23E-07
10	10,5	10,2	1,89E-04	1,91E-04	3,61E-06	6,32E-06	1,30E-08
100	20,4	20,8	4,23E-03	3,04E-03	8,06E-05	6,46E-05	9,66E-09
1000	33,6	32,9	7,92E-01	4,93E+00	1,55E-02	1,36E-01	9,43E-04
10000	67,8	64,7	1,60E+00	1,55E+01	3,15E-02	3,04E-01	6,98E-04

Tabuľka 3: Vplyv voľby „augmented“ parametra η na kvalitu získaných riešení a počet iterácií.

Z tejto tabuľky si možno všimnúť, že pri postupnom zvyšovaní hodnoty „augmented“ parametra η sa nám znižuje kvalita získaných riešení $\bar{\mathbf{x}}$ a KT multiplikátorov $\bar{\mathbf{y}}$, čo by na prvý pohľad mohlo protirečiť zdaniu, že pre vyššiu hodnotu parametra η bude viac penalizované porušenie ohraničení $g_i(\mathbf{x}) \le 0$; $i = 1,2,...,m$, a teda kvalita získaných riešení by mala byť lepšia. Ak sa však hlbšie zamyslíme, zistíme, že pre vyššie hodnoty parametra η sa nám zhoršuje podmienenosť Rockafellarovej funkcie $R(\mathbf{x},\mathbf{y};\eta)$, čo je aj dôvodom prečo nám kvalita takto získaných riešení $\bar{\mathbf{x}}$ postupne klesá. Pri pohľade na tabuľku 3 nám bije do očí pomerne nízka presnosť získaných riešení pre hodnoty parametra $\eta = 1000$ a $\eta = 10000$ oproti ostatným získaným riešeniam. Takisto si môžme aj všimnúť, že počet potrebných iterácií na získanie požadovaného riešenia je najnižší pre hodnotu parametra $\eta = 10$ a postupne dochádza aj v tomto smere k nárastu. Zjavný je najmä skok v počte iterácií pri hodnote $\eta = 10000$ a aj z tohto dôvodu sa nám javí zvolenie príliš veľkej hodnoty parametra η ako absolútne nevhodné. Takisto si môžme z tabuľky 3 všimnúť, že rozdiel v kvalite získaných riešení $\bar{\mathbf{x}}$ nie je pre jednostlivé voľby parametra $\eta = 1$ a $\eta = 10$ príliš veľký. Na druhej strane nám pri voľbe parametra $\eta = 10$ došlo k zjavnému veľkému zníženiu pomerného počtu iterácií. Toto môže byť spôsobené, ako sme už vyššie naznačili, lepším, no na druhej strane nie zas príliš veľkým, penalizovaním porušenia ohraničení.

Možno sa teda domnievať, že existuje akási optimálna hodnota parametra η, pri ktorej bude potrebný pomerne malý počet iterácií a na druhej strane bude zachovaná pomerne veľká presnosť získaných riešení.

3.4 Tretí numerický experiment: Sledovanie vplyvu počtu premenných vystupujúcich vo formulácii úlohy (LQ) na kvalitu získaných riešení a na iteračnú a časovú náročnosť.

V tomto experimente sme pri pevnej voľbe požadovanej presnosti $\varepsilon = 10^{-5}$ a parametra $\eta = 1$ riešili úlohu so zafixovaným počtom ohraničení $m = 10$ pri rôznom počte premenných n. Testovaniu sme podrobili vplyv počtu premenných n na kvalitu riešení a na iteračnú a časovú náročnosť.

$m = 10,\ \varepsilon = 10^{-5},\ \eta = 1$							
n	*priemerný čas*	*priemerný počet iterácií*	$\lVert\bar{x}-\hat{x}\rVert$	$\lVert\bar{y}-\hat{y}\rVert$	$\frac{\lVert\bar{x}-\hat{x}\rVert}{1+\lVert\hat{x}\rVert}$	$\frac{\lVert\bar{y}-\hat{y}\rVert}{1+\lVert\hat{y}\rVert}$	$\frac{\lVert f(\bar{x})-f(\hat{x})\rVert}{1+\lVert f(\hat{x})\rVert}$
10	8,2	49,7	4,96E-06	4,93E-05	1,42E-07	1,37E-06	1,90E-09
20	5,8	7,7	7,84E-06	4,01E-06	1,49E-07	1,01E-07	2,12E-09
30	13,8	7,9	1,90E-01	2,49E-01	2,87E-03	8,83E-04	8,19E-06
50	27,7	7,3	1,27E-01	2,09E-02	1,54E-03	7,40E-04	5,34E-06
100	98,5	8,3	8,57E-02	8,43E-03	7,18E-04	1,91E-04	1,65E-06

Tabuľka 4: Vplyv hodnoty voľby počtu premenných n na kvalitu získaných riešení a na časovú a iteračnú náročnosť.

Z tabuľky si možno všimnúť viacero skutočností. Tou prvou je, že najväčšia presnosť získaných riešení $\bar{\mathbf{x}}$ bola dosiahnutá pri počte premenných n=10 a n=20.

Ďalej si môžme všimnúť, že pri hodnotách n=20 až n=100 bol potrebný pomerne vyrovnaný počet iterácií na dosiahnutie požadovaného riešenia (presnosti). Naproti tomu pre hodnotu n=10 si môžme všimnúť, že počet iterácií potrebných na získanie požadovaného riešenia $\overline{\mathbf{x}}$ bol voči ostatným oveľa vyšší. Na otázku prečo je tomu tak nám vrhne viac svetla posledný numerický experiment 5.

Nakoniec si môžme všimnúť, že so vzrastajúcim počtom premenných n sa nám zvyšuje aj čas potrebný na získanie požadovaného riešenia $\overline{\mathbf{x}}$, s výnimkou n=10, kde toto bolo spôsobené extrémnym počtom potrebných iterácií na dosiahnutie požadovaného riešenia. Toto je zrejme spôsobené práve nárastom dimenzie n. Tu na získanie optimálneho riešenia $\mathbf{x}^k$ Rockafellarovej funkcie $R(\mathbf{x}, \mathbf{y}^k; \eta^k)$ z kroku RA2 Rockafellarovho algoritmu nám treba viac času, lebo samozrejme spolu s počtom premenných n nám rastie aj časová náročnosť tejto vnútornej mikroiterácie.

3.5 Štvrtý numerický experiment: Sledovanie vplyvu počtu ohraničení vystupujúcich vo formulácii úlohy (LQ) na kvalitu získaných riešení a na iteračnú náročnosť.

V tomto experimente sme pri pevnej voľbe požadovanej presnosti $\varepsilon = 10^{-5}$ a parametra $\eta = 1$ riešili úlohu so zafixovaným počtom premenných $n = 20$ pri rôznom počte ohraničení m. Testovaniu sme podrobili vplyv počtu ohraničení m na kvalitu riešení a na iteračnú a časovú náročnosť.

$n = 20,\ \varepsilon = 10^{-5},\ \eta = 1$							
m	***priemerný čas***	***priemerný počet iterácií***	$\lVert \overline{x} - \hat{x} \rVert$	$\lVert \overline{y} - \hat{y} \rVert$	$\frac{\lVert \overline{x} - \hat{x} \rVert}{1 + \lVert \hat{x} \rVert}$	$\frac{\lVert \overline{y} - \hat{y} \rVert}{1 + \lVert \hat{y} \rVert}$	$\frac{\lVert f(\overline{x}) - f(\hat{x}) \rVert}{1 + \lVert f(\hat{x}) \rVert}$
3	2,0	4,7	8,11E-07	9,56E-07	1,67E-08	4,06E-08	1,49E-09
6	2,9	4,8	1,11E-04	1,41E-05	2,11E-06	8,86E-07	4,88E-07
9	4,2	5,7	4,33E-04	5,44E-05	7,16E-06	2,40E-06	1,78E-06
12	8,6	10,8	1,53E-05	7,82E-06	2,85E-07	1,82E-07	1,09E-09
15	21,9	24,8	6,06E-06	3,32E-04	3,13E-07	7,02E-06	2,23E-07
18	41,6	42,6	5,72E-06	3,48E-05	1,13E-07	7,07E-07	8,99E-10
21	80,2	72,3	4,70E-06	9,13E-05	8,90E-06	1,50E-06	7,18E-10

Tabuľka 5: Vplyv hodnoty voľby počtu ohraničení m na kvalitu získaných riešení a na iteračnú náročnosť.

Z tabuľky si možno všimnúť, že medzi kvalitou riešení a počtom ohraničení m vo všeobecnosti neexistuje nejaká monotónna závislosť.

Na druhej strane si môžme všimnúť, že spolu s rastúcim počtom ohraničení m nám rástol aj potrebný počet iterácií , ktorý bol tým výraznejší, čím bola väčšia hodnota parametra m. Toto je zrejme zapríčinené tým, že pre vyšší počet ohraničení, môže byť presnosť ε porušená pri viacerých ohraničeniach, a teda na takúto úlohu treba viackrát použiť Rockafellarov algoritmus, a teda bude väčšia iteračná, a s ňou spojená aj časová zložitosť.

3.6 Piaty numerický experiment: Sledovanie vplyvu počtu aktívnych ohraničení vo formulácii úlohy (LQ) na kvalitu získaných riešení a na iteračnú náročnosť.

Ako vieme množinu prípustných riešení úlohy (KÚ) (v našom prípade (LQ)) máme naformulovanú pomocou m ohraničení $g_i(\mathbf{x}) \le 0$; $i = 1,2,...,m$. V skutočnosti sa nám však môže stať, že aj napriek týmto formálnym obmedzeniam bude pre optimálne riešenie $\hat{\mathbf{x}}$ platiť v týchto ohraničeniach ostrá nerovnosť, a teda takéto riešenie bude totožné s voľným minimom účelovej funkcie $f(\mathbf{x})$. V takomto prípade by sme pri nájdení voľného minima $\mathbf{x}^k$ funkcie $R(\mathbf{x},\mathbf{y}^k;\eta^k)$ v kroku RA2 teoreticky dosiahli splnenie podmienky požadovanej presnosti hneď (v prvej iterácii). Ako vidieť v skutočnosti nám plnia funkciu ohraničení len aktívne ohraničenia, t. j. také v ktorých platí $g_i(\mathbf{x}) = 0$; $i \in I_0(\hat{\mathbf{x}})$. Preto budeme v tomto experimente skúmať vplyv počtu *m0*[17] aktívnych ohraničení na kvalitu získaných riešení a iteračnú a časovú náročnosť algoritmu pri zafixovaných hodnotách počtu premenných *n=10*, zafixovanom celkovom počte ohraničení m, požadovanej presnosti $\varepsilon \equiv 10^{-5}$ a voľbe hodnoty parametra $\eta \equiv 1$.

[17] Počet aktívnych ohraničení sme generovali určením počtu KT multiplikátorov $\hat{y}_i > 0$, z čoho následne z kroku G7 generátora úlohy (LQ) dostaneme vygenerované aktívne ohraničenie $(\mathbf{A}\hat{\mathbf{x}})_i - b_i = 0$, pričom samozrejme ako sme už na začiatku tejto kapitoli spomínali musí byť splnená podmienka $m_0 \le n$.

$n=20,\ m=15,\ \varepsilon=10^{-5},\ \eta=1$							
m_0	**priemerný čas**	**priemerný počet iterácií**	$\|\bar{x}-\hat{x}\|$	$\|\bar{y}-\hat{y}\|$	$\frac{\|\bar{x}-\hat{x}\|}{1+\|\hat{x}\|}$	$\frac{\|\bar{y}-\hat{y}\|}{1+\|\hat{y}\|}$	$\frac{\|f(\bar{x})-f(\hat{x})\|}{1+\|f(\hat{x})\|}$
0	0,7	1	3,58E-01	1,69E-01	9,56E-03	1,69E-01	3,44E-06
1	2,4	12,4	3,82E-06	2,65E-06	1,07E-07	3,36E-07	1,32E-09
2	3,2	18,0	3,44E-06	7,56E-06	1,13E-07	3,41E-07	2,51E-09
3	4,8	28,1	4,58E-06	1,63E-05	1,19E-07	7,84E-07	2,17E-09
4	6,3	37,7	4,59E-06	2,56E-05	1,30E-07	8,01E-07	2,78E-09
5	7,6	45,4	3,93E-06	4,15E-05	1,13E-07	1,03E-06	3,57E-09
6	12,9	76,8	6,45E-06	1,36E-04	1,90E-07	3,61E-06	2,83E-09
7	42,6	253,9	9,93E-06	4,87E-04	2,66E-07	8,92E-06	2,49E-09
8	53,6	313,6	9,39E-06	6,57E-04	2,76E-07	1,35E-05	2,47E-09
9	61,6	375,1	1,23E-05	7,17E-04	3,51E-07	1,43E-05	3,76E-09
10	189,7	1523,0	2,42E-05	2,64E-03	6,26E-07	4,42E-05	3,16E-09

Tabuľka 6: Vplyv hodnoty voľby počtu aktívnych ohraničení m_0 na kvalitu získaných riešení a na iteračnú náročnosť.

Z tabuľky si možno všimnúť, že vo všeobecnosti počet aktívnych ohraničení nemá vplyv na kvalitu získaných riešení, s výnimkou jedného extrému a to ak $m_0=0$. V tomto prípade si možno všimnúť, že kvalita získaného riešenia $\bar{\mathbf{x}}$ je oproti ostatným oveľa nižšia. Toto je zrejme dôsledkom numerickej presnosti nájdenia optimálneho riešenia $\mathbf{x}^k$ z kroku RA2 pomocou príkazu FindMinimum[]. Keďže pre takéto nájdené riešenie je automaticky splnená podmienka z kroku RA3, nie je možné ďalej vylepšovať jeho presnosť opätovným aplikovaním Rockafellarovho algoritmu.

Na druhej strane si možno ľahko všimnúť, že s nárastom počtu aktívnych ohraničení m_0 nám rástla aj iteračná náročnosť. Túto stúpajúcu tendenciu si možno vysvetliť tým, že s rastúcim počtom aktívnych ohraničení m_0 je „príležitosť" porušiť podmienku presnosti vo viacerých ohraničeniach, a teda na získanie optimálneho riešenia je potreba vykonať viacero iterácií. Všimnime si ešte, že značný prírastok počtu iterácií možno sledovať pri hodnote $m_0=7$ a pri extréme $m_0=10$. Pri hodnote $m_0=10$ extrémne vysokú potrebu iterácií možno vysvetliť tým, že treba nájsť optimum, ktoré je zároveň aj jediným prípustným riešením, a teda podmienka presnosti musí byť dodržaná vo všetkých ohraničeniach v teste v kroku RA3, čo je zdrojom vysokej iteračnej náročnosti keďže.

Záver.

V tejto práci sme sa venovali použitiu metódy rozšírených Lagrangeových funkcií na úlohy nelineárneho programovania, pričom zvláštny dôraz sme kládli na úlohy konvexného programovania (KÚ). V jednotlivých častiach sme načrtli problematiku riešenia úloh nelineárneho programovania, motívy ktoré viedli k vzniku rozšírených Lagrangeových funkcií a postupne sme prenikli do teórie rozšírených Lagrangeových funkcií. Postupne sme prezentovali viacero typov najpoužívanejších rozšírených Lagrangeových funkcií, analyzovali sme ich vlastnosti a poukázali sme na ich výhody, prípadne aj nevýhody. V poslednej časti sme vykonali niekoľko numerických experimentov s použitím tzv. Rockafellarovej funkcie. Túto funkciu sme spolu aj s príslušným algoritmom aplikovali na úlohu kvadratického programovania s lineárnymi ohraničeniami (LQ), ktorú sme generovali pomocou nami navrhnutého generátora. Celkovo sme vyriešili okolo 350 úloh, pričom dimenzia $(n \times m)$ najväčšej z nich bola 100×15, prípadne 20×21. Podarilo sa nám ukázať, že za použitie vyššie spomenutej funkcie spolu s príslušným algoritmom sú získané riešenia značne presné a takisto boli dosiahnuté veľmi dobré výsledky čo sa týka iteračnej, prípadne aj časovej náročnosti.

Literatúra.

[1] K. J. ARROW, F. J. GOLD, S. M. HOWE, *A General Saddle Point Result for Constrained Optimization*, Mathematical Programming, 5 (1973), 225-234.

[2] D. P. BERTSEKAS, *Augmented Lagrangian and Differentiable Exact Penalty Methods*, Massachusetts Institute of Technology Report, Cambridge, Mass., (1981).

[3] D. P. BERTSEKAS, *Constrained optimization and Lagrange Multiplier Methods*, Academic Press, N. Y., (1982).

[4] D. P. BERTSEKAS, A. E. OZDAGLAR, *Pseudonormality and a Lagrange Multiplier Theory for Constrained Optimization*, Dept. of Electrical Engineering and Computer Science Report, M. I. T., Cambridge, Mass., (2000).

[5] P. T. BOGGS, J. W. TOLLE, *Augmented Lagrangians which are Quadratic in the Multiplier*, JOTA, 31 (1980), 17-26.

[6] P. T. BOGGS, J. W. TOLLE, *Merit Functions for Nonlinear Programming Problems*, Operations Research and System Analysis Report, Univ. of North Carolina, Chapel Hill, (1981).

[7] F. H. CLARKE, *Optimization and Nonsmooth Analysis*, Wiley, N. Y., (1983).

[8] A. R. CONN, N. I. M. GOULD, P. L. TOINT, *A Globally Convergent Augmented Lagrangian Algorithm for Optimization with General Constraints and Simple Bounds*, SIAM J. Numer. Anal., 28 (1991), 545-572.

[9] G. DI PILLO, L. GRIPPO, *A New Class of Augmented Lagrangians in Nonlinear Programming*, SIAM J. on Control and Optimization, 17 (1979), 618-628.

[10] G. DI PILLO, L. GRIPPO, *An Augmented Lagrangian for Inequality Constraints in Nonlinear Programming Problems*, J. Optim. Theory Appl., 36 (1982), 495-519.

[11] G. DI PILLO, L. GRIPPO, *Exact Penalty Functios in Constrained Optimization*, SIAM J. on Control and Optimization, 27 (1989), 1333-1360.

[12] G. DI PILLO, S. LUCIDI, *An Augmented Lagrangian Function with Improved Exactness Properties*, SIAM J. Optim., 12 (2001), 376-406.

[13] H. EVERETT, *Generalized Lagrange Multiplier Method for Solving Problems of Optimum Allocation of Resources*, Operations Research, 11 (1963), 399-417.

[14] M. HAMALA, *Nelineárne programovanie*, Prednášky 3. ročník, Fakulta matematiky, fyziky a informatiky UK, Bratislava, 2001.

[15] S. P. HAN, *A Globally Convergent Method for Nonlinear Programming*, JOTA, 22 (1977), 297-309.

[16] M. R. HESTENES, *Multiplier and Gradient Methods*, Computing Methods in Optimization Problems, Academic Press, N. Y., (1969), 143-164.

[17] M. R. HESTENES, *Optimization Theory*, Wiley, N. Y., (1975).

[18] H. W. KUHN, A. W. TUCKER, *Nonlinear Programming*, Proceedings of the 2-nd Berkeley Symposium on Mathematical Statistics and Probability, Univ. of Cal. Press, Berkeley, (1951), 481-492.

[19] R. M. LEWIS, V. TORCZON, *A Globally Convergent Augmented Lagrangian Pattern Search Algorithm for Optimization with General Constraints and Simple Bounds*, SIAM J. Optim, 12 (2002), 1075-1089,

[20] O. L. MANGASARIAN, *Unconstrained Lagrangians in Nonlinear Programming*, Computer Sciences Department Report, Univ. of Wisconsin, Madison, (1973).

[21] A. MIELE, P. E. MOSELEY, E. E. CRAGG, *Numerical Experiments on Hestenes' Method of Multipliers for Mathematical Programming Problems*, Aero-Astronautics Report, Rice Univ., Houston, Tex., 85 (1971).
[22] M. J. D. POWELL, *A Method for Nonlinear Constraints in Minimization Problems*, Academic Press, N. Y., (1969), 283-298.
[23] R. T. ROCKAFELLAR, *Convex Analysis*, Princeton Univ. Press, Princ., N. J., (1970)
[24] R. T. ROCKAFELLAR, *The Multiplier Method of Hesteness and Powell Applied to Convex Programming*, Mathematics Dept., Washington Univ., Seattle, (1972).
[25] R. T. ROCKAFELLAR, *Augmented Lagrange Multiplier Functions and Duality in Nonconvex Programming*, SIAM J. Control, 12 (1974), 268-285.
[26] R. T. ROCKAFELLAR, *Lagrange Multipliers and Optimality*, SIAM Review, 35 (1993), 183-238.

Príloha.

V tejto prílohe prikladáme zdrojový kód generátora úlohy (LQ) (pre n=20) spolu aj s implementovaným Rockafellarovým algoritmom.

```
n = 20;
m = 15;            (* ľubovoľné *)
premenne = {x1, x2, x3, x4, x5, x6, x7, x8, x9, x10, x11, x12, x13, x14, x15,
   x16, x17, x18, x19, x20};
Clear[MatG, MaticaG, G, MatA, A, optX, optimX, optY, optimY, b, bb]
Array[MatG, {n, m}];
Array[MatA, {m, n}];
Array[optX, n];
Array[optY, m];
Array[bb, m];
Array[vektor11, {m, m}];
Array[vektor1, m];
For[i = 1, i <= n,
  For[j = 1, j <= m, MatG[i, j] = Random[Integer, {-5, 5}];
   MatA[j, i] = Random[Integer, {-5, 5}]; j++]; i++];
For[i = 1, i <= n, optX[i] = Random[Real, {-20, 20}]; i++];
For[i = 1, i <= m,
  For[j = 1, j <= m,
   If[i == j, vektor11[i, j] = 1, vektor11[i, j] = 0]; j++]; i++];
For[i = 1, i <= m, vektor1[i] = Table[vektor11[i, j], {j, 1, m}]; i++];
For[i = 1, i <= m,
  optY[i] = (Random[Integer, {0, 1}])*(Random[Real, {0, 30}]); i++];
MaticaG = Array[MatG, {n, m}];
A = Array[MatA, {m, n}];
optimX = Array[optX, n];
optimY = Array[optY, m];
G = MaticaG.Transpose[MaticaG] + DiagonalMatrix[Table[1, {i, 1, n}]];
h = -(G.optimX + Transpose[A].optimY);
For[i = 1, i <= m,
  If[optY[i] > 0, bb[i] = vektor1[i].(A.optimX),
   bb[i] = (vektor1[i].(A.optimX) + (Random[Real, {0.01, 5}]))]; i++];
```

```
b = Table[bb[i], {i, 1, m}];
Clear[aa, f, g]
Array[aa, m];
For[i = 1, i <= m, aa[i] = 1; i++];
f[x1_, x2_, x3_, x4_, x5_, x6_, x7_, x8_, x9_, x10_, x11_, x12_, x13_, x14_,
   x15_, x16_, x17_, x18_, x19_, x20_] =
  Simplify[0.5*(premenne.G.premenne) + h.premenne]
Array[g[x1_, x2_, x3_, x4_, x5_, x6_, x7_, x8_, x9_, x10_, x11_, x12_, x13_,
     x14_, x15_, x16_, x17_, x18_, x19_, x20_], m];
For[i = 1, i <= m,
   g[i][x1_, x2_, x3_, x4_, x5_, x6_, x7_, x8_, x9_, x10_, x11_, x12_, x13_,
      x14_, x15_, x16_, x17_, x18_, x19_,
      x20_] = (A.premenne - b).vektor1[i]; i++];
```

(* Implementácia Rockafellarovho algoritmu *)

```
Array[gradient, m];
For[i = 1, i <= m, gradient[i] = Transpose[A].vektor1[i]; i++];
eps = 0.00001;
mi = 1;
j = 1;
Clear[zzz]
cas1 = Take[
   Timing[zzz =
      FindMinimum[
       f[x1, x2, x3, x4, x5, x6, x7, x8, x9, x10, x11, x12, x13, x14, x15,
          x16, x17, x18, x19, x20] + (1/(2*mi))*
          Sum[((Max[0,
                  aa[i] +
                   mi*g[i][x1, x2, x3, x4, x5, x6, x7, x8, x9, x10,
                      x11, x12, x13, x14, x15, x16, x17, x18, x19,
                      x20]])^2 - (aa[i])^2), {i, 1, m}], {x1,
        0}, {x2, 0}, {x3, 0}, {x4, 0}, {x5, 0}, {x6, 0}, {x7, 0}, {x8,
        0}, {x9, 0}, {x10, 0}, {x11, 0}, {x12, 0}, {x13, 0}, {x14,
        0}, {x15, 0}, {x16, 0}, {x17, 0}, {x18, 0}, {x19, 0}, {x20, 0},
       Gradient ->
        G.premenne + h +
         Sum[Max[0,
              aa[i] +
               mi*g[i][x1, x2, x3, x4, x5, x6, x7, x8, x9, x10, x11,
```

```
                x12, x13, x14, x15, x16, x17, x18, x19, x20]]*
            gradient[i], {i, 1, m}]]], 1]
hodnota = Take[zzz, 1];
xyz = Take[zzz, -1];
{{xx1, xx2, xx3, xx4, xx5, xx6, xx7, xx8, xx9, xx10, xx11, xx12, xx13, xx14,
    xx15, xx16, xx17, xx18, xx19, xx20}} = premenne /. xyz;
Table[g[i][xx1, xx2, xx3, xx4, xx5, xx6, xx7, xx8, xx9, xx10, xx11, xx12,
  xx13, xx14, xx15, xx16, xx17, xx18, xx19, xx20], {i, 1, m}]
cas2 = Take[
  Timing[While[
    Max[Table[
       g[i][xx1, xx2, xx3, xx4, xx5, xx6, xx7, xx8, xx9, xx10, xx11,
        xx12, xx13, xx14, xx15, xx16, xx17, xx18, xx19, xx20], {i, 1,
        m}]] > eps ,
    For[i = 1, i <= m,
     aa[i] = Max[0,
       aa[i] + mi*
         g[i][xx1, xx2, xx3, xx4, xx5, xx6, xx7, xx8, xx9, xx10,
          xx11, xx12, xx13, xx14, xx15, xx16, xx17, xx18, xx19,
          xx20]]; i++];
    zzz =
     FindMinimum[
      f[x1, x2, x3, x4, x5, x6, x7, x8, x9, x10, x11, x12, x13, x14,
        x15, x16, x17, x18, x19, x20] + (1/(2*mi))*
        Sum[((Max[0,
                aa[i] +
                 mi*g[i][x1, x2, x3, x4, x5, x6, x7, x8, x9, x10,
                   x11, x12, x13, x14, x15, x16, x17, x18,
                  x19, x20]])^2 - (aa[i])^2), {i, 1, m}], {x1,
        xx1}, {x2, xx2}, {x3, xx3}, {x4, xx4}, {x5, xx5}, {x6,
       xx6}, {x7, xx7}, {x8, xx8}, {x9, xx9}, {x10, xx10}, {x11,
       xx11}, {x12, xx12}, {x13, xx13}, {x14, xx14}, {x15, xx15}, {x16,
        xx16}, {x17, xx17}, {x18, xx18}, {x19, xx19}, {x20, xx20},
      Gradient ->
       G.premenne + h +
        Sum[Max[0,
           aa[i] +
            mi*g[i][x1, x2, x3, x4, x5, x6, x7, x8, x9, x10, x11,
              x12, x13, x14, x15, x16, x17, x18, x19, x20]]*
          gradient[i], {i, 1, m}]];
```

```
      hodnota = Take[zzz, 1];
      Clear[xyz];
      xyz = Take[zzz, -1];
      {{xx1, xx2, xx3, xx4, xx5, xx6, xx7, xx8, xx9, xx10, xx11, xx12, xx13,
          xx14, xx15, xx16, xx17, xx18, xx19, xx20}} = premenne /. xyz;
      j++;]], 1]
Table[g[i][xx1, xx2, xx3, xx4, xx5, xx6, xx7, xx8, xx9, xx10, xx11, xx12,
   xx13, xx14, xx15, xx16, xx17, xx18, xx19, xx20], {i, 1, m}]
For[i = 1, i <= m,
   aa[i] = Max[0,
      aa[i] + mi*
         g[i][xx1, xx2, xx3, xx4, xx5, xx6, xx7, xx8, xx9, xx10, xx11,
          xx12, xx13, xx14, xx15, xx16, xx17, xx18, xx19, xx20]]; i++];
vypX = {xx1, xx2, xx3, xx4, xx5, xx6, xx7, xx8, xx9, xx10, xx11, xx12, xx13,
    xx14, xx15, xx16, xx17, xx18, xx19, xx20};
vypY = Table[aa[i], {i, 1, m}];
Print["vypocitane riesenie= ", vypX]
Print["optimalne riesenie= ", optimX]
Print["skutocna hodnota Lagrangeovych multiplikatorov= ",
  SetPrecision[optimY, 10]]
Print["vypocitana hodnota Lagrangeovych multiplikatorov= ",
  SetPrecision[vypY, 10]]
Print["Pocet iteracii= ", j]
Print["Tolerovana chyba epsilon= ", eps]
Print["optimalna hodnota= ",
  SetPrecision[0.5*optimX.G.optimX + h.optimX, 10]]
Print["vypocitana optimalna hodnota= ",
  SetPrecision[0.5*vypX.G.vypX + h.vypX, 10]]
optim = 0.5*optimX.G.optimX + h.optimX;
vypoptim = 0.5*vypX.G.vypX + h.vypX;
```