



**TURUN
YLIOPISTO**

TOISTETTU KVADRAATTINEN OPTIMOINTI JA MARATOS-EFEKTI

Arvo Ekman

Pro gradu -tutkielma
Maaliskuu 2023

Tarkastajat:
Prof. Marko Mäkelä
FT Kaisa Joki

MATEMATIIKAN JA TILASTOTIETEEN LAITOS

Turun yliopiston laatu­järjestelmän mukaisesti tämän julkaisun alkuperäisyys on tarkastettu Turnitin OriginalityCheck-järjestelmällä

TURUN YLIOPISTO
Matematiikan ja tilastotieteen laitos

ARVO EKMAN: Toistettu kvadraattinen optimointi ja Maratos-efekti
Pro gradu -tutkielma, 44 s.
Sovellettu matematiikka
Maaliskuu 2023

Työn tarkoituksena on esitellä tehokas Newtonin menetelmään perustuva toistettun kvadraattisen optimoinnin algoritmi eli SQP. Algoritmilla voidaan ratkaista epälineaarisia rajoitteellisia optimointiongelmia differentioituvilla kohde- ja rajoitefunktioilla. Ensimmäisen version toistetun kvadraattisen optimoinnin menetelmästä esitti R. B. Wilson väitöskirjassaan vuonna 1963. Myöhemmin S.P. Han ja M.J.D. Powell tehostivat algoritmia käyttämällä aina positiividefiniittiä approksimaatiota suunnanvalintatehtävän Hessen matriisista, sekä ratkaisemalla askelpituuden käyttämällä hyväksi sakkofunktiota.

Tutkielman alussa esitellään olennaisia määritelmiä ja todistetaan tärkeä aputulos Gordanin lemma, jota käytetään todistamaan, että lokaalissa optimipisteessä toteutuvat Fritz John -ehdot ja edelleen Karush–Kuhn–Tuckerin ehdot (KKT). Tämän jälkeen esitellään SQP-algoritmi, joka perustuu Newtonin menetelmällä tehtyyn approksimaatioon hakusuunnasta kohti ratkaistavan optimointiongelman KKT-pistettä.

Epälineaariset yhtälörajoitteet ja yksinkertainen sakkofunktio tuottavat SQP-algoritmille konvergenssivaikeuksia. N. Maratos nosti ongelman esiin väitöskirjassaan vuonna 1978. Puuttuvan parantavan suunnan ilmiötä kutsutaankin hänen mukaansa Maratos-efektiksi. Viimeinen kappale käsittelee menetelmiä, joiden avulla voidaan ratkaista Maratos-efektistä kärsiviä minimointitehtäviä.

Asiasanat: Toistettu kvadraattinen optimointi, SQP, Maratos-efekti, Karush–Kuhn–Tucker.

Sisällys

1	Johdanto	1
2	Konvekseista joukoista	2
2.1	Määritelmiä	2
2.2	Konveksit joukot erottava hypertaso	8
2.3	Gordanin lemma	11
3	Fritz John ja Karush–Kuhn–Tuckerin optimaalisuusehdot	12
3.1	Välttämättömät optimaalisuusehdot ilman rajoitteita	12
3.2	Fritz John -ehdot epäyhtälörajoitteilla	13
3.3	Karush–Kuhn–Tuckerin ehdot epäyhtälörajoitteilla	16
3.4	Fritz John -ehdot yhtälö- ja epäyhtälörajoitteilla	18
3.5	Karush–Kuhn–Tuckerin ehdot yhtälö- ja epäyhtälörajoitteilla	21
4	Toistettu kvadraattinen optimointi	24
4.1	Kvadraattinen optimointitehtävä	24
4.2	Rajoitteiden eliminointi	24
4.3	Newtonin menetelmä	25
4.4	Yhtälörajoitteet lineaarisella approksimaatiolla	26
4.5	Lineaarisen approksimaation ratkaiseminen minimointitehtävän avulla	28
4.6	Epäyhtälörajoitteet	29
4.7	Sakkofunktio	29
4.8	BFGS	31
5	Maratos-efekti	34
5.1	Sallitun parantavan suunnan puuttuminen	34
5.2	Keinoja Maratos-efektin välttämiseen	36
5.2.1	Watchdog	36
5.2.2	Kaarihaku	37
5.2.3	Lisätty Lagrangen sakkofunktio	39
5.2.4	Havaintoja menetelmien eroista	41
6	Yhteenveto	44
	Lähdeluettelo	45

1 Johdanto

Toistettu kvadraattinen optimointi on tehokas parantavan suunnan menetelmä ratkaistaessa minimointitehtäviä epälineaarisilla rajoitefunktioilla, kun kohde- ja rajoitefunktiot ovat differentioituvia. Rajoitteellisten optimointitehtävien ratkaiseminen on yleensä haasteellisempaa, kun rajoitefunktiot ovat lineaaristen funktioiden sijaan epälineaarisia. Minimointitehtävän rajoitefunktioiden ollessa epälineaarisia toistettu kvadraattinen optimointi mahdollistaa parantavan suunnan löytämisen ratkaisemalla kvadraattinen minimointitehtävä, jossa on pelkkiä lineaarisia rajoitteita.

Differentioituvan optimointitehtävän minimipisteessä on aina voimassa Karush–Kuhn–Tuckerin (KKT) optimaalisuusehdot, jos rajoitefunktiot ovat differentioituvia ja aktiivisten epäyhtälörajoitteiden sekä kaikkien yhtälörajoitteiden gradientit ovat toisistaan lineaarisesti riippumattomia. Toistettu kvadraattinen optimointi perustuu menetelmään, jossa KKT-ehdot täyttävä piste voidaan ratkaista liikkumalla sallitusta pisteestä kohdefunktion arvoa parantavaan sallittuun suuntaan, kunnes KKT-piste on löytynyt. Suunta voidaan ratkaista Newtonin menetelmään perustuvalla approksimaatiolla parantavasta suunnasta. Rajoitteelliset minimointitehtävät ovat merkittävästi helpompia ratkaista, kun parantavaa hakusuuntaa etsittäessä tyydytään pelkkiin lineaarisiin approksimaatioihin rajoitteista. Newtonin menetelmässä tarvittu Hessen matriisin käänteismatriisin laskemiselta voidaan välttyä käyttämällä positiividefiniittiä approksimaatiota Hessen matriisista ja ratkaisemalla Newtonin suunta kvadraattisen minimointitehtävän avulla. Silloin selvittää kevyemmällä laskutoimituksilla, vaikka askeleen tarkkuudesta joudutaankin tinkimään. Kun kohdefunktion arvoa parantava suunta on löydetty, voidaan sakkofunktion avulla ratkaista pisin sallittu askelpituus löydettyyn suuntaan.

Epälineaarisia yhtälörajoite-ehtoja noudattaen on mahdotonta liikkua lineaariseen suuntaan poistumatta sallittujen pisteiden joukosta. Myös kokonaisen askeleen ottaminen parantavaan suuntaan saattaa kasvattaa minimoitavan kohdefunktion arvoa. Tätä ilmiötä kutsutaan Maratos-efektiksi ja sen välttämiseksi algoritmia on muokattava. Efektiltä voidaan välttyä, jos sallitaan välillä poistuminen sallittujen pisteiden joukosta tai haetaan uusi kohdefunktion arvoa parantava piste kaarihaun avulla. Maratos-efektistä kärsivä tehtävä voidaan myös ratkaista korvaamalla perinteinen l_1 -sakkofunktio lisätyllä Lagrangen sakkofunktiolla.

Tärkeimmät kohdat tekstistä on alleviivattu. Tekstin sujuvamman seuraamisen vuoksi vektoriarvoiset muuttujat sekä isolla kirjaimella merkityt matriisit on lihavoitu. Joukkoja merkitään isoilla kirjaimilla ilman lihavoittoa.

Tutkielman toinen luku perustuu Mokhtar S. Bazaraan ja C.M. Shettyn ensimmäiseen painokseen kirjasta *Nonlinear Programming Theory and Algorithms* [2] vuodelta 1979. Kolmannessa luvussa on käytetty saman kirjan kolmatta painosta [3] vuodelta 2006. Kyseinen painos on sisällöltään laajempi ja siinä on käsitelty myös SQP-algoritmia. Kolmantena päälähteenä tutkielmalle ja erityisesti kolmannelle luvulle on käytetty Jorge Nocedal ja Stephen J. Wrightin kirjaa *Numerical Optimization* [11].

2 Konvekseista joukoista

Jos tiedetään, että tarkasteltava rajoitejoukko on konvekksi, seuraa siitä usein optimointiongelmien ratkaisua helpottavia ominaisuuksia. Esimerkiksi differentioituvan konveksin funktion lokaali minimipiste on tällöin myös globaali minimipiste. Tässä luvussa esitellään tärkeitä käsitteitä, joita käytetään luvun kolme esitettyjen optimaalisuusehtojen todistamiseen.

2.1 Määritelmiä

Tässä alaluvussa esitellään tutkielman ymmärtämisen kannalta oleelliset määritelmät. Lisäksi todistetaan lause konveksien joukkojen leikkauksesta, summasta ja erotuksesta, lause kvasikonveksien funktioiden ominaisuudesta, sekä lause, jonka mukaan positiividefiniitin matriisin käänteismatriisi on myös positiividefiniitti.

Määritelmä 2.1. Olkoon $S \subset \mathbb{R}^n$. *Sulkeuma* $\text{cl } S$ on pienin suljettu joukko, joka sisältää joukon S . Olkoon lisäksi $N_\varepsilon(\mathbf{x}) = \{\mathbf{y} : \|\mathbf{y} - \mathbf{x}\| < \varepsilon\}$, eli pisteen \mathbf{x} ympäristö säteellä $\varepsilon > 0$. Silloin $\text{cl } S$ on kokoelma pisteitä \mathbf{x} , joissa $S \cap N_\varepsilon(\mathbf{x}) \neq \emptyset$ kaikilla $\varepsilon > 0$.

Sisäosa $\text{int } S$ on suurin avoin joukko, joka sisältyy joukkoon S . Avoin joukko $\text{int } S$ on kokoelma pisteitä \mathbf{x} , joilla on voimassa $N_\varepsilon(\mathbf{x}) \subset S$ jollakin $\varepsilon > 0$.

Reuna $\partial S = \text{cl } S \setminus \text{int } S$ on suljettu joukko $\text{cl } S$, josta on poistettu sisäosan pisteet $\text{int } S$. Reunapisteessä \mathbf{x} ympäristö $N_\varepsilon(\mathbf{x})$ sisältää vähintään yhden pisteen $\mathbf{y} \in S$ ja yhden pisteen $\mathbf{z} \notin S$ kaikilla $\varepsilon > 0$. [2] [11]

Esimerkki 2.2. Joukossa \mathbb{R} suljettu väli $S = \text{cl } S = [1, 2]$ on suljettu joukko. Väli $\text{int } S = (1, 2)$ on avoin joukko. Välin S reuna ∂S on pisteet 1 ja 2.

Konvekssi joukko tarkoittaa joukkoa, jossa mitkä tahansa kaksi joukon mielivaltaista pistettä voidaan yhdistään janalla ilman, että mikään janan piste sijaitsee joukon ulkopuolella.

Määritelmä 2.3. Joukko $S \subset \mathbb{R}^n$ on *konvekssi*, jos kaikilla $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in S$ on voimassa $(1 - \lambda)\mathbf{x}_1 + \lambda\mathbf{x}_2 \in S$, kun $0 \leq \lambda \leq 1$ ja $\lambda \in \mathbb{R}$. [9]

Lause 2.4. *Konvekseille joukoille $S \subset \mathbb{R}^n$ ja $T \subset \mathbb{R}^n$ on voimassa*

$$\begin{aligned} S \cap T &\text{ on konvekssi,} \\ S + T &\text{ on konvekssi,} \\ S - T &\text{ on konvekssi.} \end{aligned}$$

Todistus. Konveksien joukkojen leikkaus on konvekssi. Valitaan pisteet $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in S \cap T$. Tehdään vastaoletus, että on olemassa sellainen $0 \leq \lambda \leq 1$, että $(1 - \lambda)\mathbf{x}_1 + \lambda\mathbf{x}_2 \notin S \cap T$. Silloin myös joukolle S tai T olisi oltava sellainen λ , että $(1 - \lambda)\mathbf{x}_1 + \lambda\mathbf{x}_2 \notin S$ tai $(1 - \lambda)\mathbf{x}_1 + \lambda\mathbf{x}_2 \notin T$, josta syntyy ristiriita, koska oletuksen mukaan S ja T ovat konvekseja. Konveksien joukkojen leikkauksen on siis oltava konvekssi.

Konveksien joukkojen summa on konvekssi. Olkoon S ja T konvekseja joukkoja ja $\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2 \in S + T$. Lisäksi $\mathbf{z}_1 = \mathbf{s}_1 + \mathbf{t}_1$ ja $\mathbf{z}_2 = \mathbf{s}_2 + \mathbf{t}_2$, jossa $\mathbf{s}_i \in S$ ja $\mathbf{t}_i \in T$. Koska S ja T ovat konvekseja, niin $(1 - \lambda)\mathbf{s}_1 + \lambda\mathbf{s}_2 \in S$ ja $(1 - \lambda)\mathbf{t}_1 + \lambda\mathbf{t}_2 \in T$. Nyt

$$(1 - \lambda)\mathbf{z}_1 + \lambda\mathbf{z}_2 = (1 - \lambda)\mathbf{s}_1 + \lambda\mathbf{s}_2 + (1 - \lambda)\mathbf{t}_1 + \lambda\mathbf{t}_2 \in S + T,$$

eli konveksien joukkojen summa on konvekksi. Konveksien joukkojen erotus todistetaan samalla tavalla kuin summakin. [9]

□

Määritelmä 2.5. Olkoon joukko $S \subset \mathbb{R}^n$ epätyhjä ja konvekksi. Funktio $f : S \rightarrow \mathbb{R}$ on *konvekssi*, jos kaikilla $0 \leq \lambda \leq 1$ ja $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in S$ on voimassa

$$f[\lambda\mathbf{x}_1 + (1 - \lambda)\mathbf{x}_2] \leq f(\mathbf{x}_1) + (1 - \lambda)f(\mathbf{x}_2).$$

Funktion $f : S \rightarrow \mathbb{R}$ sanotaan olevan *konkaavi*, jos $-f$ on konvekssi. [11]

Määritelmä 2.6. Olkoon joukko $S \subset \mathbb{R}^n$ epätyhjä ja konvekksi. Funktio $f : S \rightarrow \mathbb{R}$ on *aidosti konvekssi*, jos kaikilla $0 < \lambda < 1$, $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in S$ ja $\mathbf{x}_1 \neq \mathbf{x}_2$ on voimassa

$$f[\lambda\mathbf{x}_1 + (1 - \lambda)\mathbf{x}_2] < f(\mathbf{x}_1) + (1 - \lambda)f(\mathbf{x}_2).$$

Aidosti konvekseilla funktioilla ei siis ole voimassa yhtäsuuruutta. [11]

Määritelmä 2.7. Olkoon joukko $S \subset \mathbb{R}^n$ epätyhjä ja konvekksi. Funktio $f : S \rightarrow \mathbb{R}$ on *kvasikonvekssi*, jos kaikilla $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in S$ on voimassa

$$f[\lambda\mathbf{x}_1 + (1 - \lambda)\mathbf{x}_2] \leq \max\{f(\mathbf{x}_1), f(\mathbf{x}_2)\}, \quad \text{kun } 0 \leq \lambda \leq 1 \text{ ja } \lambda \in \mathbb{R}.$$

Jos taas $f(\mathbf{x}_1) \neq f(\mathbf{x}_2)$ ja kaikilla $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2$ on voimassa

$$f[\lambda\mathbf{x}_1 + (1 - \lambda)\mathbf{x}_2] < \max\{f(\mathbf{x}_1), f(\mathbf{x}_2)\}, \quad \text{kun } 0 < \lambda < 1 \text{ ja } \lambda \in \mathbb{R},$$

sanotaan funktion olevan *aidosti kvasikonvekssi*. Funktion $f : S \rightarrow \mathbb{R}$ sanotaan olevan *kvasikonkaavi*, jos $-f$ on kvasikonvekssi.

Aidosti kvasikonveksin funktion lokaali minimipiste on myös funktion globaali minimipiste, mikä seuraa suoraan määritelmästä 2.7.

Kaikki aidosti kvasikonveksit funktiot eivät kuitenkaan välttämättä ole kvasikonvekseja, ellei funktio ole alhaalta puolijatkuva. Esimerkiksi aidosti kvasikonvekssi funktio

$$f(x) = \begin{cases} 1, & \text{kun } x = 0 \\ 0, & \text{kun } x \neq 0. \end{cases}$$

ei ole kvasikonvekssi funktio. [2]

Lause 2.8. Olkoon joukko $S \subset \mathbb{R}^n$ epätyhjä, avoin ja konvekksi, ja funktio $f : S \rightarrow \mathbb{R}$ differentioituva joukossa S . Silloin funktio f on kvasikonvekssi, jos ja vain jos aina toinen seuraavista väitteistä on voimassa kaikilla $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in S$:

- (A) Jos $f(\mathbf{x}_1) \leq f(\mathbf{x}_2)$, niin $\nabla f(\mathbf{x}_2)^\top (\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \leq 0$.
- (B) Jos $\nabla f(\mathbf{x}_2)^\top (\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) > 0$, niin $f(\mathbf{x}_1) > f(\mathbf{x}_2)$.

Todistus. Selvästi väitteestä (A) seuraa väite (B) ja väitteestä (B) väite (A). Todistetaan sitten väite (A). Olkoon funktio f kvasikonvekksi ja $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in S$ valittu siten, että $f(\mathbf{x}_1) \leq f(\mathbf{x}_2)$. Koska funktio f on differentioituva pisteessä \mathbf{x}_2 , niin kaikilla $\lambda \in (0, 1)$ on voimassa

$$f[\lambda\mathbf{x}_1 + (1 - \lambda)\mathbf{x}_2] - f(\mathbf{x}_2) = \lambda \nabla f(\mathbf{x}_2)^\top (\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) + \lambda \|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2\| \alpha[\mathbf{x}_2; \lambda(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)], \quad (1)$$

missä virhetermi $\alpha[\mathbf{x}_2; \lambda(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)] \rightarrow 0$, kun $\lambda \rightarrow 0$. Koska funktio f on kvasikonvekksi ja $f(\mathbf{x}_1) \leq f(\mathbf{x}_2)$, niin kvasikonveksin funktion määritelmän 2.7 mukaan $f[\lambda\mathbf{x}_1 + (1 - \lambda)\mathbf{x}_2] \leq f(\mathbf{x}_2)$, ja edelleen

$$f[\lambda\mathbf{x}_1 + (1 - \lambda)\mathbf{x}_2] - f(\mathbf{x}_2) \leq 0.$$

Silloin myös yhtälöllä (1) on voimassa

$$\lambda \nabla f(\mathbf{x}_2)^\top (\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) + \lambda \|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2\| \alpha[\mathbf{x}_2; \lambda(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)] \leq 0. \quad (2)$$

Jos nyt epäyhtälö (2) jaetaan muuttujalla $\lambda \in (0, 1)$, ja annetaan $\lambda \rightarrow 0$, saadaan

$$\nabla f(\mathbf{x}_2)^\top (\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \leq 0.$$

Todistetaan sitten, että funktio f on kvasikonvekksi, jos väite (A) on voimassa kaikilla $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in S$. Kvasikonveksin funktion määritelmän mukaan

$$f[\lambda\mathbf{x}_1 + (1 - \lambda)\mathbf{x}_2] \leq f(\mathbf{x}_2) \text{ kaikilla } \lambda \in (0, 1).$$

Tehdään vastaoletus, että on olemassa piste $\mathbf{x}^* \in S$, joka täyttää väitteen (A) ehdon, muttei kvasikonveksin funktion määritelmää. Silloin pisteessä \mathbf{x}^* , jollakin $\lambda \in (0, 1)$, on voimassa

$$\mathbf{x}^* = \lambda\mathbf{x}_1 + (1 - \lambda)\mathbf{x}_2 \quad \text{ja} \quad f(\mathbf{x}^*) > f(\mathbf{x}_2). \quad (3)$$

Koska funktio f on differentioituva, on se myös jatkuva, ja on oltava olemassa jokin sellainen $\delta \in (0, 1)$, että

$$f[\mu\mathbf{x}^* + (1 - \mu)\mathbf{x}_2] > f(\mathbf{x}_2) \quad \text{kaikilla} \quad \mu \in (\delta, 1), \quad (4)$$

ja

$$f(\mathbf{x}^*) > f[\delta\mathbf{x}^* + (1 - \delta)\mathbf{x}_2].$$

Silloin edelleen väliarvolauseen mukaan

$$0 < f(\mathbf{x}^*) - f[\delta\mathbf{x}^* + (1 - \delta)\mathbf{x}_2] = (1 - \delta) \nabla f(\mathbf{x}^{**})^\top (\mathbf{x}^* - \mathbf{x}_2), \quad (5)$$

missä $\mathbf{x}^{**} = \mu^*\mathbf{x}^* + (1 - \mu^*)\mathbf{x}_2$ jollakin $\mu^* \in (\delta, 1)$. Nyt epäyhtälön (4) mukaan selvästi myös $f(\mathbf{x}^{**}) > f(\mathbf{x}_2)$, ja jakamalla epäyhtälö (5) luvulla $1 - \delta > 0$ saadaan

$\nabla f(\mathbf{x}^{**})^\top(\mathbf{x}^* - \mathbf{x}_2) > 0$. Lisäksi sijoittamalla pisteelle \mathbf{x}^* määritelmä (3) huomataan, että

$$\nabla f(\mathbf{x}^{**})^\top(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) > 0. \quad (6)$$

Vastaväitteen ja väitteen (A) mukaan kuitenkin $f(\mathbf{x}^{**}) > f(\mathbf{x}_2) \geq f(\mathbf{x}_1)$. Koska S on konvekssi joukko, niin muuttuja $\mathbf{x}^{**} \in S$ voidaan esittää muodossa

$$\mathbf{x}^{**} = \lambda^* \mathbf{x}_1 + (1 - \lambda^*) \mathbf{x}_2 \quad (7)$$

jollakin $\lambda^* \in (0, 1)$. Sijoittamalla muuttujan \mathbf{x}^{**} määritelmä (7) väitteeseen (A) saadaan

$$0 \geq \nabla f(\mathbf{x}^{**})^\top(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}^{**}) = (1 - \lambda^*) \nabla f(\mathbf{x}^{**})^\top(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2). \quad (8)$$

Jakamalla vielä epäyhtälö (8) luvulla $1 - \lambda^* > 0$ saadaan

$$0 \geq \nabla f(\mathbf{x}^{**})^\top(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2),$$

mikä johtaa ristiriitaan epäyhtälön (6) kanssa. Silloin vastaoletus ei voi pitää paikkansa, ja väite (A) on todistettu. [2]

□

Määritelmä 2.9. Olkoon joukko $S \subset \mathbb{R}^n$ epätyhjä, avoin ja konvekssi. Funktio $f : S \rightarrow \mathbb{R}$ on *pseudokonvekssi*, jos funktio f on differentioituva ja kaikilla $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in S$ on voimassa

$$\begin{aligned} \nabla f(\mathbf{x}_1)^\top(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1) &\geq 0 \text{ ja } f(\mathbf{x}_2) \geq f(\mathbf{x}_1) \text{ tai} \\ \nabla f(\mathbf{x}_1)^\top(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1) &< 0 \text{ ja } f(\mathbf{x}_2) < f(\mathbf{x}_1). \end{aligned}$$

Funktion $f : S \rightarrow \mathbb{R}$ sanotaan olevan *pseudokonkaavi*, jos $-f$ on pseudokonvekssi. [2]

Lause 2.10. *Olkoon joukko $S \subset \mathbb{R}^n$ epätyhjä, avoin ja konvekssi. Jos funktio $f : S \rightarrow \mathbb{R}$ on pseudokonvekssi, niin funktio f on myös aidosti kvasikonvekssi. Sama ei päde toiseen suuntaan.*

Todistus. Olkoon funktio f pseudokonvekssi joukossa S . Tehdään vastaoletus, että funktio f ei ole aidosti kvasikonvekssi. Silloin määritelmän 2.7 mukaan on olemassa sellaiset pisteet $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in S$ ja piste $\mathbf{x}^* \in (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$, että pisteessä $\mathbf{x}^* = (1 - \lambda^*) \mathbf{x}_1 + \lambda^* \mathbf{x}_2$ jollakin $\lambda^* \in (0, 1)$ on voimassa

$$f(\mathbf{x}^*) \geq \max\{f(\mathbf{x}_1), f(\mathbf{x}_2)\},$$

kun $f(\mathbf{x}_1) \neq f(\mathbf{x}_2)$. Silloin siis välillä $(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ ja jollakin $\lambda^{**} \in (0, 1)$ on myös oltava sellainen piste $\mathbf{x}^{**} = (1 - \lambda^{**}) \mathbf{x}_1 + \lambda^{**} \mathbf{x}_2$, että $f(\mathbf{x}^{**}) \geq f(\mathbf{x}^*)$ ja

$$f(\mathbf{x}^{**}) = \max_{\mathbf{x} \in [\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2]} f(\mathbf{x}).$$

Koska funktio f on differentioituva ja saa välillä $(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ suurimman arvon pisteessä $\mathbf{x}^{**} \in (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$, on seuraavassa luvussa todistettavan lauseen 3.2 mukaan pisteessä \mathbf{x}^{**} voimassa

$$\nabla f(\mathbf{x}^{**})^\top(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}^{**}) = \lambda^{**} \nabla f(\mathbf{x}^{**})^\top(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \leq 0$$

ja

$$\nabla f(\mathbf{x}^{**})^\top (\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}^{**}) = -(1 - \lambda^{**}) \nabla f(\mathbf{x}^{**})^\top (\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \leq 0.$$

Tämä on mahdollista vain, kun

$$\nabla f(\mathbf{x}^{**})^\top (\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}^{**}) = \lambda^{**} \nabla f(\mathbf{x}^{**})^\top (\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) = 0$$

ja

$$\nabla f(\mathbf{x}^{**})^\top (\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}^{**}) = -(1 - \lambda^{**}) \nabla f(\mathbf{x}^{**})^\top (\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) = 0.$$

Nyt pseudokonvekksisuuden määritelmän mukaan

$$f(\mathbf{x}^{**}) \leq f(\mathbf{x}_1)$$

ja

$$f(\mathbf{x}^{**}) \leq f(\mathbf{x}_2).$$

Tästä syntyy ristiriita vastaväitteen kanssa, jonka mukaan $f(\mathbf{x}_1) \neq f(\mathbf{x}_2)$ ja

$$f(\mathbf{x}^{**}) = \max_{\mathbf{x} \in [\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2]} f(\mathbf{x}),$$

joten väite on todistettu. □

Aidosti kvasikonvekksi funktio ei kuitenkaan välttämättä ole pseudokonvekksi ja esimerkkinä voidaan käyttää funktiota $f(x) = x^3, x \in \mathbb{R}$. Koska pseudokonvekksi funktio on aidosti kvasikonvekksi ja differentioituva, on se myös alhaalta puolijatkuva ja kvasikonvekksi. [9]

Määritelmä 2.11. Epätyhjää joukkoa $C \subset \mathbb{R}^n$ sanotaan *kartioksi*, jos ehdosta $\mathbf{x} \in C$ seuraa, että $\alpha \mathbf{x} \in C$ kaikilla reaaliluvuilla $\alpha > 0$. Jos joukko C on konvekksi, kutsutaan joukkoa C *konveksiksi kartioksi*. [11]

Määritelmä 2.12. *Hypertaso* on joukko H , joka koostuu tason $\{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n : \mathbf{p}^\top \mathbf{x} = \alpha\}$ pisteistä. Vektori $\mathbf{p} \neq \mathbf{0}$ on tason normaalivektori ja $\alpha \in \mathbb{R}$ jokin vakio. Hypertaso jakaa avaruuden puoliavaruuksiin $\{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n : \mathbf{p}^\top \mathbf{x} \leq \alpha\}$ ja $\{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n : \mathbf{p}^\top \mathbf{x} \geq \alpha\}$. [2]

Määritelmä 2.13. Olkoon $S \subset \mathbb{R}^n$ epätyhjä joukko ja $\mathbf{x}^* \in \partial S$. Hypertasoa $H = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n : \mathbf{p}^\top (\mathbf{x} - \mathbf{x}^*)\}$ kutsutaan pisteessä \mathbf{x}^* *tukitasoksi* joukolle S , jos vektorilla \mathbf{p} on voimassa $\mathbf{p}^\top \mathbf{x}^* = \inf\{\mathbf{p}^\top \mathbf{x} : \mathbf{x} \in S\}$ tai $\mathbf{p}^\top \mathbf{x}^* = \sup\{\mathbf{p}^\top \mathbf{x} : \mathbf{x} \in S\}$. [2]

Määritelmä 2.14. Olkoon $\{\mathbf{x}_k\}$ jono, joka konvergoi kohti pistettä \mathbf{x}^* . Konvergenssin sanotaan olevan *lineaarista*, jos on olemassa sellainen vakio $r \in (0, 1)$, että

$$\frac{\|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}^*\|}{\|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\|} \leq r,$$

kun indeksi k on riittävän suuri. Konvergenssin sanotaan olevan *superlineaarista*, jos

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}^*\|}{\|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\|} = 0. \quad (9)$$

Jos on olemassa sellaiset vakiot $p \geq 0$ ja $0 < M < \infty$, että

$$\frac{\|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}^*\|}{\|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\|^p} \leq M, \quad (10)$$

kun indeksi k on riittävän suuri, sanotaan konvergenssin asteen olevan suurin luku p , joka toteuttaa ehdon (10). Jos $p = 2$, konvergenssi on *kvadraattista*. [11]

Määritelmä 2.15. Reaaliarvoinen symmetrinen $n \times n$ -neliömatriisi \mathbf{A} on *positiividefiniitti*, jos $\mathbf{d}^\top \mathbf{A} \mathbf{d} > 0$ kaikilla nollasta poikkeavilla vektoreilla $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^n$. Matriisi \mathbf{A} on *positiivisemidefiniitti*, jos $\mathbf{d}^\top \mathbf{A} \mathbf{d} \geq 0$ kaikilla vektoreilla $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^n$.

Lause 2.16. *Olkoon reaaliarvoinen symmetrinen neliömatriisi \mathbf{A} positiivisemidefiniitti. Silloin matriisin \mathbf{A} kaikki diagonaali-alkiot a_{ii} ovat ei-negatiivisia reaali-lukuja.*

Todistus. [6] Määritellään vektori $\mathbf{d} = (0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0)^\top$, jossa i :s alkio saa arvon 1 ja muut alkiot arvon 0. Koska määritelmän 2.15 mukaan $\mathbf{d}^\top \mathbf{A} \mathbf{d} = d_i^2 a_{ii} \geq 0$ kaikilla i , on oltava $a_{ii} \geq 0$. □

Lause 2.17. *Olkoon reaaliarvoinen symmetrinen neliömatriisi \mathbf{A} positiivisemidefiniitti, jossa on n pysty- ja vaakariviä. Silloin $\mathbf{d}^\top \mathbf{A} \mathbf{d} = 0$, jos ja vain jos $\mathbf{A} \mathbf{d} = \mathbf{0}$.*

Todistus. [6] Jos $\mathbf{A} \mathbf{d} = \mathbf{0}$, niin $\mathbf{d}^\top \mathbf{A} \mathbf{d} = 0$. Toisen suunnan todistamiseksi määritellään polynomi $p(\lambda)$, missä

$$\begin{aligned} p(\lambda) &= (\mathbf{d} + \lambda \mathbf{y})^\top \mathbf{A} (\mathbf{d} + \lambda \mathbf{y}) \\ &= \mathbf{d}^\top \mathbf{A} \mathbf{d} + 2\lambda \mathbf{y}^\top \mathbf{A} \mathbf{d} + \lambda^2 \mathbf{y}^\top \mathbf{A} \mathbf{y}, \end{aligned}$$

muuttuja λ on jokin skalaari, sekä \mathbf{d} ja \mathbf{y} ovat mielivaltaisia vektoreita, joissa molemmissa on n alkioita.

Koska kvadraattinen polynomi $p(\lambda)$ saa vain ei-negatiivisia arvoja, voi sillä olla korkeintaan yksi nollakohta. Silloin polynomin $p(\lambda)$ diskriminantti

$$4[(\mathbf{y}^\top \mathbf{A} \mathbf{d})^2 - (\mathbf{d}^\top \mathbf{A} \mathbf{d})(\mathbf{y}^\top \mathbf{A} \mathbf{y})]$$

voi saada vain ei-positiivisia arvoja. Jos nyt $\mathbf{d}^\top \mathbf{A} \mathbf{d} = 0$, niin myös $\mathbf{y}^\top \mathbf{A} \mathbf{d} = 0$, koska muuten diskriminantti saisi positiivisen arvon. Silloin on siis oltava $\mathbf{y}^\top \mathbf{A} \mathbf{d} = 0$ kaikilla vektoreilla \mathbf{y} , tai yhtäpitävästi $\mathbf{A} \mathbf{d} = \mathbf{0}$. □

Lause 2.18. *Reaaliarvoinen symmetrinen positiivisemidefiniitti matriisi \mathbf{A} on kääntävä, jos ja vain jos se on positiividefiniitti.*

Todistus. [6] Positiivisemidefiniitillä $n \times n$ -matriisilla \mathbf{A} on voimassa $\mathbf{d}^\top \mathbf{A} \mathbf{d} \geq 0$, ja lisäksi lauseen 2.17 mukaan $\mathbf{d}^\top \mathbf{A} \mathbf{d} = 0$, jos ja vain jos $\mathbf{A} \mathbf{d} = \mathbf{0}$. Jos matriisi \mathbf{A} on positiividefiniitti, niin $\mathbf{d}^\top \mathbf{A} \mathbf{d} = 0$, jos ja vain jos $\mathbf{d} = \mathbf{0}$. Silloin myös $\mathbf{A} \mathbf{d} = \mathbf{0}$ vain, jos $\mathbf{d} = \mathbf{0}$, jolloin matriisi \mathbf{A} on kääntävä. Jos taas matriisi \mathbf{A} on kääntävä, niin $\mathbf{A} \mathbf{d} = \mathbf{0}$ vain jos $\mathbf{d} = \mathbf{0}$. Silloin $\mathbf{d}^\top \mathbf{A} \mathbf{d} = 0$ vain, jos $\mathbf{d} = \mathbf{0}$, jolloin matriisi \mathbf{A} on positiividefiniitti. □

Lause 2.19. *Olkoon reaaliarvoinen symmetrinen $n \times n$ -matriisi \mathbf{A} positiividefiniitti. Silloin myös sen käänteismatriisi \mathbf{A}^{-1} on symmetrinen ja positiividefiniitti.*

Todistus. [6] Koska $\mathbf{d}^\top \mathbf{A} \mathbf{d} > 0$, on voimassa $\mathbf{d}^\top \mathbf{A} \mathbf{A}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{d} = (\mathbf{A} \mathbf{d})^\top \mathbf{A}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{d} > 0$. Silloin \mathbf{A}^{-1} on positiividefiniitti mielivaltaisella vektorilla $\mathbf{d}^* = \mathbf{A} \mathbf{d}$, koska

$$\mathbf{d}^{*\top} \mathbf{A}^{-1} \mathbf{d}^* > 0.$$

□

2.2 Konveksit joukot erottava hypertaso

Tässä alaluvussa todistetaan, että kahdella konveksilla joukolla, jotka eivät leikkaa toisiaan, on olemassa hypertaso, joka erottaa joukot toisistaan. Rajoitejoukon ja kohdefunktion ollessa konvekssi tiedetään aina lokaalin minimipisteen olevan myös globaali minimipiste. Tätä tietoa käyttäen voidaan johtaa monia hyödyllisiä tuloksia, joita käytetään optimointiongelmien ratkaisemisessa.

Lause 2.20. *Olkoon $S \subset \mathbb{R}^n$ suljettu konvekssi joukko ja $\mathbf{y} \notin S$. Silloin on olemassa tarkalleen yksi sellainen piste $\mathbf{x}^* \in S$, että etäisyys pisteeseen \mathbf{y} on pienin mahdollinen.*

Todistus. Olkoon $\inf\{\|\mathbf{y} - \mathbf{x}\| : \mathbf{x} \in S\} = \gamma > 0$. Silloin on olemassa sellainen jono $\{\mathbf{x}_k\}$, $\mathbf{x}_k \in S$, että $\|\mathbf{y} - \mathbf{x}_k\| \rightarrow \gamma$. Mielivaltaisilla vektoreilla $\mathbf{a}, \mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$ on voimassa suunnikassääntö, eli

$$\|\mathbf{a} - \mathbf{b}\|^2 = \|\mathbf{a}\|^2 + \|\mathbf{b}\|^2 - 2\mathbf{a}^\top \mathbf{b}$$

ja

$$\|\mathbf{a} + \mathbf{b}\|^2 = \|\mathbf{a}\|^2 + \|\mathbf{b}\|^2 + 2\mathbf{a}^\top \mathbf{b}.$$

Summaamalla yhtälöt yhteen saadaan

$$\|\mathbf{a} - \mathbf{b}\|^2 + \|\mathbf{a} + \mathbf{b}\|^2 = 2\|\mathbf{a}\|^2 + 2\|\mathbf{b}\|^2.$$

Tutkitaan, onko $\{\mathbf{x}_k\}$ Caychyn jono, koska silloin jono suppenee kohti yhtä tiettyä pistettä. Valitaan suunnikassääntöön $\mathbf{a} = \mathbf{x}_k - \mathbf{y}$ ja $\mathbf{b} = \mathbf{x}_n - \mathbf{y}$ ja saadaan

$$\|(\mathbf{x}_k - \mathbf{y}) - (\mathbf{x}_n - \mathbf{y})\|^2 = 2\|\mathbf{x}_k - \mathbf{y}\|^2 + 2\|\mathbf{x}_n - \mathbf{y}\|^2 - \|\mathbf{x}_k + \mathbf{x}_n - 2\mathbf{y}\|^2,$$

joka sievenee muotoon

$$\|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_n\|^2 = 2\|\mathbf{x}_k - \mathbf{y}\|^2 + 2\|\mathbf{x}_n - \mathbf{y}\|^2 - 4\left\|\frac{\mathbf{x}_k + \mathbf{x}_n}{2} - \mathbf{y}\right\|^2.$$

Koska S on konvekssi, niin $(\mathbf{x}_k + \mathbf{x}_n)/2 \in S$ ja määritelmästä $\gamma = \inf\{\|\mathbf{y} - \mathbf{x}\|\}$ seuraa

$$\left\|\frac{\mathbf{x}_k + \mathbf{x}_n}{2} - \mathbf{y}\right\|^2 \geq \inf\{\|\mathbf{y} - \mathbf{x}\|\}^2 = \gamma^2.$$

Kun nyt k ja n lähestyvät ääretöntä, lähestyvät $\|\mathbf{x}_k - \mathbf{y}\|^2$ ja $\|\mathbf{x}_n - \mathbf{y}\|^2$ arvoa γ^2 . Silloin myös $\|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_n\| \rightarrow 0$. Nyt jono $\{\mathbf{x}_k\}$ lähestyy suljetussa joukossa pistettä $\mathbf{x}^* \in S$, joten pienimmän etäisyyden piste on olemassa.

Osoitetaan seuraavaksi, että pienimmän etäisyyden pisteitä \mathbf{x}^* on tarkalleen yksi. Tehdään vastaoletus, että olisi olemassa sellainen toinen optimipiste $\mathbf{z} \in S$, että $\|\mathbf{y} - \mathbf{z}\| = \|\mathbf{y} - \mathbf{x}^*\| = \gamma$. Joukon S konveksisuudesta seuraa, että $(\mathbf{x} + \mathbf{z})/2 \in S$ ja Schwartzin epäyhtälön mukaan

$$\left\| \mathbf{y} - \frac{\mathbf{x}^* + \mathbf{z}}{2} \right\| = \left\| \frac{2\mathbf{y} - \mathbf{x}^* + \mathbf{z}}{2} \right\| \leq \left\| \frac{\mathbf{y} - \mathbf{x}^*}{2} \right\| + \left\| \frac{\mathbf{y} - \mathbf{z}}{2} \right\| = \gamma.$$

Koska $\gamma = \inf\{\|\mathbf{y} - \mathbf{x}\|\}$, vain yhtäsuuruus voi olla voimassa ja

$$\|2\mathbf{y} - \mathbf{x}^* + \mathbf{z}\| = \|\mathbf{y} - \mathbf{x}^*\| + \|\mathbf{y} - \mathbf{z}\| = 2\|\mathbf{y} - \mathbf{x}^*\| = 2\gamma.$$

Silloin edelleen $\|\mathbf{y} - \mathbf{x}^*\| = \|\mathbf{y} - \mathbf{z}\|$. Ratkaisuvaihtoehdot ovat nyt $\mathbf{y} - \mathbf{x}^* = \mathbf{y} - \mathbf{z}$ ja $\mathbf{y} - \mathbf{x}^* = -(\mathbf{y} - \mathbf{z})$. Ratkaisu $-(\mathbf{y} - \mathbf{z})$ ei käy, koska silloin syntyy ristiriita väitteestä $\mathbf{y} = (\mathbf{x}^* + \mathbf{z})/2 \in S$, koska $\mathbf{y} \notin S$. On siis oltava $\mathbf{y} - \mathbf{x}^* = \mathbf{y} - \mathbf{z}$ eli $\mathbf{x}^* = \mathbf{z}$ ja lyhimmän etäisyyden pisteitä on tarkalleen yksi. □

Lause 2.21. *Olkoon $S \subset \mathbb{R}^n$ suljettu konvekssi joukko ja $\mathbf{y} \notin S$. Olkoon $\mathbf{x}^* \in S$ pienimmän etäisyyden piste pisteeseen $\mathbf{y} \notin S$. Silloin ja vain silloin $(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*)^\top (\mathbf{x}^* - \mathbf{y}) \geq 0$ kaikilla $\mathbf{x} \in S$.*

Todistus. Olkoon $\mathbf{x} \in S$. Silloin suunnikassäännön mukaan

$$\|\mathbf{y} - \mathbf{x}\|^2 = \|\mathbf{y} - \mathbf{x}^* + \mathbf{x}^* - \mathbf{x}\|^2 = \|\mathbf{y} - \mathbf{x}^*\|^2 + \|\mathbf{x}^* - \mathbf{x}\|^2 + 2(\mathbf{x}^* - \mathbf{x})^\top (\mathbf{y} - \mathbf{x}^*).$$

Nyt $\|\mathbf{x}^* - \mathbf{x}\|^2 \geq 0$ ja oletuksen mukaan $(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*)^\top (\mathbf{x}^* - \mathbf{y}) \geq 0$. Silloin on oltava $\|\mathbf{y} - \mathbf{x}\|^2 \geq \|\mathbf{y} - \mathbf{x}^*\|^2$, joten $\mathbf{x}^* \in S$ on pienimmän etäisyyden piste.

Todistetaan sitten, että ehdosta $\|\mathbf{y} - \mathbf{x}\|^2 \geq \|\mathbf{y} - \mathbf{x}^*\|^2$ seuraa $(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*)^\top (\mathbf{x}^* - \mathbf{y}) \geq 0$ kaikilla $\mathbf{x} \in S$. Oletetaan, että $\|\mathbf{y} - \mathbf{x}\|^2 \geq \|\mathbf{y} - \mathbf{x}^*\|^2$ ja $\mathbf{x} \in S$. Silloin riittävän pienellä $\lambda > 0$ on voimassa $\mathbf{x}^* + \lambda(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*) \in S$ ja

$$\|\mathbf{y} - \mathbf{x}^* - \lambda(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*)\|^2 \geq \|\mathbf{y} - \mathbf{x}^*\|^2. \quad (11)$$

Suunnikassäännöstä saadaan

$$\|\mathbf{y} - \mathbf{x}^* - \lambda(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*)\|^2 = \|\mathbf{y} - \mathbf{x}^*\|^2 + \lambda^2\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^*\|^2 + 2\lambda(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*)^\top (\mathbf{x}^* - \mathbf{y}). \quad (12)$$

Sijoittamalla nyt yhtälö (12) epäyhtälöön (11) saadaan

$$\lambda^2\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^*\|^2 + 2\lambda(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*)^\top (\mathbf{x}^* - \mathbf{y}) \geq 0$$

Jakamalla epäyhtälö vakiolla λ ja lähestymällä $\lambda \rightarrow 0$ saadaan $(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*)^\top (\mathbf{x}^* - \mathbf{y}) \geq 0$, jolloin väite on todistettu. □

Konveksin joukon ulkopuolisen pisteen $\mathbf{y} \notin S$ ja konveksin joukon S väliin voidaan aina muodostaa hypertaso siten, ettei se leikkaa konveksia joukkoa S . Todistetaan seuraavaksi tämä tärkeä tulos.

Lause 2.22. Olkoon $S \subset \mathbb{R}^n$ konvekksi suljettu joukko ja $\mathbf{y} \notin S$. Silloin on olemassa sellainen vektori \mathbf{p} ja vakio α , että $\mathbf{p}^\top \mathbf{y} > \alpha$ ja $\mathbf{p}^\top \mathbf{x} \leq \alpha$ kaikilla $\mathbf{x} \in S$.

Todistus. Koska $S \neq \emptyset$ on suljettu konvekksi joukko ja $\mathbf{y} \notin S$, on lauseen 2.21 mukaan olemassa piste $\mathbf{x}^* \in S$, jonka etäisyys pisteestä \mathbf{y} on kaikkein pienin. Silloin

$$(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*)^\top (\mathbf{y} - \mathbf{x}^*) \leq (\mathbf{x}^* - \mathbf{x}^*)^\top (\mathbf{y} - \mathbf{x}^*) = 0 \quad \text{kaikilla } \mathbf{x} \in S$$

ja edelleen

$$\mathbf{x}^\top (\mathbf{y} - \mathbf{x}^*) \leq \mathbf{x}^{*\top} (\mathbf{y} - \mathbf{x}^*) \quad \text{kaikilla } \mathbf{x} \in S. \quad (13)$$

Käytetään saatua epäyhtälöä (13) hyväksi ja arvioidaan nyt pisteiden \mathbf{x}^* ja \mathbf{y} etäisyyttä

$$\|\mathbf{y} - \mathbf{x}^*\|^2 = \mathbf{y}^\top (\mathbf{y} - \mathbf{x}^*) - \mathbf{x}^{*\top} (\mathbf{y} - \mathbf{x}^*) \leq \mathbf{y}^\top (\mathbf{y} - \mathbf{x}^*) - \mathbf{x}^\top (\mathbf{y} - \mathbf{x}^*).$$

Valitaan $\mathbf{p} = \mathbf{y} - \mathbf{x}^* \neq 0$ ja saadaan

$$\|\mathbf{y} - \mathbf{x}^*\|^2 \leq \mathbf{p}^\top (\mathbf{y} - \mathbf{x}) \quad \text{kaikilla } \mathbf{x} \in S.$$

Silloin $\|\mathbf{y} - \mathbf{x}^*\|^2 + \mathbf{p}^\top \mathbf{x} \leq \mathbf{p}^\top \mathbf{y}$ kaikilla $\mathbf{x} \in S$ ja valitsemalla $\alpha = \sup\{\mathbf{p}^\top \mathbf{x} : \mathbf{x} \in S\}$ saadaan

$$\mathbf{p}^\top \mathbf{x} \leq \alpha < \mathbf{p}^\top \mathbf{y},$$

ja väite on todistettu. □

Lause 2.23. Olkoon $S \subset \mathbb{R}^n$ epätyhjä konvekksi joukko ja $\mathbf{x}^* \in \partial S$. Silloin on olemassa hypertaso, joka toimii tukitasona konveksille joukolle S pisteessä \mathbf{x}^* , eli on olemassa sellainen vektori $\mathbf{p} \neq \mathbf{0}$, että $\mathbf{p}^\top (\mathbf{x} - \mathbf{x}^*) \leq 0$ kaikilla $\mathbf{x} \in \text{cl } S$.

Todistus. Koska $\mathbf{x}^* \in S$, on olemassa jono $\{\mathbf{y}_k\} \rightarrow \mathbf{x}^*$, jossa $\mathbf{y}_k \notin \text{cl } S$. Lauseen 2.22 mukaan kaikilla \mathbf{y}_k on olemassa sellainen vektori \mathbf{p}_k , että $\mathbf{p}_k^\top \mathbf{y}_k > \mathbf{p}_k^\top \mathbf{x}$ kaikilla $\mathbf{x} \in \text{cl } S$. Vektorin \mathbf{p}_k arvot eivät välttämättä konvergoi kohti mitään vektoria \mathbf{p} avoimessa joukossa, mutta se voidaan aina jakaa jollakin reaaliluvulla niin, että $\|\mathbf{p}_k\| = 1$. Silloin joukko $\{\mathbf{p}_k\}$ on suljettu ja rajoitettu, joten voidaan aina valita osajono $\|\{\mathbf{p}_k\}_K\| = 1$, joka konvergoi kohti vektoria \mathbf{p} . Sen seurauksena on voimassa $\mathbf{p}_k^\top \mathbf{y}_k > \mathbf{p}_k^\top \mathbf{x}$ kaikilla $\mathbf{x} \in \text{cl } S$. Kun nyt $k \rightarrow \infty$, niin $\mathbf{y} \rightarrow \mathbf{x}^*$ ja $\mathbf{p}_k \rightarrow \mathbf{p}$, kun $k \in K$. Silloin $\mathbf{p}^\top \mathbf{x}^* > \mathbf{p}^\top \mathbf{x}$, eli $\mathbf{p}^\top (\mathbf{x} - \mathbf{x}^*) \leq 0$ kaikilla $\mathbf{x} \in \text{cl } S$. □

Seuraus 2.1. Olkoon $S \subset \mathbb{R}^n$ epätyhjä konvekksi joukko ja $\mathbf{y} \notin S$. Silloin on olemassa sellainen vektori $\mathbf{p} \neq \mathbf{0}$, että $\mathbf{p}^\top (\mathbf{x} - \mathbf{y}) \leq 0$ kaikilla $\mathbf{x} \in \text{cl } S$.

Todistus. Tapaus $\mathbf{y} \in \partial S$ todistetaan lauseessa 2.23. Jos $\mathbf{x} \notin \partial S$ ja $\mathbf{y} \notin S$, niin lausetta 2.22 apuna käyttäen löydetään sellainen vektori \mathbf{p} , että $\mathbf{p}^\top (\mathbf{x} - \mathbf{y}) \leq 0$ kaikilla $\mathbf{x} \in S$. □

Kaksi konveksia joukkoa, joilla ei ole yhteisiä pisteitä, voidaan aina erottaa toisistaan hypertasolla niin, että toinen joukko jää toiselle ja toinen toiselle puolelle tasoa.

Lause 2.24. *Olkoon $S_1 \subset \mathbb{R}^n$ ja $S_2 \subset \mathbb{R}^n$ epätyhjiä konvekseja joukkoja ja $S_1 \cap S_2 = \emptyset$. Silloin on olemassa hypertaso, joka erottaa joukot S_1 ja S_2 , eli on olemassa sellainen vektori $\mathbf{p} \neq \mathbf{0}$, että*

$$\sup\{\mathbf{p}^\top \mathbf{x} : \mathbf{x} \in S_1\} \leq \inf\{\mathbf{p}^\top \mathbf{x} : \mathbf{x} \in S_2\}.$$

Todistus. Olkoon $S = S_1 - S_2 = \{\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2 = \mathbf{x}^* : \mathbf{x}_1 \in S_1, \mathbf{x}_2 \in S_2\}$. Lauseen 2.4 mukaan konveksien joukkojen erotus on konvekksi, joten myös S on konvekksi. Nollavektori ei kuulu joukkoon S , koska oletuksen mukaan $S_1 \cap S_2 = \emptyset$. Silloin seurauksen 2.1 mukaan on olemassa sellainen vektori $\mathbf{p} \neq \mathbf{0}$, että $\mathbf{p}^\top \mathbf{x}^* \leq 0$ kaikilla $\mathbf{x} \in S$, jolloin $\mathbf{p}^\top \mathbf{x}_1 \leq \mathbf{p}^\top \mathbf{x}_2$ kaikilla $\mathbf{x}_1 \in S_1, \mathbf{x}_2 \in S_2$. □

2.3 Gordanin lemma

Gordanin lemma on hyödyllinen aputuloks, jota käytetään esimerkiksi Fritz John ja Karush–Kuhn–Tuckerin optimaalisuusehtojen todistamiseen. Osoittamalla toinen tehtävä ratkeavaksi saadaan selville, ettei toiseen tehtävään ole olemassa ratkaisua.

Lause 2.25. *Olkoon \mathbf{A} $m \times n$ matriisi. Silloin tarkalleen toinen seuraavista systeemeistä on ratkeava:*

$$\text{Systeemi 1: } \mathbf{Ax} < \mathbf{0}, \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$$

$$\text{Systeemi 2: } \mathbf{A}^\top \mathbf{p} = \mathbf{0} \text{ ja } \mathbf{p} \geq \mathbf{0}, \quad \mathbf{p} \neq \mathbf{0} \text{ ja } \mathbf{p} \in \mathbb{R}^m.$$

Todistus. Olkoon ensin systeemi 1 ratkeava vektorilla \mathbf{x}^* . Tehdään vastaoletus, että myös systeemi 2 on ratkeava vektorilla $\mathbf{p}^* \geq \mathbf{0}$, jolloin $\mathbf{p}^{*\top} \mathbf{Ax}^* = \mathbf{x}^{*\top} \mathbf{A}^\top \mathbf{p}^* < 0$. Koska vastaoletuksen mukaan $\mathbf{A}^\top \mathbf{p}^* = \mathbf{0}$, pitäisi myös olla $\mathbf{x}^{*\top} \mathbf{A}^\top \mathbf{p}^* = 0$. Syntyy ristiriita, joten molemmat systeemit eivät voi olla ratkeavia.

Oletetaan sitten, että systeemillä 1 ei ole ratkaisua. Muodostetaan kaksi joukkoa

$$S_1 = \{\mathbf{z} : \mathbf{z} < \mathbf{0}\} \quad \text{ja} \quad S_2 = \{\mathbf{z} : \mathbf{z} = \mathbf{Ax}, \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n\}.$$

Joukot S_1 ja S_2 ovat nyt epätyhjiä konvekseja joukkoja joiden leikkaus $S_1 \cap S_2 = \emptyset$. Silloin lauseen 2.24 mukaan on olemassa joukot S_1 ja S_2 erottava hypertaso, eli on olemassa sellainen vektori $\mathbf{p}^* \neq \mathbf{0}$, että

$$\mathbf{p}^{*\top} \mathbf{Ax} \geq \mathbf{p}^{*\top} \mathbf{z} \quad \text{kaikilla } \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{z} \in \text{cl } S_1.$$

Koska S_1 ei ole alhaalta rajoitettu, on oltava $\mathbf{p}^* \geq \mathbf{0}$, jotta epäyhtälö olisi ratkeava jollakin vakiolla \mathbf{p}^* . Silloin $\mathbf{p}^{*\top} \mathbf{Ax} \geq 0$ ja valitsemalla $\mathbf{x} = -\mathbf{Ap}^{*\top}$ saadaan $-\|\mathbf{A}^\top \mathbf{p}^*\| \geq 0$ ja edelleen $\mathbf{A}^\top \mathbf{p}^* = \mathbf{0}$.

Oletetaan vielä, että systeemi 2 ei ole ratkeava. Tehdään vastaoletus, että silloin systeemi 1 ei olisi ratkeava. Edellä todistettiin, että silloin systeemi 2 olisi ratkeava ja syntyy ristiriita. Eli jos systeemi 1 ei ratkea, niin systeemi 2 ratkeaa. □

3 Fritz John ja Karush–Kuhn–Tuckerin optimaalisuusehdot

Optimointitehtävän optimipistettä etsiessä voidaan käyttää hyväksi ehtoja, jotka tehtävän minimipiste aina täyttää. Ratkaisemalla siis ehdot täyttävät pisteet voidaan usein rajata optimointitehtävän ratkaisukandidaattien määrä niin pieneksi, että optimipiste pystytään löytämään ratkaistusta joukosta. Tunnettuja ehtoja ovat Fritz John -ehdot ja niistä edelleen johdetut Karush–Kuhn–Tuckerin optimaalisuusehdot. Näitä ehtoja käytetään hyväksi monessa optimointialgoritmissa, esimerkkinä toistettu kvadraattinen optimointi.

3.1 Välttämättömät optimaalisuusehdot ilman rajoitteita

Rajoitteettomassa optimointitehtävässä kohdefunktion f optimaalisuutta pisteessä \mathbf{x}^* voidaan tarkastella funktion gradientin avulla, jos funktio f on kaikkialla jatkuva ja differentioituva. Tässä luvussa esitellään ehtoja, jotka optimipisteen $\mathbf{x}^* \in \mathbb{R}^n$ tulee täyttää.

Määritelmä 3.1. Minimoidaan funktiota $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$. Jos $\mathbf{x}^* \in \mathbb{R}^n$ ja $f(\mathbf{x}^*) \leq f(\mathbf{x})$ kaikilla $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, sanotaan että \mathbf{x}^* on funktion f *globaali minimipiste*. Jos taas pisteellä \mathbf{x}^* on ympäristö $N_\varepsilon(\mathbf{x}^*)$ säteellä $\varepsilon > 0$, jossa $f(\mathbf{x}^*) \leq f(\mathbf{x})$ kaikilla $\mathbf{x} \in N_\varepsilon(\mathbf{x}^*)$, sanotaan pistettä \mathbf{x}^* funktion f *lokaaliksi minimipisteeksi*.

Lause 3.2. *Olkoon kuvaus $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ differentioituva pisteessä $\mathbf{x}^* \in \mathbb{R}^n$. Jos jokin vektori $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^n$ toteuttaa epäyhtälön $\nabla f(\mathbf{x}^*)^\top \mathbf{d} < 0$, niin silloin on olemassa vakio $\delta > 0$, joka toteuttaa epäyhtälön $f(\mathbf{x}^* + \lambda \mathbf{d}) < f(\mathbf{x}^*)$ kaikilla $\lambda \in (0, \delta)$, eli suunta \mathbf{d} on parantava.*

Todistus. Koska f on pisteessä \mathbf{x}^* differentioituva, voidaan kirjoittaa

$$f(\mathbf{x}^* + \lambda \mathbf{d}) = f(\mathbf{x}^*) + \lambda \nabla f(\mathbf{x}^*)^\top \mathbf{d} + \lambda \|\mathbf{d}\| \alpha(\mathbf{x}^*, \lambda \mathbf{d}), \quad (14)$$

jossa virhetermi $\alpha(\mathbf{x}^*; \lambda \mathbf{d}) \rightarrow 0$, kun $\lambda \rightarrow 0$. Nyt yhtälö (14) voidaan kirjoittaa muodossa

$$\frac{f(\mathbf{x}^* + \lambda \mathbf{d}) - f(\mathbf{x}^*)}{\lambda} = \nabla f(\mathbf{x}^*)^\top \mathbf{d} + \|\mathbf{d}\| \alpha(\mathbf{x}^*, \lambda \mathbf{d}), \quad (15)$$

jossa $\lambda \in (0, \delta)$. Koska oletuksen mukaan $\nabla f(\mathbf{x}^*)^\top \mathbf{d} < 0$, eikä $f(\mathbf{x}^*)^\top \mathbf{d}$ riipu muuttujasta λ , niin $\nabla f(\mathbf{x}^*)^\top \mathbf{d} + \|\mathbf{d}\| \alpha(\mathbf{x}^*, \lambda \mathbf{d}) < 0$, kun $\lambda \in (0, \delta)$ ja $\delta > 0$ on riittävän pieni. Lisäksi $\lambda > 0$, joten yhtälön (15) mukaan myös $f(\mathbf{x}^* + \lambda \mathbf{d}) - f(\mathbf{x}^*) < 0$, kun $\lambda \in (0, \delta)$ ja $\delta > 0$ on riittävän pieni. Tämän seurauksena suunta \mathbf{d} on parantava pisteessä \mathbf{x}^* . □

Seuraus 3.1. Jos funktio $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ on differentioituva lokaalissa minimipisteessä $\mathbf{x}^* \in \mathbb{R}^n$, niin silloin on voimassa $\nabla f(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$.

Todistus. Tehdään vastaoletus, että optimipisteessä $\nabla f(\mathbf{x}^*) \neq \mathbf{0}$. Valitaan suunnaksi $\mathbf{d} = -\nabla f(\mathbf{x}^*)$, jolloin saadaan $\nabla f(\mathbf{x}^*)^\top \mathbf{d} = -\|\nabla f(\mathbf{x}^*)\|^2 < 0$. Huomataan, että lauseen 3.2 mukaan $\mathbf{d} = -\nabla f(\mathbf{x}^*)$ on parantava suunta, joten \mathbf{x}^* ei ole lokaali minimipiste, kun $\nabla f(\mathbf{x}^*) \neq \mathbf{0}$. Siis $\nabla f(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$. □

Lause 3.3. Oletetaan, että funktio $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ on kahdesti differentioituva pisteessä $\mathbf{x}^* \in \mathbb{R}^n$. Jos piste \mathbf{x}^* on funktion f lokaali minimipiste, niin $\nabla f(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$ ja Hessen matriisi $\mathbf{H}(\mathbf{x}^*)$ on positiivisemidefiniitti.

Todistus. Valitaan mielivaltainen suunta $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^n$ ja muodostetaan funktiolle f toisen asteen approksimaatio

$$f(\mathbf{x}^* + \lambda \mathbf{d}) = f(\mathbf{x}^*) + \lambda \nabla f(\mathbf{x}^*)^\top \mathbf{d} + \frac{1}{2} \lambda^2 \mathbf{d}^\top \mathbf{H}(\mathbf{x}^*) \mathbf{d} + \lambda^2 \|\mathbf{d}\|^2 \alpha(\mathbf{x}^*; \lambda \mathbf{d}). \quad (16)$$

Koska piste \mathbf{x}^* on funktion f lokaali minimipiste, niin seurauksen 3.1 nojalla $\nabla f(\mathbf{x}^*)^\top \mathbf{d} = 0$. Uudelleenjärjestelemällä yhtälöä (16) saadaan

$$\frac{f(\mathbf{x}^* + \lambda \mathbf{d}) - f(\mathbf{x}^*)}{\lambda^2} = \frac{1}{2} \mathbf{d}^\top \mathbf{H}(\mathbf{x}^*) \mathbf{d} + \|\mathbf{d}\|^2 \alpha(\mathbf{x}^*, \lambda \mathbf{d}).$$

Koska piste \mathbf{x}^* on lokaali minimipiste, niin $f(\mathbf{x}^* + \lambda \mathbf{d}) - f(\mathbf{x}^*) \geq 0$, kun askelpituus λ on riittävän pieni. Lähestyttäessä pistettä \mathbf{x}^* myös virhetermi $\lambda^2 \|\mathbf{d}\|^2 \alpha(\mathbf{x}^*; \lambda \mathbf{d}) \rightarrow 0$. Silloin myös $\mathbf{d}^\top \mathbf{H}(\mathbf{x}^*) \mathbf{d} \geq 0$ ja matriisi $\mathbf{H}(\mathbf{x}^*)$ on positiivisemidefiniitti. □

Lause 3.4. Olkoon $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ pseudokonvekksi kuvaus. Silloin $\mathbf{x}^* \in \mathbb{R}^n$ on globaali minimipiste, jos ja vain jos $\nabla f(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$.

Todistus. Oletetaan ensin, että $\nabla f(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$. Silloin $\nabla f(\mathbf{x}^*)^\top (\mathbf{x} - \mathbf{x}^*) = 0$, joten pseudokonveksisuuden määritelmästä seuraa, että $f(\mathbf{x}^*) \leq f(\mathbf{x})$ kaikilla $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ ja siten \mathbf{x}^* on globaali minimipiste. Seurauksen 3.1 mukaan, jos \mathbf{x}^* on globaali minimipiste, \mathbf{x}^* on myös lokaali minimipiste ja silloin $\nabla f(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$, joten väite on todistettu. □

3.2 Fritz John -ehdot epäyhtälörajoitteilla

Esitetään seuraavaksi geometrinen tulkinta epäyhtälörajoitteellisesta minimointitehtävästä

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \quad & f(\mathbf{x}) \\ \text{s.t.} \quad & g_i(\mathbf{x}) \leq 0, \quad i, \dots, m, \\ & \mathbf{x} \in X, \end{aligned} \quad (17)$$

jossa $X \subset \mathbb{R}^n$ on epätyhjä avoin joukko sekä funktiot f ja g kuvauksia $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ ja $g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$.

Määritellään sallittujen pisteiden joukko $S \subset \mathbb{R}^n$ matemaattisesti. Tarkastelemalla minimointitehtävää (17) sallittujen pisteiden joukko S voidaan esittää muodossa

$$S = \{\mathbf{x} \in X : g_i(\mathbf{x}) \leq 0, i = 1, \dots, m\}.$$

Jotta piste \mathbf{x}^* olisi tehtävän lokaali minimipiste, pitää sen toteuttaa myös epäyhtälörajoitefunktioiden ehdot $g_i(\mathbf{x}) \leq 0$. Tehtävässä (17) $X \subset \mathbb{R}^n$ on funktion f avoin määrittelyjoukko. Rajoitteet määräävät sallittujen ratkaisujen joukon $S \subseteq X$. Määrittellään optimaalisuusehtoja varten seuraavat kartiot. Olkoon kartio D kaikkien sallittujen suuntien kartio pisteessä $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, eli

$$D = \{\mathbf{d} \in \mathbb{R}^n : \mathbf{d} \neq \mathbf{0}, \mathbf{x} + \lambda \mathbf{d} \in S \text{ kaikilla } \lambda \in (0, \delta) \text{ jollakin } \delta > 0\}.$$

Laskevien ja parantavien suuntien kartio F_0 pisteessä $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ määrittellään vastaavasti

$$F_0 = \{\mathbf{d} \in \mathbb{R}^n : \nabla f(\mathbf{x})^\top \mathbf{d} < 0\}. \quad (18)$$

Lause 3.5. *Tarkastellaan epäyhtälörajoitteellista minimointitehtävää (17), jossa $\mathbf{x}^* \in X \neq \emptyset$. Jos f on differentioituva ja $\mathbf{x}^* \in X$ on lokaali minimipiste, niin $F_0 \cap D = \emptyset$.*

Todistus. Tehdään vasta oletus, että on olemassa $\mathbf{d}^* \in F_0 \cap D$. Silloin lauseen 3.2 mukaan on olemassa sellainen $\delta_1 > 0$, että $f(\mathbf{x}^* + \lambda \mathbf{d}^*) < f(\mathbf{x}^*)$ kaikilla $\lambda \in (0, \delta_1)$. Lisäksi määritellyn kartion kaavan (18) mukaan löytyy myös sellainen $\delta_2 > 0$, että $\mathbf{x}^* + \lambda \mathbf{d}^* \in S$ kaikilla $\lambda \in (0, \delta_2)$. Siitä seuraa, että $f(\mathbf{x}^* + \lambda \mathbf{d}^*) < f(\mathbf{x}^*)$, kun $0 < \lambda < \min(\delta_1, \delta_2)$. Tämä on ristiriita väitteen kanssa, että \mathbf{x}^* on lokaali minimipiste. \square

Rajoitefunktion g_i sanotaan olevan aktiivinen pisteessä \mathbf{x}^* ja kuuluvan indeksiin I , kun $g_i(\mathbf{x}^*) = 0$. Määrittellään nyt pisteessä $\mathbf{x}^* \in \mathbb{R}^n$ sallittujen suuntien kartio aktiivisten rajoitteiden suhteen, eli

$$G_0 = \{\mathbf{d} \in \mathbb{R}^n : \nabla g_i(\mathbf{x}^*)^\top \mathbf{d} < 0 \text{ kaikilla } i \in I = \{i : g_i(\mathbf{x}^*) = 0\}\}.$$

Lause 3.6. *Tarkastellaan epäyhtälörajoitteellista optimointitehtävää (17), jossa $\mathbf{x}^* \in \mathbb{R}^n$ on piste avoimesta joukosta $X \subset \mathbb{R}^n$. Olkoon I aktiivisten rajoitteiden joukko pisteessä \mathbf{x}^* , eli $g_i(\mathbf{x}^*) = 0$, kun $i \in I$. Oletetaan, että f ja g_i kaikilla $i \in I$ ovat differentioituvia pisteessä \mathbf{x}^* ja että g_i kaikilla $i \notin I$ ovat jatkuvia pisteessä \mathbf{x}^* . Jos \mathbf{x}^* on lokaali minimipiste, niin $F_0 \cap G_0 = \emptyset$.*

Todistus. Valitaan nolosta poikkeava suuntavektori $\mathbf{d} \in G_0$. Koska $\mathbf{x}^* \in X$ ja X on avoin joukko, on olemassa sellainen $\delta_1 > 0$, että

$$\mathbf{x}^* + \lambda \mathbf{d} \in X \text{ kaikilla } \lambda \in (0, \delta_1).$$

Epäaktiivisille rajoitteille $g_i(\mathbf{x}^*) < 0$, jotka ovat jatkuvia pisteessä \mathbf{x}^* , on olemassa sellainen $\delta_2 > 0$, että

$$g_i(\mathbf{x}^* + \lambda \mathbf{d}) < 0 \text{ kaikilla } \lambda \in (0, \delta_2) \text{ ja } i \notin I.$$

Kolmanneksi, koska $\mathbf{d} \in G_0$ eli $\nabla g_i(\mathbf{x}^*)^\top \mathbf{d} < 0$ kaikilla $i \in I$ ja g_i on jatkuva pisteessä \mathbf{x}^* , on lauseen 3.2 mukaan olemassa sellainen $\delta_3 > 0$, että

$$g_i(\mathbf{x}^* + \lambda \mathbf{d}) < g_i(\mathbf{x}^*) = 0 \text{ kaikilla } \lambda \in (0, \delta_3) \text{ ja } i \in I.$$

Silloin suunta \mathbf{d} on sallittu kaikilla askelpituuksilla λ , kun $0 < \lambda < \delta$ ja $\delta = \min(\delta_1, \delta_2, \delta_3)$, joten $\mathbf{d} \in D$. Tästä seuraa, että koska $\mathbf{d} \in G_0 \subset D$ ja lauseen 3.5 mukaan lokaalissa minimipisteessä on voimassa $F_0 \cap D = \emptyset$, niin $F_0 \cap G_0 = \emptyset$. \square

Huomautus 3.1. Lauseen 3.6 hyödyllisyys optimaalisuustarkistuksessa menetetään jos alkuperäisessä tehtävässä on mukana yhtälörajoitteita, koska ne pitää aina ensin muuttaa kahdeksi epäyhtälöksi. Tällöin sallittujen suuntien kartio aktiivisten rajoitteiden suhteen on tyhjä joukko eli $G_0 = \emptyset$, eikä parantavaa suuntaa ole. Jos rajoite $g(\mathbf{x}) = 0$ muutetaan muotoon

$$\begin{aligned} g(\mathbf{x}) &\leq 0 \quad \text{ja} \\ g(\mathbf{x}) &\geq 0, \end{aligned}$$

päädytään rajoitteisiin, joissa $g_1(\mathbf{x}) = g(\mathbf{x}) \leq 0$ ja $g_2(\mathbf{x}) = -g(\mathbf{x}) \leq 0$. Silloin epäyhtälörajoitefunktioiden gradientit ovat toisistaan lineaarisesti riippuvia ja kaikissa sallituissa pisteissä $\mathbf{x} \in S$ toteutuu $g_1(\mathbf{x}) = g_2(\mathbf{x}) = 0$. Koska $g(\mathbf{x}) = g_1(\mathbf{x}) = -g_2(\mathbf{x})$ niin $\nabla g_1(\mathbf{x}) = -\nabla g_2(\mathbf{x})$. Tästä seuraa, että ei ole olemassa sellaista suuntaa \mathbf{d} , että $\nabla g_1(\mathbf{x}^*)^\top \mathbf{d} < 0$ ja $\nabla g_2(\mathbf{x}^*)^\top \mathbf{d} < 0$, joten aina $G_0 = \emptyset$.

Edellä esitettyjen geometrinen ehtojen pohjalta voidaan määrätä Fritz John -ehdot. Näillä ehdoilla funktion f lokaalissa minimipisteessä \mathbf{x}^* on voimassa aina joko $\nabla f(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$ tai jokin rajoite estää funktion f arvon pienenemisen, jolloin $g_i(\mathbf{x}^*) = 0$ jollakin $i \in I$.

Lause 3.7. *Fritz John -ehdot:* Tarkastellaan epäyhtälörajoitteellista minimointitehtävää (17). Olkoon $\mathbf{x}^* \in S$ sallittu piste ja $I = \{i : g_i(\mathbf{x}^*) = 0\}$ aktiivisten rajoitefunktioiden indeksien joukko. Oletetaan, että f ja g_i kaikilla $i \in I$ ovat differentioituvia pisteessä \mathbf{x}^* ja että g_i kaikilla $i \notin I$ ovat jatkuvia pisteessä \mathbf{x}^* . Jos \mathbf{x}^* on tehtävän lokaali minimipiste, niin silloin on olemassa sellaiset vakiot u_0 ja u_i kaikille $i \in I$, että

$$\begin{aligned} u_0 \nabla f(\mathbf{x}^*) + \sum_{i \in I} u_i \nabla g_i(\mathbf{x}^*) &= \mathbf{0} \\ u_0, u_i &\geq 0, \quad i \in I \\ (u_0, \mathbf{u}_I) &\neq (0, \mathbf{0}), \end{aligned}$$

missä \mathbf{u}_I on vektori, joka koostuu aktiivisten rajoitteiden $i \in I$ komponenteista u_i . Lisäksi, jos funktiot g_i kaikilla $i \notin I$ ovat differentioituvia pisteessä \mathbf{x}^* , voidaan Fritz John -ehdot kirjoittaa muodossa

$$\begin{aligned} u_0 \nabla f(\mathbf{x}^*) + \sum_{i=1}^m u_i \nabla g_i(\mathbf{x}^*) &= \mathbf{0} \\ u_i g_i(\mathbf{x}^*) &= 0, \quad i = 1, \dots, m \\ u_0, u_i &\geq 0, \quad i = 1, \dots, m \\ (u_0, \mathbf{u}) &\neq (0, \mathbf{0}), \end{aligned}$$

missä \mathbf{u} on vektori, joka koostuu kaikkien rajoitteiden i komponenteista u_i .

Todistus. Koska $\mathbf{x}^* \in S$ on lokaali minimipiste, niin lauseen 3.6 mukaan ei ole olemassa sellaista parantavaa suuntaa \mathbf{d} , että $\nabla f(\mathbf{x}^*)^\top \mathbf{d} < 0$ ja $\nabla g_i(\mathbf{x}^*)^\top \mathbf{d} < 0$ kaikilla $i \in I$. Jos nyt muodostetaan matriisiin \mathbf{A} vaakarivit gradienteista $\nabla f(\mathbf{x}^*)^\top$

ja $\nabla g_i(\mathbf{x}^*)^\top$, saadaan epäyhtälö $\mathbf{A}\mathbf{d} < \mathbf{0}$, jolle ei löydy ratkaisua \mathbf{d} . Silloin Gordanin lemmän 2.25 mukaan on olemassa sellainen nollasta poikkeava vektori $\mathbf{p} \geq \mathbf{0}$, että $\mathbf{A}^\top \mathbf{p} = \mathbf{0}$. Merkitsemällä $\mathbf{p} = (u_0, u_I)$ saadaan todistettua ehdot, kun g_i on jatkuva pisteessä \mathbf{x}^* . Jos myös epäaktiiviset rajoitteet ovat differentioituvia pisteessä \mathbf{x}^* , ehdot toteutuvat merkitsemällä $u_i = 0$ aina, kun $i \notin I$. □

Fritz John -ehtojen käyttökelpoisuutta heikentää ehtojen toteutuminen myös pisteissä, jotka eivät ole lokaaleja optimeja. Kuten huomautuksessa 3.1, jos alkuperäisessä tehtävässä on yhtälörajoite, pitää se Fritz John -ehtoja käyttääkseen kirjoittaa kahtena epäyhtälönä. Tästä siten seuraa, että kaikki sallitut pisteet toteuttavat ehdot 3.7, koska epäyhtälörajoitteiden kertoimiksi u_1 ja u_2 voidaan aina valita $u_1 = u_2 > 0$. Tämän jälkeen ehdot toteutuvat, kun valitaan lopuille kertoimille $u_i = 0$. Lisäksi epäyhtälörajoitteellisissa tehtävissä ehdot saadaan toteutumaan kohdefunktiosta riippumatta kaikissa pisteissä \mathbf{x}^* , joissa sekä $\nabla g_i(\mathbf{x}^*) + u_i \nabla g_j(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$ että $g_i(\mathbf{x}^*) = g_j(\mathbf{x}^*) = 0$, kun $i \neq j$ ja $u_i > 0$.

Esimerkki 3.8. Tarkastellaan minimointitehtävää

$$\begin{aligned} \min_{x \in \mathbb{R}} \quad & -x^2 - 100 \\ \text{s.t.} \quad & -2x + \alpha \leq 0 \\ & x + \beta \leq 0 \\ & x \geq 0, \end{aligned}$$

jossa α ja β ovat parametrejä avaruudessa \mathbb{R} . Kohdefunktio $f(x) \rightarrow -\infty$ selvästi, kun $x \rightarrow \infty$. Kuitenkin, koska rajoitefunktioiden gradientit ovat lineaarisesti riippuvia toisistaan, voidaan valita rajoitteille sellaiset sopivat kertoimet u_1 ja u_2 , että $u_1 \nabla g_1(x) = -u_2 \nabla g_2(x)$. Nyt valitsemalla mikä tahansa x voidaan löytää sellaiset sopivat parametrit α ja β , että $g_1(x) = g_2(x) = 0$ ja $u_0 = 0$ ja Fritz John -ehdot toteutuvat aina riippumatta funktiosta f .

3.3 Karush–Kuhn–Tuckerin ehdot epäyhtälörajoitteilla

Määräämällä Fritz John -ehtojen lisäksi rajoitefunktioiden gradienttifunktiot toisistaan lineaarisesti riippumattomiksi voidaan esittää välttämättömät Karush–Kuhn–Tuckerin ehdot, eli KKT-ehdot lokaalille optimipisteelle. Ehtoja varten määritellään Lagrangen funktio

$$L(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = f(\mathbf{x}) + \sum_{i \in I} u_i g_i(\mathbf{x}),$$

missä vakiosta u_i käytetään nimeä Lagrangen kerroin.

Lause 3.9. Välttämättömät KKT-ehdot: Tarkastellaan epäyhtälörajoitteellista minimointitehtävää (17). Olkoon $X \subset \mathbb{R}^n$ epätyhjä ja avoin joukko, $\mathbf{x}^* \in X$ sallittu ratkaisu ja $I = \{i : g_i(\mathbf{x}^*) = 0\}$. Olkoon myös funktiot f ja g_i kaikilla $i \in I$ differentioituvia pisteessä \mathbf{x}^* ja funktiot g_i jatkuvia kaikilla $i \notin I$ pisteessä \mathbf{x}^* . Fritz John

-ehtojen lisäksi oletetaan, että $\nabla g_i(\mathbf{x}^*)$ kaikilla $i \in I$ ovat lineaarisesti riippumattomia. Silloin lokaalissa minimissä \mathbf{x}^* on olemassa vakiot u_i kaikilla $i \in I$ siten että

$$\nabla f(\mathbf{x}^*) + \sum_{i \in I} u_i \nabla g_i(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$$

$$u_i \geq 0, \quad i \in I.$$

Jos lisäksi oletetaan, että funktiot g_i kaikilla $i \notin I$ ovat differentioituva pisteessä \mathbf{x}^* , voidaan KKT-ehdot kirjoittaa muodossa

$$\nabla f(\mathbf{x}^*) + \sum_{i=1}^m u_i \nabla g_i(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$$

$$u_i g_i(\mathbf{x}^*) = 0, \quad i = 1, \dots, m$$

$$u_i \geq 0, \quad i = 1, \dots, m.$$

Todistus. Koska Fritz John -ehdoissa 3.7 kaikki aktiivisten rajoitteiden gradienttifunktiot ∇g_i ovat lineaarisesti riippumattomia, huomataan, että on oltava $u_0 > 0$, jotta yhtälöryhmä ratkeaisi ja ehdot toteutuisivat. Ratkaisusta (u_0, \mathbf{u}) riippumatta voidaan vektori (u_0, \mathbf{u}) jakaa vakiolla u_0 , missä \mathbf{u} on kertoimien u_i vektori (u_1, u_2, \dots, u_m) . Silloin saadaan uusi vektori, joka edelleen toteuttaa ehtojen yhtälöryhmän ja $u_0 = 1$. Lause seuraa tästä. □

Riittävät KKT-ehdot takaavat, että löydetty KKT-piste on globaali minimipiste.

Lause 3.10. *Riittävät KKT-ehdot:* Olkoon $X \subset \mathbb{R}^n$ epätyhjä ja avoin joukko. Tarkastellaan epäyhtälörajoitteellista minimointitehtävää (17). Olkoon $\mathbf{x}^* \in X$ sallittu ratkaisu ja $I = \{i : g_i(\mathbf{x}^*) = 0\}$. Olkoon myös funktiot f ja g_i kaikilla $i \in I$ differentioituvia pisteessä \mathbf{x}^* ja funktiot g_i jatkuvia kaikilla $i \notin I$ pisteessä \mathbf{x}^* . Lisäksi oletetaan, että f on pseudokonvekksi pisteessä \mathbf{x}^* ja g_i kvasikonvekksi pisteessä \mathbf{x}^* kaikilla $i \in I$. Jos KKT-ehdot ovat voimassa, on piste \mathbf{x}^* funktion f globaali minimipiste.

Todistus. Olkoon \mathbf{x}^* sallittu ratkaisu. Silloin $g_i(\mathbf{x}) \leq g_i(\mathbf{x}^*) = 0$ kaikilla \mathbf{x} ja $i \in I$. Koska kaikki funktiot g_i ovat kvasikonveksejä ja differentioituvia pisteessä \mathbf{x}^* , niin kvasikonveksisuudesta johtuen liikuttaessa pisteestä \mathbf{x}^* mihin tahansa sallitun pisteen \mathbf{x} määräämään suuntaan $\mathbf{d} = \mathbf{x} - \mathbf{x}^*$ on lauseen 2.8 mukaan voimassa $\nabla g_i(\mathbf{x}^*)^\top \mathbf{d} \leq 0$. Valitsemalla nyt jokaiselle aktiiviselle rajoitteelle $i \in I$ positiivinen kerroin $u_i > 0$ ja epäaktiivisille rajoitteille $i \notin I$ kerroin $u_i = 0$ saadaan

$$\sum_{i \in I} u_i \nabla g_i(\mathbf{x}^*)^\top \mathbf{d} \leq 0. \tag{19}$$

Kertomalla KKT-ehtojen Lagrangen funktion gradientti suunnalla \mathbf{d} saadaan

$$\nabla f(\mathbf{x}^*)^\top \mathbf{d} + \sum_{i \in I} u_i \nabla g_i(\mathbf{x}^*)^\top \mathbf{d} = 0$$

ja nyt epäyhtälön (19) seurauksena on oltava $\nabla f(\mathbf{x}^*)^\top \mathbf{d} \geq 0$. Silloin funktion f pseudokonveksisuudesta seuraa, että $f(\mathbf{x}) \geq f(\mathbf{x}^*)$ kaikilla \mathbf{x} . □

Kannattaa huomata, että lineaariset funktiot ovat kvasi- ja pseudokonveksejä, joten KKT-ehdot toteuttava minimipiste lineaarisessa optimointiongelmassa on aina myös globaali minimipiste.

3.4 Fritz John -ehdot yhtälö- ja epäyhtälörajoitteilla

Muodostetaan geometrinen tulkinta lokaalista minimipisteestä tehtävän ollessa

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \quad & f(\mathbf{x}) \\ \text{s.t.} \quad & g_i(\mathbf{x}) \leq 0, \quad i = 1, \dots, m \\ & h_i(\mathbf{x}) = 0, \quad i = 1, \dots, l \\ & \mathbf{x} \in X, \end{aligned} \tag{20}$$

jossa $X \subset \mathbb{R}^n$ on epätyhjä avoin joukko sekä funktiot f , g ja h ovat kuvauksia $\mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$. Silloin käyttäen parantavien suuntien kartiota

$$F_0 = \{\mathbf{d} \in \mathbb{R}^n : \nabla f(\mathbf{x}^*)^\top \mathbf{d} < 0\},$$

sallittujen suuntien kartiota epäyhtälörajoitteiden suhteen

$$G_0 = \{\mathbf{d} \in \mathbb{R}^n : \nabla g_i(\mathbf{x}^*)^\top \mathbf{d} < 0, i \in I = \{i : g_i(\mathbf{x}^*) = 0\}\}$$

sekä sallittujen suuntien kartiota yhtälörajoitteiden suhteen

$$H_0 = \{\mathbf{d} \in \mathbb{R}^n : \nabla h_i(\mathbf{x}^*)^\top \mathbf{d} = 0, i = 1, \dots, l\},$$

voidaan osoittaa seuraava lause.

Lause 3.11. *Olkoon $X \subset \mathbb{R}^n$ epätyhjä ja avoin joukko. Tarkastellaan yhtälö- ja epäyhtälörajoitteellista minimointitehtävää (20). Olkoon \mathbf{x}^* lokaali minimipiste ja I aktiivisten rajoitteiden joukko eli $I = \{i : g_i(\mathbf{x}^*) = 0\}$. Olkoon g_i kaikilla $i \notin I$ jatkuva pisteessä \mathbf{x}^* . Lisäksi olkoon f ja g_i kaikilla $i \in I$ differentioituvia pisteessä \mathbf{x}^* ja h_i jatkuvasti differentioituva pisteessä \mathbf{x}^* kaikilla $i = 1 \dots l$. Jos vielä gradientit $\nabla h_i(\mathbf{x}^*)$ kaikilla $i = 1, \dots, l$ ovat toisistaan lineaarisesti riippumattomia, niin silloin $F_0 \cap G_0 \cap H_0 = \emptyset$.*

Todistus. Tehdään vastaoletus, että lokaalissa optimipisteessä \mathbf{x}^* on olemassa sellainen suunta $\mathbf{d}_x \in \mathbb{R}^n$, että $\mathbf{d}_x \in F_0 \cap G_0 \cap H_0$. Silloin on olemassa sellainen parantava suunta \mathbf{d}_x , että $\nabla f(\mathbf{x}^*)^\top \mathbf{d}_x < 0$ ja $\nabla g_i(\mathbf{x}^*)^\top \mathbf{d}_x < 0$ kaikilla $i \in I$. Lisäksi $\nabla \mathbf{h}(\mathbf{x}^*) \mathbf{d}_x = \mathbf{0}$, missä $\nabla \mathbf{h}(\mathbf{x}^*)$ on $l \times n$ -matriisi, jonka pystyvirvit koostuvat vektoreista $\nabla h_i(\mathbf{x}^*)$, $i = 1, \dots, l$. Määritellään mielivaltainen differentioituva funktio $\alpha(\lambda) : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^n$ ehdolla $\alpha(0) = \mathbf{x}^*$ ja $\lambda \geq 0$ sekä sellainen matriisi \mathbf{A} , että

$$\frac{d \alpha(\lambda)}{d\lambda} = \mathbf{A}(\lambda) \mathbf{d}_x, \tag{21}$$

kun λ on riittävän pieni. Funktio h on jatkuvasti differentioituva pisteessä \mathbf{x}^* , kaikki gradientit ∇h_i ovat lineaarisesti riippumattomia toisistaan ja matriisi $\nabla \mathbf{h}(\mathbf{x}^*)$ on täysiasteinen. Näin ollen on olemassa matriisi $\mathbf{A}(\lambda)$, joka kuvaa kaikki vektorit matriisin $\nabla \mathbf{h}(\alpha(\lambda))$ nolla-avaruuteen. Silloin

$$\nabla \mathbf{h}(\alpha(\lambda))^\top (\mathbf{A}(\lambda) \mathbf{d}_x) = \mathbf{0}, \tag{22}$$

kun λ on riittävän pieni, \mathbf{A} on jatkuva pisteessä \mathbf{x}^* ja lisäksi $\lambda < \delta$ jollakin $\delta > 0$. Nyt yhtälörajoitteet eivät rajoita suuntaa \mathbf{d}_x pisteessä $\alpha(\lambda)$.

Oletetaan nyt, että $\lambda < \delta$, joten piste $\alpha(\lambda)$ on sallittu. Yhtälöstä (21) ja ehdosta $\mathbf{x} = \alpha(\lambda)$ saadaan ketjusäännön avulla

$$\frac{d g_i(\alpha(\lambda))}{d\lambda} = g'[\alpha(\lambda)] \frac{d \alpha(\lambda)}{d\lambda} = \nabla_x g_i(\alpha(\lambda))^\top \mathbf{A}(\lambda) \mathbf{d}_x \quad \text{kaikilla } i \in I. \quad (23)$$

Kun $\lambda = 0$, yhtälörajoitteiden gradientti $\nabla \mathbf{h}(\mathbf{x}^*)$ on ortogonaalinen parantavan suunnan \mathbf{d}_x kanssa. Lisäksi yhtälön (22) mukaan $\nabla \mathbf{h}(\mathbf{x}^*) \mathbf{A}(0) \mathbf{d}_x = \mathbf{0}$. Silloin siis $\nabla \mathbf{h}(\mathbf{x}^*) \mathbf{d}_x = \nabla \mathbf{h}(\mathbf{x}^*) (\mathbf{A}(0) \mathbf{d}_x) = \mathbf{0}$ ja edelleen $\mathbf{A}(0) \mathbf{d}_x = \mathbf{d}_x$. Kun $\lambda \rightarrow 0$ niin vastaoletuksen $\nabla g_i(\mathbf{x}^*)^\top \mathbf{d}_x < 0$ kaikilla $i \in I$ ja yhtälön (23) seurauksena

$$\frac{d g_i(\alpha(0))}{d\lambda} = \nabla g_i(\mathbf{x}^*)^\top \mathbf{d}_x < 0 \quad \text{kaikilla } i \in I.$$

Koska g_i on nyt vähenevä pisteessä $\lambda = 0$, niin silloin on olemassa sellainen riittävän pieni $\lambda > 0$, että

$$\begin{aligned} \frac{d g_i(\alpha(0))}{d\lambda} = \nabla g_i(\mathbf{x}^*)^\top \mathbf{d}_x &< \frac{d g_i(\alpha(\lambda))}{d\lambda} = \nabla g_i(\alpha(\lambda))^\top \mathbf{d}_x \\ &< \frac{d g_i(\alpha(2\lambda))}{d\lambda} = \nabla g_i(\alpha(2\lambda))^\top \mathbf{d}_x = 0 \quad \text{kaikilla } i \in I. \end{aligned}$$

Silloin pisteessä $\alpha(0)$ suunta \mathbf{d}_x on parantava ja sen seurauksena edelleen

$$g_i(\mathbf{x}^*) = g_i(\alpha(0)) > g_i(\alpha(\lambda)).$$

Silloin siis $\mathbf{d}_x \in G_0$ pisteessä $\alpha(\lambda)$ ja $g_i(\alpha(\lambda)) < g_i(\mathbf{x}^*)$. Epäaktiivisille epäyhtälörajoitteille, joissa $g_i(\mathbf{x}^*) < 0, i \notin I$, löytyy myös aina sellainen riittävän pieni λ , että $g_i(\mathbf{x}^*) < g_i(\alpha(\lambda)) < 0$, jolloin $\alpha(\lambda)$ on sallittu piste.

Parantaville suunnille F_0 voidaan todistaa piste $f(\alpha(\lambda))$ sallitaksi täsmälleen samalla menetelmällä kuin aktiivisilla epäyhtälörajoitteilla käyttämällä vastaoletusta

$$\frac{d f(\alpha(0))}{d\lambda} = \nabla f(\mathbf{x}^*)^\top \mathbf{d}_x < 0.$$

Päädytään tulokseen, että $\mathbf{d}_x \in F_0$ pisteessä $\alpha(\lambda)$ ja $f(\alpha(\lambda)) < f(\mathbf{x}^*)$.

Arvioidaan seuraavaksi pistettä $h_i(\alpha(\lambda))$, kun λ on riittävän pieni. Silloin väliarvolauseen nojalla on olemassa sellainen $0 < \mu < \lambda$, että

$$\begin{aligned} h_i(\alpha(\lambda)) &= h_i(\alpha(0)) + \lambda \frac{d h_i(\alpha(\mu))}{d\lambda} \\ &= \lambda \frac{d h_i(\alpha(\mu))}{d\lambda} \end{aligned}$$

ja yhtälöä (23) mukaillen

$$h_i(\alpha(\lambda)) = \lambda \frac{d h_i(\alpha(\mu))}{d\lambda} = \lambda \nabla h_i(\alpha(\mu))^\top \mathbf{A}(\mu) \mathbf{d}_x.$$

Nyt $\mathbf{A}(\mu)$ kuvaa vektorin \mathbf{d}_x matriisin $\nabla h_i(\alpha(\mu))$ nolla-avaruuteen, joten

$$h_i(\alpha(\lambda)) = 0\lambda = 0.$$

Silloin $\mathbf{d}_x \in H_0$ pisteessä $\alpha(\lambda)$ ja $h_i(\alpha(\lambda)) = h_i(\mathbf{x}^*) = 0$. Nyt on osoitettu, että jos on olemassa pisteessä \mathbf{x}^* suunta \mathbf{d}_x , joka kuuluu kartioihin G_0 , F_0 ja H_0 , niin on olemassa sellainen sallittu piste $\alpha(\lambda)$, että $f(\alpha(\lambda)) < f(\mathbf{x}^*)$. Tämä on kuitenkin ristiriita väitteen kanssa, että \mathbf{x}^* on lokaali minimipiste. Lokaalissa optimipisteessä siis $F_0 \cap G_0 \cap H_0 = \emptyset$. □

Edellisen lauseen 3.11 avulla voidaan muodostaa Fritz John -ehdot yhtälö- ja epäyhtälörajoitteita sisältävälle optimointitehtävälle.

Lause 3.12. *Fritz John -ehdot yhtälö- ja epäyhtälörajoitteilla:* Olkoon $X \subset \mathbb{R}^n$ epätyhjä ja avoin joukko. Tarkastellaan yhtälö- ja epäyhtälörajoitteellista minimointitehtävää (20). Olkoon $\mathbf{x}^* \in X$ sallittu ratkaisu ja $I = \{i : g_i(\mathbf{x}^*) = 0\}$ aktiivisten epäyhtälörajoitteiden joukko. Oletetaan, että g_i kaikilla $i \notin I$ ovat jatkuvia pisteessä \mathbf{x}^* . Olkoon funktiot f ja g_i kaikilla $i \in I$ differentioituvia pisteessä \mathbf{x}^* ja funktiot h_i kaikilla $i = 1, \dots, l$ jatkuvasti differentioituvia pisteessä \mathbf{x}^* . Jos \mathbf{x}^* on tehtävän lokaali minimipiste, niin silloin on olemassa sellaiset vakiot u_0, u_i kaikilla $i \in I$ ja v_i kaikilla $i = 1, \dots, l$, että

$$u_0 \nabla f(\mathbf{x}^*) + \sum_{i \in I} u_i \nabla g_i(\mathbf{x}^*) + \sum_{i=1}^l v_i \nabla h_i(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$$

$$u_0, u_i \geq 0 \quad i \in I$$

$$(u_0, \mathbf{u}_I, \mathbf{v}) \neq (0, \mathbf{0}, \mathbf{0}),$$

missä \mathbf{u}_I ja \mathbf{v} ovat vektoreita, joiden komponentteina ovat vakiot u_0, u_i kaikilla $i \in I$ ja v_i kaikilla $i = 1, \dots, l$.

Jos myös rajoitefunktio $g_i, i \notin I$ ovat differentioituvia pisteessä \mathbf{x}^* , voidaan ehdot kirjoittaa muodossa

$$u_0 \nabla f(\mathbf{x}^*) + \sum_{i=1}^m u_i \nabla g_i(\mathbf{x}^*) + \sum_{i=1}^l v_i \nabla h_i(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$$

$$u_i g_i(\mathbf{x}^*) = 0, \quad i = 1, \dots, m$$

$$u_0, u_i \geq 0, \quad i = 1, \dots, m$$

$$(u_0, \mathbf{u}, \mathbf{v}) \neq (0, \mathbf{0}, \mathbf{0}),$$

missä \mathbf{u} on vektori, jonka komponentteina ovat kaikki Lagrangen kertoimet u_i kaikilla $i = 1, \dots, m$, ja \mathbf{v} on vektori, jonka komponentteina ovat kaikki Lagrangen kertoimet v_i kaikilla $i = 1, \dots, l$.

Todistus. Jos jotkin gradientit $\nabla h_i(\mathbf{x}^*)$ ja $\nabla h_j(\mathbf{x}^*)$, $i \neq j$, ovat lineaarisesti toisistaan riippuvia, voidaan valita sellaiset vakiot $v_i, v_j \neq 0$, että $v_i \nabla h_i(\mathbf{x}^*) + v_j \nabla h_j(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$. Asettamalla muut vakiot nolaksi kaikki ehdot täyttyvät.

Jos taas kaikki gradientit $\nabla h_i(\mathbf{x}^*)$ ovat toisistaan riippumattomia, muodostetaan sellainen matriisi \mathbf{A}_1 , että funktioiden f ja $g_i, i \in I$ gradientit ovat matriisin vaakarivit. Olkoon \mathbf{A}_2 toinen matriisi, jonka vaakarivit ovat kaikki funktioiden $h_i, i = 1, \dots, l$, gradientit. Silloin edellisen lauseen 3.11 mukaan lokaalissa optimissa

\mathbf{x}^* ei ole olemassa sellaista suuntaa \mathbf{d} , että $\mathbf{A}_1\mathbf{d} < \mathbf{0}$ ja $\mathbf{A}_2\mathbf{d} = \mathbf{0}$. Tarkastellaan sitten kahta joukkoa

$$S_1 = \{(\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2) : \mathbf{z}_1 = \mathbf{A}_1\mathbf{d}, \mathbf{z}_2 = \mathbf{A}_2\mathbf{d}, \mathbf{d} \in \mathbb{R}^n\}$$

$$S_2 = \{(\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2) : \mathbf{z}_1 < \mathbf{0}, \mathbf{z}_2 = \mathbf{0}\}.$$

Silloin S_1 ja S_2 ovat konvekseja epätyhjiä joukkoja ja $S_1 \cap S_2 = \emptyset$. Nyt lauseen 2.24 mukaan on olemassa sellainen vektori $\mathbf{p}^\top = (\mathbf{p}_1^\top, \mathbf{p}_2^\top) \neq \mathbf{0}$, että

$$\sup\{\mathbf{p}^\top(\mathbf{A}_1\mathbf{d}, \mathbf{A}_2\mathbf{d}) : (\mathbf{A}_1\mathbf{d}, \mathbf{A}_2\mathbf{d}) \in S_1\} \leq \inf\{\mathbf{p}^\top(\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2) : (\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2) \in S_2\}, \text{ eli}$$

$$\mathbf{p}_1^\top\mathbf{A}_1\mathbf{d} + \mathbf{p}_2^\top\mathbf{A}_2\mathbf{d} \leq \mathbf{p}_1^\top\mathbf{z}_1 + \mathbf{p}_2^\top\mathbf{z}_2 \text{ kaikilla } (\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2) \in S_2, \mathbf{d} \in \mathbb{R}^n.$$

Koska $\mathbf{z}_2 = \mathbf{0}$ ja $\mathbf{z}_1 < \mathbf{0}$, saadaan

$$\mathbf{p}_1^\top\mathbf{A}_1\mathbf{d} + \mathbf{p}_2^\top\mathbf{A}_2\mathbf{d} \leq \mathbf{p}_1^\top\mathbf{z}_1, \quad \mathbf{z}_1 < \mathbf{0}.$$

Epäyhtälöstä voidaan ratkaista vektorit \mathbf{p}_1 ja \mathbf{p}_2 vain, jos $\mathbf{p}_1^\top\mathbf{z}_1$ ei ole mielivaltaisen pieni. Koska arvoa \mathbf{z}_1 ei ole rajoitettu alhaalta, on siis pakko olla $\mathbf{p}_1^\top \leq \mathbf{0}$. Kuitenkin muuttuja \mathbf{z}_1 voi saada arvoja mielivaltaisen lähellä nollaa, joten

$$(\mathbf{p}_1^\top\mathbf{A}_1 + \mathbf{p}_2^\top\mathbf{A}_2)\mathbf{d} \geq 0.$$

Suunta \mathbf{d} ei siis voi olla kohdefunktiota parantava pisteessä \mathbf{x}^* , mutta valitsemalla suunnaksi $\mathbf{d} = -(\mathbf{A}_1^\top\mathbf{p}_1 + \mathbf{A}_2^\top\mathbf{p}_2)$ saadaan $-||(\mathbf{A}_1^\top\mathbf{p}_1 + \mathbf{A}_2^\top\mathbf{p}_2)||^2 \geq 0$, eli $\mathbf{A}_1^\top\mathbf{p}_1 + \mathbf{A}_2^\top\mathbf{p}_2 = \mathbf{0}$ ja yhtäsuuruus toteutuu. Fritz John -ehdot voidaan nyt toteuttaa valitsemalla vektorin \mathbf{p}_1 komponentit vakioiksi $u_i \geq 0$ ja vektori $\mathbf{v} = \mathbf{p}_2$, koska $(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) \neq (\mathbf{0}, \mathbf{0})$. Epäaktiivisten rajoitteiden kertoimiksi voidaan valita 0 ja lause on todistettu. □

3.5 Karush–Kuhn–Tuckerin ehdot yhtälö- ja epäyhtälörajoitteilla

Jos optimointitehtävän (20) kaikki rajoitteet ovat toisistaan lineaarisesti riippumattomia, niin myös kohdefunktion f Fritz John -ehtojen kertoimelle u_0 on voimassa $u_0 > 0$. Kun tehtävässä on epäyhtälö- ja yhtälörajoitteita, saa Lagrangen funktio muodon

$$L(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{v}) = f(\mathbf{x}) + \sum_{i \in I} u_i g_i(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^m v_i h_i(\mathbf{x}),$$

missä Lagrangen kertoimet ovat vakiot u_i ja v_i . Silloin voidaan esittää seuraavat KKT-ehdot.

Lause 3.13. *Välttämättömät KKT-ehdot:* Olkoon $X \subset \mathbb{R}^n$ epätyhjä ja avoin joukko. Tarkastellaan yhtälö- ja epäyhtälörajoitteellista minimointitehtävää (20). Olkoon $\mathbf{x}^* \in X$ sallittu ratkaisu ja $I = \{i : g_i(\mathbf{x}^*) = 0\}$. Oletetaan, että funktiot f ja g_i kaikilla $i \in I$ ovat differentioituvia pisteessä \mathbf{x}^* , funktiot $g_i, i \notin I$ jatkuvia pisteessä \mathbf{x}^* ja funktiot h_i ovat jatkuvasti differentioituvia kaikilla $i = 1, \dots, l$. Fritz John -ehtojen

lisäksi oletetaan myös, että kaikki rajoitefunktioiden gradientit $\nabla g_i(\mathbf{x}^*), i \in I$ ja $\nabla h_i(\mathbf{x}^*), i = 1, \dots, l$, ovat toisistaan lineaarisesti riippumattomia. Jos silloin piste \mathbf{x}^* on tehtävän lokaali minimipiste, niin on voimassa

$$\nabla f(\mathbf{x}^*) + \sum_{i \in I} u_i \nabla g_i(\mathbf{x}^*) + \sum_{i=1}^l v_i \nabla h_i(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$$

$$u_i \geq 0 \quad i \in I,$$

eli Lagrangen funktion gradientti saa arvon $\mathbf{0}$ ja muuttujat u_i ja v_i ovat Lagrangen kertoimia. Jos lisäksi $g_i, i \notin I$ ovat differentioituvia pisteessä \mathbf{x}^* , niin ehdot voidaan kirjoittaa muodossa

$$\nabla f(\mathbf{x}^*) + \sum_{i=1}^m u_i \nabla g_i(\mathbf{x}^*) + \sum_{i=1}^l v_i \nabla h_i(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$$

$$u_i g_i(\mathbf{x}^*) = 0, \quad i = 1, \dots, m$$

$$u_i \geq 0, \quad i = 1, \dots, m.$$

Todistus. Koska gradienttivektorit $\nabla g_i(\mathbf{x}^*)$ kaikilla $i \in I$ ja $\nabla h_i(\mathbf{x}^*)$ kaikilla $i = 1, \dots, l$ ovat toisistaan lineaarisesti riippumattomia, niin Fritz John -ehtojen (20) mukaan $u_0 > 0$. Jakamalla kaikki ratkaisun vakiot u_0, u_i^* ja v_i^* vakiolla u_0 saadaan uudet edelleen tehtävän ratkaisevat vakiot $1, u_i$ ja v_i . □

Lause 3.14. Riittävät KKT-ehdot: Olkoon $X \subset \mathbb{R}^n$ epätyhjä ja avoin joukko. Tar kastellaan yhtälö- ja epäyhtälörajoitteellista minimointitehtävää (20). Olkoon $\mathbf{x}^* \in X$ sallittu ratkaisu, $I = \{i : g_i(\mathbf{x}^*) = 0\}$ ja tehtävän KKT-ehdot voimassa pisteessä \mathbf{x}^* . Jos pisteessä \mathbf{x}^* kohdefunktio f on pseudokonvekksi, epäyhtälörajoitteet $g_i, i \in I$, ovat kvasikonvekseja, yhtälörajoitteet $J = \{i : v_i > 0\}$, kun $\nabla h_i(\mathbf{x}^*)^\top \mathbf{d} \leq 0$, ovat kvasikonvekseja sekä yhtälörajoitteet $K = \{i : v_i < 0\}$, kun $\nabla h_i(\mathbf{x}^*)^\top \mathbf{d} \geq 0$, ovat kvasikonkaaveja, niin \mathbf{x}^* on tehtävän globaali minimipiste.

Todistus. Olkoon \mathbf{x}^* sallittu piste. Koska funktiot $g_i, i \in I$, ovat kvasikonvekseja pisteessä \mathbf{x}^* ja $g_i(\mathbf{x}) \leq g_i(\mathbf{x}^*) = 0, i \in I$, niin lauseen 2.8 seurauksena

$$\nabla g_i(\mathbf{x}^*)^\top \mathbf{d} \leq 0 \quad \text{kaikilla } i \in I.$$

Myös $h_i(\mathbf{x}) = h_i(\mathbf{x}^*) = 0$, ja h_i voidaan kvasikonveksisuuden ja -konkaavisuuden seurauksena jakaa kahteen joukkoon J ja K . Laskemalla nyt kaikki gradienttifunktiot kertoimineen yhteen saadaan

$$\left[\sum_{i \in I} u_i \nabla g_i(\mathbf{x}^*) + \sum_{i \in J \cup K} v_i \nabla h_i(\mathbf{x}^*) \right]^\top \mathbf{d} \leq 0. \quad (24)$$

Määritelmän seurauksena $v_i = 0$, kun $i \notin J \cap K$, joten kertomalla alkuperäisen minimointitehtävän KKT-ehdot suunnalla \mathbf{d} saadaan

$$\nabla f(\mathbf{x}^*)^\top \mathbf{d} + \left[\sum_{i \in I} u_i \nabla g_i(\mathbf{x}^*) + \sum_{i \in J \cup K} v_i \nabla h_i(\mathbf{x}^*) \right]^\top \mathbf{d} = 0$$

ja epäyhtälön (24) seurauksena

$$\nabla f(\mathbf{x}^*)^\top \mathbf{d} \geq 0.$$

Silloin pisteessä \mathbf{x}^* suunta \mathbf{d} on aina kohdefunktion arvoa kasvattava ja pseudokonveksisuuden nojalla aina $f(\mathbf{x}) \geq f(\mathbf{x}^*)$, joten \mathbf{x}^* on globaali minimipiste. □

4 Toistettu kvadraattinen optimointi

Toistettu kvadraattinen optimointi (*Sequential Quadratic Programming*) eli SQP - algoritmi on parantavien sallittujen suuntien menetelmä, joka selvittää peräkkäisten tarkentuvien approksimaatioiden avulla optimointitehtävän KKT-pisteen, joka usein on myös tehtävän lokaali minimipiste.

Approksimaatiot parhaasta hakusuunnasta kohti KKT-pistettä perustuvat Newtonin menetelmään. Newtonin menetelmässä pitäisi kuitenkin ratkaista Hessen käänteismatriisi, jonka laskeminen on usein raskas tai mahdoton operaatio. Usein on helpompaa tyytyä pelkkään arvioon Newtonin menetelmän tuottamasta hakusuunnasta. Silloin käänteismatriisin ratkaisemisen sijaan arvio parantavasta suunnasta \mathbf{d} voidaan ratkaista kvadraattisesta minimointitehtävästä. Suuntaa ratkaistaessa kohdefunktio korvataan konveksilla funktiolla, joka on arvio alkuperäisestä kohdefunktiosta. Myös rajoitteista muodostetaan lineaaristen approksimaatioiden seurauksena konvekssi joukko. Silloin sallitut ratkaisut muodostavat konveksin joukon, joten suunta-arvion \mathbf{d} ratkaiseminen helpottuu merkittävästi. Kuten kaikissa optimointitehtävissä, kannattaa tehtävää yksinkertaistaa mahdollisuuksien mukaan jo ennen ratkaisemisen yrittämistä. Keinoja siihen ovat muun muassa muuttujien eliminointi ja tarpeettomien rajoitefunktioiden poistaminen.

4.1 Kvadraattinen optimointitehtävä

Tarkastellaan kvadraattista minimointitehtävää lineaarisilla rajoitteilla

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \quad & f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^\top \mathbf{Q} \mathbf{x} - \mathbf{x}^\top \mathbf{b} \\ \text{s.t.} \quad & \mathbf{A}_1 \mathbf{x} = 0 \\ & \mathbf{A}_2 \mathbf{x} \leq 0, \end{aligned}$$

missä \mathbf{Q} on $\mathbb{R}^{n \times n}$ matriisi, \mathbf{A}_1 on $\mathbb{R}^{m \times n}$ matriisi ja \mathbf{A}_2 on $\mathbb{R}^{l \times n}$ matriisi sekä $\mathbf{x}, \mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$. Kvadraattinen minimointitehtävä voidaan ratkaista esimerkiksi KKT-ehtojen avulla. Koska lineaariset yhtälö- ja epäyhtälörajoitteet ovat konvekseja, on sallittujen pisteiden joukko konvekssi. Jos lisäksi matriisi \mathbf{Q} on positiividefiniitti, on kohdefunktio konvekssi, jolloin minimointitehtävän KKT-piste on tehtävän lokaali ja globaali minimipiste.

4.2 Rajoitteiden eliminointi

Mahdollisuuksien mukaan ratkaistavaa tehtävää kannattaa yksinkertaistaa eliminoimalla ylimääräisiä muuttujia. Silloin on tärkeää tarkistaa, ettei eliminointi muuta alkuperäisen tehtävän rakennetta ja ratkaisua.

Esimerkki 4.1. Tarkastellaan tehtävää

$$\begin{aligned} \min_{x, y \in \mathbb{R}} \quad & f(x, y) = 1 + y^2 \\ \text{s.t.} \quad & y^2 = x, \end{aligned}$$

jossa on epälineaarinen rajoite. Sijoittamalla pelkästään rajoitteen yhtälö kohdefunktion saataisiin tehtävä muotoon

$$\min_{x \in \mathbb{R}} f(x) = 1 + x,$$

jonka ratkaisu olisi virheellisesti $-\infty$. Ottamalla kuitenkin huomioon, että eliminoitu toisen asteen yhtälö sisältää myös rajoitteen $y^2 > 0$, tarvitaan uudessa tehtävässä lisärajoite $x \geq 0$. Silloin ratkaisuksi saadaan $f(0) = 1$. [11]

Lineaarisisessa tehtävässä ei vastaavaa vaaraa ole. Tehtävästä

$$\begin{aligned} \min_{x, y \in \mathbb{R}} f(x, y) &= 1 + y \\ \text{s.t.} \quad y &= x - 1 \end{aligned}$$

voidaan ratkaisua muuttamatta eliminoida muuttuja y , jolloin tehtävä saa muodon

$$\min_{x \in \mathbb{R}} f(x) = x.$$

4.3 Newtonin menetelmä

Yksi käytetyimmistä tavoista yhtälöiden ratkaisemiseen numeerisesti on erilaiset variaatiot Newtonin menetelmästä. Reaalilukumuuttujien yhtälöryhmä voidaan esittää $\mathbf{f} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ -kuvauksena

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$$

siirtämällä kaikkien yhtälöiden termit yhtälöryhmän vasemmalle puolelle. Kun yhtälöitä ja ratkaistavia vektorin $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ komponentteja on yhtä monta, voidaan valita sattumanvarainen lähtöpiste \mathbf{x}_0 ja ratkaista toistuvasti seuraava approksimaatio \mathbf{x}_{k+1} yhtälöstä

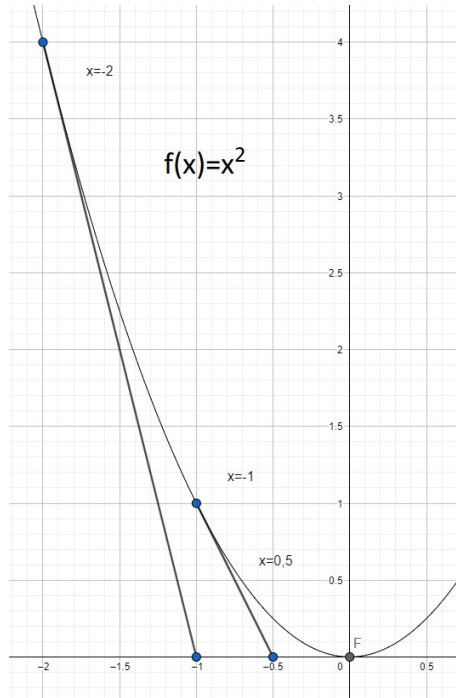
$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \mathbf{f}(\mathbf{x}_k)\mathbf{J}(\mathbf{x}_k)^{-1}, \quad (25)$$

mikäli $\mathbf{J}(\mathbf{x}_k)$ on funktion \mathbf{f} positiividefiniitti Jacobin matriisi. Silloin lauseen 2.18 mukaan matriisi on myös kääntyvä, ja seuraava iteraatiopiste voidaan ratkaista. Tällöin saadaan iteraatiopistejono, joka suppenee kohti yhtälöryhmän $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ ratkaisua, jos funktio \mathbf{f} on differentioituva ja lähtöpiste on riittävän lähellä funktion nollakohtaa. Silloin gradienttiin perustuva arvio iteraatiopisteestä \mathbf{x}_{k+1} lähestyy funktion \mathbf{f} nollakohtaa \mathbf{x}^* joka askeleella. Lähtöpiste \mathbf{x}_0 tulisikin valita mahdollisimman läheltä oletettua ratkaisua, jotta funktion käyttäytyminen kaukana ratkaisupisteestä ei harhauttaisi algoritmia kauemmas todellisesta ratkaisusta. [1]

Esimerkki 4.2. Etsitään funktion $f(x) = x^2$ nollakohta käyttäen Newtonin menetelmää. Valitaan lähtöpisteeksi $x_0 = -2$. Suoraan kaavasta (25) saadaan seuraava iteraatiopiste

$$x_1 = -2 - (-2)^2 \cdot \frac{1}{2 \cdot (-2)} = -1$$

ja lähestytään yhtälön $f(x) = 0$ ratkaisua x^* . Kuvassa 1 havainnollistetaan kaksi ensimmäistä askelta, joissa $x_1 = -1$ ja $x_2 = -\frac{1}{2}$.



Kuva 1: Newtonin menetelmän kaksi ensimmäistä askelta lähtöpisteestä $x_0 = -2$.

4.4 Yhtälörajoitteet lineaarisella approksimaatiolla

Muodostetaan Newtonin menetelmällä approksimaatio välttämättömät KKT-ehdot 3.13 täyttävästä pisteestä minimointitehtävässä, jossa on pelkkiä yhtälörajoitteita. Oletetaan ensin, että rajoiteyhtälöt ovat kaikki kahdesti jatkuvasti differentioituvia. Newtonin menetelmän tuottaman approksimaation käyttö suunnanmääritykseen mahdollistaa suunnan \mathbf{d} määrittämisen lineaaristen yhtälörajoitteiden ja kvadraattisen kohdefunktion avulla.

Ratkaistava tehtävä on muotoa

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \quad & f(\mathbf{x}) \\ \text{s.t.} \quad & h_i(\mathbf{x}) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, l. \end{aligned} \tag{26}$$

Välttämättömät KKT-ehdot 3.13 kyseiselle tehtävälle ovat

$$\begin{aligned} \nabla L(\mathbf{x}, \mathbf{v}) &= \nabla f(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^l v_i \nabla h_i(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \\ h_i(\mathbf{x}) &= 0, \quad i = 1, \dots, l. \end{aligned}$$

Näin ollen ratkaistavana on yhtälöryhmä, jossa on l kappaletta tuntemattomia muuttujia v_i ja n kappaletta vektorin \mathbf{x} komponentteja x_j . Vastaavasti yhtälöitä on myös $l + n$ kappaletta eli yhtälörajoitteet sekä Lagrangen funktio derivoituna jokaisen vektorin \mathbf{x} komponentin suhteen. Merkitään sitten yhtälöryhmää lyhyemmin

$$\mathbf{W}(\mathbf{x}, \mathbf{v}) = \mathbf{0},$$

jossa \mathbf{W} on vektori, jonka komponentteina ovat funktiot $\nabla L(\mathbf{x}, \mathbf{v})$ ja $\mathbf{h}(\mathbf{x})$, missä vektorin $\mathbf{h}(\mathbf{x})$ komponentteina on rajoitefunktio $h_i(\mathbf{x})$ kaikilla $i = 1, \dots, l$. Yhtälöryhmä ratkaistaan käyttäen iteratiivisesti Newtonin menetelmää. Newtonin askeleen yhtälö (25) voidaan myös esittää muodossa

$$f(\mathbf{x}_n) + \nabla f(\mathbf{x}_n)^\top (\mathbf{x}_{n+1} - \mathbf{x}_n) = 0.$$

Tehtävän (26) KKT-piste voidaan nyt ratkaista etsimällä funktion \mathbf{W} nollakoh-
ta käyttäen toistuvasti Newtonin menetelmää. Valitaan lähtöarvoiksi sallitut \mathbf{x}_0 ja \mathbf{v}_0 . Kun käytetään Newtonin menetelmää yhtälöryhmään $\mathbf{W}(\mathbf{x}, \mathbf{v}) = \mathbf{0}$, saadaan askeleessa k suunnan $\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k$ approksimaatioksi

$$\mathbf{W}(\mathbf{x}_k, \mathbf{v}_k) + \nabla \mathbf{W}(\mathbf{x}_k, \mathbf{v}_k) \begin{bmatrix} \mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k \\ \mathbf{v}_{k+1} - \mathbf{v}_k \end{bmatrix} = \mathbf{0}. \quad (27)$$

Tällöin gradientti $\nabla \mathbf{W}(\mathbf{x}_k, \mathbf{v}_k)$ on Jacobin matriisi vektoriarvoiselle funktiolle \mathbf{W} .
Voidaan siis kirjoittaa

$$\nabla \mathbf{W}(\mathbf{x}_k, \mathbf{v}_k) = \begin{bmatrix} \nabla^2 L(\mathbf{x}_k, \mathbf{v}_k) & \nabla \mathbf{h}(\mathbf{x}_k)^\top \\ \nabla \mathbf{h}(\mathbf{x}_k)^\top & \mathbf{0} \end{bmatrix}, \quad (28)$$

jossa ylemmän rivin funktio

$$\nabla^2 L(\mathbf{x}_k, \mathbf{v}_k) = \nabla^2 f(\mathbf{x}_k) + \sum_{i=1}^l v_{ki} \nabla^2 h_i(\mathbf{x}_k)$$

on $\nabla L(\mathbf{x}_k, \mathbf{v}_k)$ derivoituna vektorin \mathbf{x} komponenttien suhteen. Lisäksi ylärivin toinen komponentti $\nabla \mathbf{h}(\mathbf{x}_k)^\top$ on $\nabla L(\mathbf{x}_k, \mathbf{v}_k)$ derivoituna vektorin \mathbf{v} komponenttien suhteen. Alarivillä on tehty vastaava derivointioperaatio funktioille $h_i(\mathbf{x})$.

Kun matriisi (28) sijoitetaan yhtälöön (27) ja vähennetään yhtälön molemmilta puolilta $\mathbf{W}(\mathbf{x}_k, \mathbf{v}_k)$, saadaan yhtälöryhmä

$$\begin{aligned} \nabla^2 L(\mathbf{x}_k, \mathbf{v}_k)(\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k) + \nabla \mathbf{h}(\mathbf{x}_k)^\top (\mathbf{v}_{k+1} - \mathbf{v}_k) &= -\nabla f(\mathbf{x}_k) - \nabla \mathbf{h}(\mathbf{x}_k)^\top \mathbf{v}_k \\ \nabla \mathbf{h}(\mathbf{x}_k)(\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k) &= -\mathbf{h}(\mathbf{x}_k). \end{aligned}$$

Merkitimällä askelta $(\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k)$ muuttujalla \mathbf{d}_k saadaan yhtälöryhmä sievenemään muotoon

$$\begin{aligned} \nabla^2 L(\mathbf{x}_k, \mathbf{v}_k) \mathbf{d}_k + \nabla \mathbf{h}(\mathbf{x}_k)^\top \mathbf{v}_{k+1} &= -\nabla f(\mathbf{x}_k) \\ \nabla \mathbf{h}(\mathbf{x}_k) \mathbf{d}_k &= -\mathbf{h}(\mathbf{x}_k). \end{aligned} \quad (29)$$

Näin on päädytty lineaariseen yhtälöryhmään, josta voidaan nyt ratkaista muuttujat \mathbf{d}_k ja \mathbf{v}_{k+1} . Tämän jälkeen päivitetään iteraatiopisteeksi $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \mathbf{d}_k$ ja siirrytään seuraavalle kierrokselle eli $k = k + 1$. Iteraatioita toistetaan, kunnes $\mathbf{d}_k = \mathbf{0}$. Kun $\mathbf{d}_k = \mathbf{0}$, seuraa yhtälöryhmästä

$$\mathbf{W}(\mathbf{x}_k, \mathbf{v}_k) + \nabla \mathbf{W}(\mathbf{x}_k, \mathbf{v}_k) \mathbf{d}_k = \mathbf{0},$$

että myös $\mathbf{W}(\mathbf{x}_k, \mathbf{v}_k) = \mathbf{0}$, joten ollaan löydetty välttämättömät KKT-ehdot täyttävä piste. Jos myös riittävät KKT-ehdot 3.14 ovat voimassa, ollaan löydetty globaali minimipiste.

4.5 Lineaarisen approksimaation ratkaiseminen minimointitehtävän avulla

Huomataan ensin, esimerkiksi derivointia hyväksi käyttäen, että lineaarisen yhtälöryhmän

$$\mathbf{Ax} - \mathbf{b} = \mathbf{0}$$

ratkaisu voidaan esittää myös minimointitehtävän

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^\top \mathbf{Ax} - \mathbf{b}^\top \mathbf{x} + \mathbf{c}$$

ratkaisuna, jos matriisi \mathbf{A} on positiividefiniitti $\mathbb{R}^{n \times n}$ -matriisi ja vektorit \mathbf{x} , \mathbf{b} , $\mathbf{c} \in \mathbb{R}^n$.

Lineaarisen yhtälöryhmän (29) ratkaisu kertoo suunnan \mathbf{d}_k approksimaation seuraavalle iteraatiopisteelle. Tarkastelemalla kvadraattista yhtälörajoitteellista minimointitehtävää

$$\begin{aligned} \text{QP}(\mathbf{x}_k, \mathbf{v}_k) : \min_{\mathbf{d}_k \in \mathbb{R}^n} \quad & \nabla f(\mathbf{x}_k)^\top \mathbf{d}_k + \frac{1}{2} \mathbf{d}_k^\top \nabla^2 L(\mathbf{x}_k, \mathbf{v}_k) \mathbf{d}_k \\ \text{s.t.} \quad & h_i(\mathbf{x}_k) + \nabla h_i(\mathbf{x}_k)^\top \mathbf{d}_k = 0, \quad i = 1, \dots, l \end{aligned} \quad (30)$$

huomataan, että tehtävän (30) KKT-piste saadaan yhtälöryhmän (29) ratkaisuna. Toisin sanoen yhtälöryhmän (29) ja minimointitehtävän (30) välttämättömät KKT-ehdot 3.13 toteuttaa täsmälleen sama ratkaisu \mathbf{d}_k . Silloin minimointitehtävän (26) approksimaatio minimipisteestä voidaan yhtälöryhmän (29) toistuvan ratkaisemisen sijaan vaihtoehtoisesti ratkaista iteroimalla alitehtävää (30).

Koska tiedetään, että

$$\mathbf{h}(\mathbf{x}_k) + \nabla \mathbf{h}(\mathbf{x}_k)^\top \mathbf{d}_k = \mathbf{0}, \quad (31)$$

voidaan yhtälön (31) molemmat puolet kertoa vektorilla \mathbf{v}_k ja edelleen lisätä tehtävän (30) kohdefunktioon. Silloin saadaan

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}_k) + \mathbf{v}_k \mathbf{h}(\mathbf{x}_k) + \nabla f(\mathbf{x}_k)^\top \mathbf{d}_k + \nabla \mathbf{v}_k \mathbf{h}(\mathbf{x}_k)^\top \mathbf{d}_k + \frac{1}{2} \mathbf{d}_k^\top \nabla^2 L(\mathbf{x}_k, \mathbf{v}_k) \mathbf{d}_k \\ = L(\mathbf{x}_k, \mathbf{v}_k) + \nabla L(\mathbf{x}_k, \mathbf{v}_k)^\top \mathbf{d}_k + \frac{1}{2} \mathbf{d}_k^\top \nabla^2 L(\mathbf{x}_k, \mathbf{v}_k) \mathbf{d}_k. \end{aligned}$$

Huomataan, että tehtävässä (30) minimoidaan itse asiassa Lagrangen funktion Taylorin sarjan kolmea ensimmäistä termiä.

Yhtälörajoitteellista minimointitehtävää, joka on muotoa (26), voidaan yrittää ratkaista käyttämällä seuraavaa yksinkertaista SQP algoritmia. Aloituspisteeksi tulee valita jokin mielivaltainen ratkaisu $(\mathbf{x}_0, \mathbf{v}_0)$, joka on sallittu piste sekä primaali-että duaalitehtävässä.

Algoritmi 4.1. (SQP yhtälörajoitteilla)

1. Asetetaan laskuri $k = 0$ ja valitaan lähtöpisteeksi sallittu primaali-duaaliratkaisu $(\mathbf{x}_0, \mathbf{v}_0)$.
2. Ratkaistaan alitehtävästä (30) muuttujat \mathbf{d}_k ja \mathbf{v}_{k+1} . Päivitetään $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \mathbf{d}_k$ ja $k = k + 1$.
3. Jos $\mathbf{d}_k = \mathbf{0}$, ollaan löydetty KKT-piste ja alkuperäisen tehtävän (26) lokaali minimipiste. Muuten palataan kohtaan 2.

4.6 Epäyhtälörajoitteet

Tarkastellaan sekä yhtälö- että epäyhtälörajoitteita sisältävää minimointitehtävää

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \quad & f(\mathbf{x}) \\ \text{s.t.} \quad & g_i(\mathbf{x}) \leq 0, \quad i = 1, \dots, m \\ & h_i(\mathbf{x}) = 0, \quad i = 1, \dots, l. \end{aligned} \quad (32)$$

KKT-pistettä kohti vievän seuraavan iteraatiopisteen löytämiseksi voidaan yhtälörajoitteellista minimointitehtävää (30) laajentaa myös epäyhtälörajoitteilla ja saadaan aliongelma

$$\begin{aligned} \text{QP}(\mathbf{x}_k, \mathbf{v}_k, \mathbf{u}_k) : \min_{\mathbf{d}_k \in \mathbb{R}^n} \quad & f(\mathbf{x}_k) + \nabla f(\mathbf{x}_k)^\top \mathbf{d}_k + \frac{1}{2} \mathbf{d}_k^\top \nabla^2 L(\mathbf{x}_k, \mathbf{u}_k, \mathbf{v}_k) \mathbf{d}_k \\ \text{s.t.} \quad & h_i(\mathbf{x}_k) + \nabla h_i(\mathbf{x}_k)^\top \mathbf{d}_k = 0, \quad i = 1, \dots, l \\ & g_i(\mathbf{x}_k) + \nabla g_i(\mathbf{x}_k)^\top \mathbf{d}_k \leq 0, \quad i = 1, \dots, m, \end{aligned} \quad (33)$$

jossa

$$\nabla^2 L(\mathbf{x}_k, \mathbf{u}_k, \mathbf{v}_k) = \nabla^2 f(\mathbf{x}_k) + \sum_{i=1}^l v_{ki} \nabla^2 h_i(\mathbf{x}_k) + \sum_{i=1}^m u_{ki} \nabla^2 g_i(\mathbf{x}_k).$$

Ratkaistaan tämän ongelman KKT-pisteitä, kunnes $\mathbf{d}_k = \mathbf{0}$. Epäyhtälörajoitteiden lisäämisestä huolimatta huomataan jälleen, että jos jossain kohtaa $\mathbf{d}_k = \mathbf{0}$, niin Newtonin menetelmällä ei ole enää olemassa parantavaa suuntaa \mathbf{d}_k ja ollaan löydetty tehtävän (32) välttämättömät KKT-ehdot 3.13 täyttävä piste. Jos piste \mathbf{x}_k täyttää myös riittävät KKT-ehdot 3.14, on piste globaali minimipiste.

4.7 Sakkofunktio

Kun kvadraattisesta tehtävästä on ratkaistu parantava suunta \mathbf{d}_k , voidaan ratkaista suurin sallittu positiivinen askelpituus $\lambda \in \mathbb{R}$ parantavaan suuntaan \mathbf{d}_k , jonka avulla saadaan $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \lambda \mathbf{d}_k$. Tämä johtaa yhden muuttujan minimointitehtävään

$$\begin{aligned} \min_{\lambda > 0} \quad & f(\mathbf{x}_k + \lambda \mathbf{d}_k) \\ \text{s.t.} \quad & g_j(\mathbf{x}_k + \lambda \mathbf{d}_k) \leq 0, \quad j = 1, \dots, m \\ & h_i(\mathbf{x}_k + \lambda \mathbf{d}_k) = 0, \quad i = 1, \dots, l. \end{aligned}$$

Minimointitehtävän rajoitteista voidaan päästä eroon lisäämällä rajoitteet itse kohdefunktioon sakkofunktion (*Merit function*) avulla, jossa askelpituuden λ kasvaessa funktion f arvo pienenee, kunnes rajoitteita aletaan rikkomaan. Yksi yksinkertaisimmista sakkofunktioista on l_1 -sakkofunktio $F_E(\mathbf{x})$, missä

$$F_E(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}) + \mu \left[\sum_{j=1}^m \max\{0, g_j(\mathbf{x})\} + \sum_{j=1}^l |h_j(\mathbf{x})| \right]. \quad (34)$$

Jotta sakkokerroin $\mu > 0$ rokottaisi riittävästi rajoitteiden rikkomisesta, tulee vakion μ olla riittävän suuri. Sakkokerrointa kasvatetaan jokaisen iteraation jälkeen

riittävästi, jotta minimoitavan sakkofunktion ratkaisu ei enää merkittävästi riippuisi sakkokertoimen korottamisesta. SQP-algoritmia käytettäessä hyvä aloitusarvo sakkokertoimelle μ on arvio suurimmasta Lagrangen kertoimesta $u_i, |v_i|$. [12] [10]

Sakkofunktio $F_E(\mathbf{x})$ ei kuitenkaan ole määritelmästä johtuen derivoituva, joten minimipisteen löytäminen ei onnistu derivaattoja käyttäen. Yhden muuttujan λ tapauksessa viivahaun menetelmät, esimerkiksi tasavälihaku ja kultaisen leikkauksen menetelmä toimivat hyvin.

Seuraavassa algoritmissa käytetään l_1 -sakkofunktiota maksimoimaan askelpituus parantavaan suuntaan \mathbf{d}_k , kun ratkaistaan epäyhtälö- ja yhtälörajoitteellista tehtävää (32).

Algoritmi 4.2. (MSQP eli SQP-algoritmi käyttäen l_1 -sakkofunktiota)

1. Asetetaan laskuri $k = 0$ ja valitaan lähtöpisteeksi sallittu primaali-duaaliratkaisu $(\mathbf{x}_0, \mathbf{v}_0, \mathbf{u}_0)$.
2. Muodostetaan approksimaatio KKT-pisteestä Newtonin menetelmän avulla eli ratkaistaan minimointialitehtävää (33) käyttäen suunta \mathbf{d}_k sekä Lagrangen kertoimet \mathbf{u}_{k+1} ja \mathbf{v}_{k+1} . Usein on hyödyllistä vain arvioida Hessen matriisia $\nabla^2 L(\mathbf{x}_k, \mathbf{u}_k, \mathbf{v}_k)$ jollakin positiividefiniitillä matriisilla \mathbf{B}_k minimointitehtävän ratkaisemisen helpottamiseksi.
3. Ratkaistaan l_1 -sakkofunktion (34) avulla suurin sallittu askelpituus λ parantavaan suuntaan \mathbf{d}_k ja päivitetään $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \lambda \mathbf{d}_k$.
4. Jos $\mathbf{d}_k = \mathbf{0}$, ollaan löydetty KKT-piste, ja algoritmin suoritus päättyy. Muuten päivitetään $k = k + 1$ ja palataan kohtaan 2.

Esimerkki 4.3. Tarkastellaan Bazaraan kirjan [3] epäyhtälörajoitteellista esimerkkitehtävää MSQP-algoritmin konvergenssista käyttäen Lagrangen funktion Hessen matriisia $\nabla^2 L(\mathbf{x}, \mathbf{u})$, sekä vaihtoehtoisesti arviona pelkkää identiteettimatriisia \mathbf{I} Hessen matriisiin $\nabla^2 L(\mathbf{x}, \mathbf{u})$ tilalla. Olkoon tehtävä

$$\begin{aligned} \min_{x_1, x_2 \in \mathbb{R}} \quad & 2x_1^2 + 2x_2^2 - 2x_1x_2 - 4x_1 - 6x_2 \\ \text{s.t} \quad & g_1 : 2x_1^2 - x_2 \leq 0 \\ & g_2 : x_1 + 5x_2 - 5 \leq 0 \\ & g_3 : x_1 \leq 0 \\ & g_4 : g - x_2 \leq 0. \end{aligned}$$

Valitaan lähtöpisteeksi sallittu piste $\mathbf{x}_0 = (0, 1)^\top$ ja $\mathbf{u}_0 = (0, 0, 0, 0)^\top$. Muodostetaan Newtonin approksimaatiota varten KKT-ehtojen mukainen suunnanvalintatehtävä QP($\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0$) (33), eli

$$\begin{aligned} \text{QP}(\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0) : \min_{\mathbf{d}_0 \in \mathbb{R}} \quad & (-6, -2)\mathbf{d}_0 + \frac{1}{2}\mathbf{d}_0^\top \nabla^2 L(\mathbf{x}_0)\mathbf{d}_0 \\ \text{s.t.} \quad & g_1 : -1 + (0, -1)\mathbf{d}_0 \leq 0 \\ & g_2 : (1, 5)\mathbf{d}_0 \leq 0 \\ & g_3 : (-1, 0)\mathbf{d}_0 \leq 0 \\ & g_4 : -1 + (0, -1)\mathbf{d}_0 \leq 0, \end{aligned} \tag{35}$$

missä

$$\nabla^2 L(\mathbf{x}_0) = \begin{pmatrix} 4 & -2 \\ -2 & 4 \end{pmatrix}.$$

Ratkaistaan saatu minimointitehtävä QP($\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0$) KKT-ehtojen avulla. Yhtälöryhmästä saadaan monta ratkaisuvaihtoehtoa ja niistä pienin ratkaisu minimointitehtävälle saadaan, kun muuttujat $u_1, u_3, u_4 = 0$. Vain rajoite g_2 on silloin aktiivinen, eli $u_2 > 0$ ja minimointitehtävän QP($\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0$) ratkaisu saadaan yhtälöryhmästä

$$\begin{aligned} -6 + (4, -2)\mathbf{d}_0 + u_2 &= 0 \\ -2 + (-2, 4)\mathbf{d}_0 + 5u_2 &= 0 \\ (1, 5)\mathbf{d}_0 &= 0. \end{aligned}$$

Ratkaisuksi saadaan silloin parantava suunta $\mathbf{d}_0 = (35/31, -7/31)^\top$ ja $\mathbf{u}_1 = (0, 1.03225806, 0, 0)$. Käyttämällä l_1 -sakkofunktiota F_E (34) ja sakkokerrointa $\mu = 10 > u_2$ ratkaistaan askeleen maksimipituus suuntaan \mathbf{d}_0 , eli ratkaistaan tehtävä

$$\begin{aligned} \min_{\lambda} F_E(\mathbf{x}_0 + \lambda\mathbf{d}_0) &= f(\mathbf{x}_0 + \lambda\mathbf{d}_0) + \mu \left[\sum_{j=1}^4 \max\{0, g_j(\mathbf{x}_0 + \lambda\mathbf{d}_0)\} \right] \\ &= 3.16129\lambda^2 - 6.32258\lambda - 4 \\ &\quad + 10 \cdot \max[0, 2.5494277\lambda^2 + 0.22580645\lambda - 1] \\ &\quad + 10 \cdot \max[0, 0] \\ &\quad + 10 \cdot \max[0, -1.1290323\lambda] \\ &\quad + 10 \cdot \max[0, -1 + 0.22580645\lambda]. \end{aligned}$$

Viivahaulla saadaan minimipisteeksi $\lambda = 0.583572$ ja

$$\mathbf{x}_1 = \mathbf{x}_0 + \lambda\mathbf{d}_0 = (0.6588716, 0.8682256),$$

joka on alkuperäisen tehtävän globaali minimiratkaisu.

Jos Hessen matriisiin $\nabla^2 L(\mathbf{x}_k, \mathbf{u}_k)$ sijaan käytetään vain matriisiarviota \mathbf{B}_k , suunta \mathbf{d}_k ei välttämättä saavuta tehtävän KKT-pistettä yhtä nopeasti. Ratkaistaan tehtävä QP($\mathbf{x}_0, \mathbf{u}_0$) (35) myös yksinkertaisemmalla arvioilla $\mathbf{B} = \mathbf{I}$. Aktiivisen rajoitteen $(1, 5)\mathbf{d}_0 = 0$ seurauksena sallittu suunta \mathbf{d}_0 on vakiokerrointa lukuunottamatta täysin riippumaton kohdefunktiosta ja matriisista \mathbf{B} . Matriisilla $\mathbf{B} = \mathbf{I}$ on siis pisteessä $(0, 1)^\top$ vaikutusta pelkästään askelpituuteen λ , koska parantava suunta määräytyy aktiivisen lineaarisen rajoitteen mukaan. Täten globaaliin minimiratkaisuun päädytään ensimmäisellä askeleella riippumatta positiividefiniitin matriisin \mathbf{B}_0 valinnasta. Taulukossa 1 on esitetty SQP-algoritmin eteneminen eri matriisiarvoilla.

4.8 BFGS

Tarkastellaan Newtonin askeleen yhtälöryhmätehtävää (27), joka on muotoa $\mathbf{A}\mathbf{d} = \mathbf{b}$ eli $\mathbf{d} = \mathbf{b}\mathbf{A}^{-1}$. Tässä tehtävässä \mathbf{A} on $\mathbb{R}^{n \times n}$ -matriisi ja vektorit $\mathbf{d}, \mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$. Suuremmilla matriiseilla käänteismatriisin laskeminen on raskas operaatio, eikä matriisilla \mathbf{A} välttämättä edes ole käänteismatriisia, esimerkiksi jos matriisin rivit riippuvat lineaarisesti toisistaan.

	$\mathbf{B}_k = \nabla^2 L(\mathbf{x}_k)$	$\mathbf{B}_k = \mathbf{I}$
\mathbf{x}_0	$(0, 1)^\top$	$(0, 1)^\top$
$f(\mathbf{x}_0)$	-4	-4
\mathbf{B}_0	$\begin{pmatrix} 4 & -2 \\ -2 & 4 \end{pmatrix}$	\mathbf{I}
\mathbf{d}_0	$(35/31, -7/31)^\top$	$(140/26, -28/26)^\top$
λ	0.583572	0.122362006
\mathbf{x}_1	$(0.6588716, 0.8682256)$	$(0.6588716, 0.8682256)$
$f(\mathbf{x}_1)$	-6.6130834	-6.6130834

Taulukko 1: SQP-algoritmi arvioina Hessen matriisi ja identiteettimatriisi \mathbf{I} .

Kun SQP-algoritmin suuntavektoria \mathbf{d} ratkaistaan kvadraattisen minimointitehtävän avulla, ei Hessen matriisi välttämättä ole positiividefiniitti, eikä minimointitehtävän ratkaisu \mathbf{d}^* ratkaise yhtälöryhmää $\mathbf{A}\mathbf{d} = \mathbf{b}$. Hessen matriisin laskemiselta vältytään kokonaan ja voidaan selvittää helpommilla laskutoimituksilla käyttämällä mitä tahansa positiividefiniittiä approksimaatiota Hessen matriisista $\nabla^2 L(\mathbf{x}_k)$, esimerkiksi identiteettimatriisia \mathbf{I} . Vaikka silloin ei yhdellä askeleella välttämättä lähestytäkään KKT-pistettä samalla tarkkuudella, kuin mitä on Newtonin menetelmän antama arvio, on suunta \mathbf{d}^* kuitenkin aina kohdefunktiota parantava. Kun sallitusjoukossa edetään riittävän monta askelta kohdefunktiota parantavaan suuntaan ja toistuvasti tarkennetaan approksimaatiota suunnasta kohti minimipistettä, päädytään lopulta alkuperäisen minimointitehtävän lokaaliin minimipisteeseen \mathbf{x}^* .

Sen sijaan, että käytetään koko ajan samaa arviota Hessen matriisista, voidaan algoritmin konvergenssia myös nopeuttaa tarkentamalla approksimaatiota matriisista $\nabla^2 L(\mathbf{x}_k)$ joka askeleen k jälkeen.

Laskennallisesti erityisen tehokkaan konvergenssin kohti Hessen matriisia $\nabla^2 L(\mathbf{x}_k)$ antaa BFGS-algoritmin tuottama matriisi \mathbf{B}_{k+1} . Algoritmi on nimetty sen kehittäjien Broydenin, Fletcherin, Goldfarbin ja Shannon mukaan. Algoritmi tarkentaa arviota \mathbf{B}_k joka askeleella k ja päivitys perustuu pisteen sijainnin ja gradientin muutokseen. Varmistamalla, että approksimaatio on aina positiividefiniitti, eli $\frac{1}{2}\mathbf{d}_k^\top \mathbf{B}_k \mathbf{d}_k > 0$, saadaan vain kohdefunktiota parantavat suunnat myös kvadraattisen suunnanmääritystehtävän sallituiksi optimiratkaisuiksi. Silloin kvadraattisessa minimointitehtävässä

$$\min_{\mathbf{d}_k \in \mathbb{R}^n} f(\mathbf{x}_k) + \nabla f(\mathbf{x}_k)^\top \mathbf{d}_k + \frac{1}{2} \mathbf{d}_k^\top \mathbf{B}_k \mathbf{d}_k$$

suunta $\mathbf{d}_k = \mathbf{0}$ on tehtävän QP($\mathbf{x}_k, \mathbf{v}_k, \mathbf{u}_k$) (33) minimiratkaisu. Jos taas $\mathbf{d}_k \neq \mathbf{0}$, niin $\nabla f(\mathbf{x}_k)^\top \mathbf{d}_k < 0$. Myös rajoitefunktiot ovat konvekseja aputehtävässä, joten lauseen 3.14 riittävien KKT-ehtojen nojalla tehtävän QP($\mathbf{x}_k, \mathbf{v}_k, \mathbf{u}_k$) lokaali minimipiste on myös globaali minimipiste.

Jokaisella kierroksella k BFGS-algoritmia varten lasketaan pisteen muutos

$$\mathbf{s}_k = \mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k$$

sekä gradientin muutos

$$\mathbf{y}_k = \nabla f(\mathbf{x}_{k+1}) - \nabla f(\mathbf{x}_k).$$

BFGS-matriisin päivitys joka askeleen jälkeen on muotoa

$$\mathbf{B}_{k+1} = \mathbf{B}_k - \frac{\mathbf{B}_k \mathbf{s}_k \mathbf{s}_k^\top \mathbf{B}_k}{\mathbf{s}_k^\top \mathbf{B}_k \mathbf{s}_k} + \frac{\mathbf{y}_k \mathbf{y}_k^\top}{\mathbf{y}_k^\top \mathbf{s}_k}. \quad (36)$$

Lause 4.4. Jos matriisi \mathbf{B}_k on symmetrinen ja positiividefiniitti, niin kaavan (36) matriisi \mathbf{B}_{k+1} on myös symmetrinen ja positiividefiniitti.

Todistus. Määritellään matriisin \mathbf{B}_k käänteismatriisi \mathbf{H}_k , jolloin $\mathbf{B}_k = \mathbf{H}_k^{-1}$. Koska matriisi \mathbf{B}_k on symmetrinen ja positiividefiniitti, niin lauseen 2.19 mukaan myös käänteismatriisi \mathbf{H}_k on symmetrinen ja positiividefiniitti. Laskemalla voidaan osoittaa, että $\mathbf{B}_{k+1} \mathbf{H}_{k+1} = \mathbf{I}$, missä

$$\mathbf{H}_{k+1} = \left(\mathbf{I} - \frac{\mathbf{s}_k \mathbf{y}_k^\top}{\mathbf{y}_k^\top \mathbf{s}_k} \right) \mathbf{H}_k \left(\mathbf{I} - \frac{\mathbf{y}_k \mathbf{s}_k^\top}{\mathbf{y}_k^\top \mathbf{s}_k} \right) + \frac{\mathbf{s}_k \mathbf{s}_k^\top}{\mathbf{y}_k^\top \mathbf{s}_k}. \quad (37)$$

Osoitetaan, että symmetrisen matriisin \mathbf{B}_{k+1} käänteismatriisi \mathbf{H}_{k+1} on aina positiividefiniitti, jos \mathbf{H}_k on positiividefiniitti. Kaavan (37) mukaan

$$\mathbf{z}^\top \mathbf{H}_{k+1} \mathbf{z} = \mathbf{z}^\top \left(\mathbf{I} - \frac{\mathbf{s}_k \mathbf{y}_k^\top}{\mathbf{y}_k^\top \mathbf{s}_k} \right) \mathbf{H}_k \left(\mathbf{I} - \frac{\mathbf{y}_k \mathbf{s}_k^\top}{\mathbf{y}_k^\top \mathbf{s}_k} \right) \mathbf{z} + \mathbf{z}^\top \frac{\mathbf{s}_k \mathbf{s}_k^\top}{\mathbf{y}_k^\top \mathbf{s}_k} \mathbf{z}.$$

Nyt huomataan, että vektoreilla on voimassa

$$\mathbf{z}^\top \left(\mathbf{I} - \frac{\mathbf{s}_k \mathbf{y}_k^\top}{\mathbf{y}_k^\top \mathbf{s}_k} \right) = \left[\left(\mathbf{I} - \frac{\mathbf{y}_k \mathbf{s}_k^\top}{\mathbf{y}_k^\top \mathbf{s}_k} \right) \mathbf{z} \right]^\top,$$

ja matriisi \mathbf{H}_k on positiividefiniitti, joten

$$\mathbf{z}^\top \left(\mathbf{I} - \frac{\mathbf{s}_k \mathbf{y}_k^\top}{\mathbf{y}_k^\top \mathbf{s}_k} \right) \mathbf{H}_k \left(\mathbf{I} - \frac{\mathbf{y}_k \mathbf{s}_k^\top}{\mathbf{y}_k^\top \mathbf{s}_k} \right) \mathbf{z} > 0.$$

Lisäksi

$$\mathbf{z}^\top \frac{\mathbf{s}_k \mathbf{s}_k^\top}{\mathbf{y}_k^\top \mathbf{s}_k} \mathbf{z} = \frac{(\mathbf{s}_k^\top \mathbf{z})^2}{\mathbf{y}_k^\top \mathbf{s}_k} > 0,$$

koska aina toisen asteen termillä on voimassa $(\mathbf{s}_k^\top \mathbf{z})^2 > 0$. Myös $\mathbf{y}_k^\top \mathbf{s}_k > 0$, sillä konveksilla funktiolla on lauseen 3.2 mukaan voimassa $\nabla f(\mathbf{x})^\top \mathbf{d} = \mathbf{y}_k^\top (-\mathbf{s}_k) < 0$, kun $\mathbf{d} \neq \mathbf{0}$. Edelleen, koska \mathbf{H}_{k+1} on positiividefiniitti, niin myös sen käänteismatriisi \mathbf{B}_{k+1} on positiividefiniitti. [11]

□

5 Maratos-efekti

Kaarevilla pinnoilla SQP-algoritmin ja sakkofunktion käyttö voivat estää siirtymisen kaikkiin kohdefunktiota parantaviin suuntiin, jos lineaarinen suunta \mathbf{d} poistuu välittömästi sallitulta alueelta liikuttaessa suuntaan \mathbf{d} . Ilmiö hidastaa merkittävästi SQP-algoritmin konvergenssia kohti optimipistettä. Lisäksi kokonaisen askeleen ottaminen löydettyyn suuntaan \mathbf{d} ei välttämättä edes paranna kohdefunktion arvoa. Tällaista tilannetta kutsutaan Maratos-efektiksi. Ongelmaan törmää erityisesti optimointitehtävissä, joissa on epälineaarisia yhtälörajoitteita ja algoritmin lähtöpiste on jo valmiiksi sallittu piste. [12] [10]

5.1 Sallitun parantavan suunnan puuttuminen

Epälineaarisilla yhtälörajoitteilla mikä tahansa lineaarinen suunta \mathbf{d} poistuu sallittujen pisteiden joukosta kasvattaen l_1 -sakkofunktion arvoa. Tarkastellaan Powellin esimerkkiongelmää Nocedal'n kirjassa [11].

Esimerkki 5.1. Ratkaistaan yhtälörajoitteellinen minimointitehtävä

$$\begin{aligned} \min_{x_1, x_2 \in \mathbb{R}^n} \quad & f(x_1, x_2) = 2(x_1^2 + x_2^2 - 1) - x_1 \\ \text{s.t.} \quad & x_1^2 + x_2^2 - 1 = 0. \end{aligned} \tag{38}$$

Huomataan, että kaikki yksikköympyrän pisteet ovat sallittuja ja optimiratkaisu on piste $\mathbf{x}^* = (1, 0)^\top$, joka antaa kohdefunktion arvon $f(\mathbf{x}^*) = -1$. KKT-ehdot tehtävälle ovat

$$\begin{aligned} 4x_1 - 1 + 2x_1v &= 0 \\ 4x_2 + 2x_2v &= 0 \\ x_1^2 + x_2^2 - 1 &= 0, \end{aligned}$$

jolloin optimissa $f(1, 0)$ saadaan $v = -\frac{3}{2}$. Lisäksi tehtävän Lagrangen funktion Hessian matriisi on

$$\begin{aligned} \nabla_{\mathbf{xx}}^2 L(\mathbf{x}, \mathbf{v}) &= \nabla_{\mathbf{xx}}^2 f(\mathbf{x}) + v \nabla^2 h(\mathbf{x}) \\ &= \nabla_{\mathbf{x}}(4x_1 + 2x_1v - 1, 4x_2 + 2x_2v) \\ &= \begin{bmatrix} 4 + 2v & 0 \\ 0 & 4 + 2v \end{bmatrix}, \end{aligned}$$

joka optimipisteessä \mathbf{x}^* muuttujan arvolla $v = -\frac{3}{2}$ on identiteettimatriisi \mathbf{I} .

Valitaan lähtöpisteeksi $\mathbf{x}_0 = (\cos \theta, \sin \theta)^\top$ ja ratkaistaan sitten alitehtävästä QP($\mathbf{x}_0, \mathbf{v}_0, \mathbf{u}_0$) (33) parantava suunta $\mathbf{d}_0 = (d_1, d_2)^\top$. Käytetään Hessian matriisin $\nabla^2 L(\mathbf{x}, v)$ approksimaationa matriisia \mathbf{I} ja saadaan

$$\begin{aligned} \text{QP}(\mathbf{x}_0, \mathbf{v}_0) : \min_{\mathbf{d}_0 \in \mathbb{R}^2} \quad & (4x_1 - 1, 4x_2) \mathbf{d}_0 + \frac{1}{2} \mathbf{d}_0^\top \mathbf{I} \mathbf{d}_0 \\ \text{s.t.} \quad & x_1^2 + x_2^2 - 1 + (2x_1, 2x_2) \mathbf{d}_0 = 0. \end{aligned}$$

Sijoitetaan vielä $\mathbf{x}_0 = (x_1, x_2)^\top = (\cos \theta, \sin \theta)^\top$ ja saadaan tehtävästä sievempi muoto

$$\begin{aligned} \text{QP}(\mathbf{x}_0, \mathbf{v}_0) : \min_{d_1, d_2 \in \mathbb{R}} \quad & -d_1 + \frac{1}{2}(d_1^2 + d_2^2) \\ \text{s.t.} \quad & \cos \theta d_1 + \sin \theta d_2 = 0. \end{aligned}$$

Tämän tehtävän KKT-ehdot ovat

$$\begin{aligned} -1 + d_1 + \cos \theta \cdot v &= 0 \\ d_2 + \sin \theta \cdot v &= 0 \\ \cos \theta d_1 + \sin \theta d_2 &= 0. \end{aligned}$$

Ratkaistaan yhtälöryhmä ja saadaan $\mathbf{d}_0 = (\sin^2 \theta, -\sin \theta \cos \theta)^\top$ ja $v_0 = \cos \theta$. Riippumatta siis lähtöpisteen θ arvosta seuraava iteraatiopiste

$$\mathbf{x}_1 = (\cos \theta + \sin^2 \theta, \sin \theta - \sin \theta \cos \theta)^\top.$$

Iteraatiopisteen \mathbf{x}_1 ja optimipisteen \mathbf{x}^* etäisyys l_2 -normia käyttäen on

$$\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}^*\|_2 = \sqrt{2(1 - \cos \theta)}.$$

Pisteen \mathbf{x}_1 ja \mathbf{x}^* etäisyys taas on

$$\|\mathbf{x}_0 + \mathbf{d}_0 - \mathbf{x}^*\|_2 = 1 - \cos \theta.$$

Tästä seuraa kvadraattinen konvergenssi, koska

$$\frac{\|\mathbf{x}_0 + \mathbf{d}_0 - \mathbf{x}^*\|_2}{\|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^*\|_2} = \frac{1}{2}.$$

Huomataan kuitenkin, että

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}_1) &= 2((\cos \theta + \sin^2 \theta)^2 + (\sin \theta - \sin \theta \cos \theta)^2 - 1) - \sin^2 \theta - \cos \theta \\ &= \sin^2 \theta - \cos \theta > -\cos \theta = f(\mathbf{x}_0) \end{aligned}$$

ja

$$\begin{aligned} h(\mathbf{x}_1) &= (\cos \theta + \sin^2 \theta)^2 + (\sin \theta - \sin \theta \cos \theta)^2 - 1 \\ &= \sin^2 \theta > 0 = h(\mathbf{x}_0), \end{aligned}$$

joten kaikilla arvoilla $\theta \neq 0$ kokonainen askel ratkaistuun suuntaan \mathbf{d}_0 kasvattaa kohdefunktion arvoa ja yhtälörajoitetta rikotaan. Ympyrän ulkokehällä on jokaisesta pisteestä vain kaksi sallittua suuntaa liikkua, joten jatkamalla lineaarisesti sallittuun suuntaan \mathbf{d} ajaudutaan aina kauemmas sallittujen pisteiden ympyrästä. Käytettäessä l_1 -sakkofunktiota sallittu askelpituus ei siis välttämättä lähesty kokonaista askelpituutta $\lambda = 1$, vaikka iteraatiopiste olisi erittäin lähellä optimipistettä. Tämä jarruttaa algoritmin etenemistä ja estää superlineaarisen konvergenssin.

5.2 Keinoja Maratos-efektin välttämiseen

Tässä aliluvussa esitellään kolme menetelmää Maratos-efektin välttämiseen. Ensimmäinen menetelmä, Watchdog-algoritmi, perustuu mahdollisuuteen poiketa hetkellisesti kiellettyihin pisteisiin, kunhan sen jälkeen palataan sallittuun ratkaisuun. Toisessa menetelmässä suuntahaun tilalla käytetään kaarihakua, jossa lineaarisen suunnan \mathbf{d} ja askelpituuden λ tilalla käytetään apusuunnan \mathbf{d}^* ja muuttujan t avulla määriteltä uutta kaarevaa hakusuuntaa $\mathbf{d}_{k+1} = t\mathbf{d}_k + t^2\mathbf{d}^*$. Viimeisenä ratkaisumenetelmänä esitellään lisätyn Lagrangen sakkofunktion menetelmä, joka ei kärsi Maratos-efektistä. [5] [12] [8]

5.2.1 Watchdog

Watchdog-algoritmi [11] on testiaskelisiin perustuva menetelmä, jossa sallitaan kaksi peräkkäistä askelta, vaikka ne eivät antaisikaan sallittuja pisteitä. Viimeistään kolmannen askeleen tulee kuitenkin tuottaa sallittu ja kohdefunktion arvoa parantava piste. Menetelmässä käytetään l_1 -sakkofunktiota (34). Koska l_1 -sakkofunktio ei ole kaikkialla derivoituva, mutta se on kuitenkin jatkuva, voidaan sille ratkaista suuntaderivaatta suunnan $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^n$ suhteen pisteessä $\mathbf{x}_k \in \mathbb{R}^n$ määrittelemällä

$$D(F_E(\mathbf{x}_k), \mathbf{d}) = \lim_{\varepsilon \downarrow 0} \frac{F_E(\mathbf{x}_k + \varepsilon \mathbf{d}) - F_E(\mathbf{x}_k)}{\varepsilon}.$$

Derivaatan arvo riippuu rajoitteiden rikkomisesta sekä suunnan \mathbf{d} vaikutuksesta kohdefunktioon. Tämän tiedon pohjalta Watchdog-algoritmi päättää, että hyväksytäänkö löydetty piste uudeksi iteraatiopisteeksi.

Algoritmi 5.1. (Watchdog)

1. Valitaan vakio $\alpha \in (0, \frac{1}{2})$ ja lähtöpisteeksi sallittu primaali-duaaliratkaisu $(\mathbf{x}_0, \mathbf{v}_0, \mathbf{u}_0)$. Asetetaan laskuri $k = 0$.
2. Ratkaistaan suunta \mathbf{d}_k minimointitehtävästä (33). Jos $\mathbf{d}_k = \mathbf{0}$, ollaan löydetty KKT-piste. Asetetaan $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \mathbf{d}_k$.
3. Jos $F_E(\mathbf{x}_{k+1}) \leq F_E(\mathbf{x}_k) + \alpha[D(F_E(\mathbf{x}_k), \mathbf{d}_k)]$, asetetaan $k = k + 1$ ja palataan kohtaan 2. Muuten
 - Ratkaistaan seuraava suunta \mathbf{d}_{k+1} minimointitehtävästä (33) pisteessä \mathbf{x}_{k+1} ja etsitään sellainen λ_{k+1} , että
$$F_E(\mathbf{x}_{k+1} + \lambda_{k+1}\mathbf{d}_{k+1}) \leq F_E(\mathbf{x}_{k+1}) + \lambda_{k+1}\alpha[D(F_E(\mathbf{x}_{k+1}), \mathbf{d}_{k+1})].$$
 - Asetetaan $\mathbf{x}_{k+2} = \mathbf{x}_{k+1} + \lambda_{k+1}\mathbf{d}_{k+1}$. Jos
$$F_E(\mathbf{x}_{k+1}) \leq F_E(\mathbf{x}_k) \text{ tai}$$

$$F_E(\mathbf{x}_{k+2}) \leq F_E(\mathbf{x}_k) + \alpha[D(F_E(\mathbf{x}_k), \mathbf{d}_k)],$$
asetetaan $k = k + 2$ ja palataan kohtaan 2. Muuten
 - Jos $F_E(\mathbf{x}_{k+2}) > F_E(\mathbf{x}_k)$, palataan pisteeseen \mathbf{x}_k ja etsitään sellainen askelpituus λ_k , että
$$F_E(\mathbf{x}_k + \lambda_k\mathbf{d}_k) \leq F_E(\mathbf{x}_k) + \lambda_k\alpha[D(F_E(\mathbf{x}_k), \mathbf{d}_k)].$$
Asetetaan $\mathbf{x}_{k+3} = \mathbf{x}_k + \lambda_k\mathbf{d}_k$, $k = k + 3$, ja palataan kohtaan 2.

- Jos taas $F_E(\mathbf{x}_{k+2}) \leq F_E(\mathbf{x}_k)$, ratkaistaan suunta \mathbf{d}_{k+2} minimointitehtävästä (33) pisteessä \mathbf{x}_{k+2} ja etsitään sellainen muuttuja λ_{k+2} , että

$$F_E(\mathbf{x}_{k+2} + \lambda_{k+2}\mathbf{d}_{k+2}) \leq F_E(\mathbf{x}_{k+2}) + \lambda_{k+2}\alpha[D(F_E(\mathbf{x}_{k+2}), \mathbf{d}_{k+2})].$$

Asetetaan $\mathbf{x}_{k+3} = \mathbf{x}_{k+2} + \lambda_{k+2}\mathbf{d}_{k+2}$, $k = k + 3$ ja palataan kohtaan 2.

Kun k on riittävän suuri, saadaan askelpituudeksi aina $\lambda = 1$ ja saavutetaan superlineaarinen konvergenssi [11].

Esimerkki 5.2. Tarkastellaan Powellin esimerkkitehtävää (5.1) Watchdog-algoritmin avulla. Valitaan lähtöpisteeksi $\mathbf{x}_0 = (0, 1)^\top$, parametreiksi $\alpha = 0.4$, $\mu = 10$ ja $\mathbf{B}_k = \mathbf{I}$ sekä asetetaan laskuri $k = 0$. Ratkaisemalla tehtävä (33) pisteessä \mathbf{x}_0 saadaan ensin suunta $\mathbf{d}_0 = (1, 0)^\top$.

Nyt

$$D(F_E(\mathbf{x}_k), \mathbf{d}_k) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{F_E[(0, 1) + \varepsilon(1, 0)] - F_E(0, 1)}{\varepsilon} = -1.$$

Koska ehto

$$F_E(\mathbf{x}_{k+1}) \leq F_E(\mathbf{x}_k) + \alpha[D(F_E(\mathbf{x}_k), \mathbf{d}_k)]$$

ei toteudu, siirrytään pisteeseen $\mathbf{x}_1 = (1, 1)^\top$ ja ratkaistaan tehtävä (33) pisteessä \mathbf{x}_1 , joka antaa suunnan $\mathbf{d}_1 = (\frac{1}{4}, -\frac{3}{4})^\top$. Mikään algoritmin seuraavista vertailuista ei toteudu ennen ehtoa $F_E(\mathbf{x}_{k+2}) > F_E(\mathbf{x}_k)$, joten palataan pisteeseen $\mathbf{x}_0 = (0, 1)^\top$. Ratkaistaan askelpituus $\lambda_k = 0.05$, joka toteuttaa epäyhtälön

$$F_E(\mathbf{x}_k + \lambda_k\mathbf{d}_k) \leq F_E(\mathbf{x}_k) + \lambda_k\alpha[D(F_E(\mathbf{x}_k), \mathbf{d}_k)],$$

ja päivitetään $\mathbf{x}_{k+3} = (0, 1)^\top + \lambda_k(1, 0)^\top = (0.05, 1)^\top$ ja $k = k + 3$. Seuraavaksi hakusuunnaksi askeleessa 2 saadaan $(0.9974, -0.0511)^\top$, ja algoritmin suoritusta jatketaan, kunnes päädytään riittävän lähelle KKT-pistettä.

5.2.2 Kaarihaku

Parantavaan hakusuuntaan \mathbf{d} voidaan tehdä myös toisen asteen korjaus, jossa suunnataa \mathbf{d} "taivutetaan" apusuunnan \mathbf{d}^* avulla niin, että jollakin $0 < t \leq 1$ on voimassa $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + t\mathbf{d}_k + t^2\mathbf{d}^*$ ja $F_E(\mathbf{x}_{k+1}) < F_E(\mathbf{x}_k)$.

Käytetään apuna lineaarista l_1 -sakkofunktiota $F_E(\mathbf{x}_k)$ (34) ja määritellään uusi hakusuunnasta \mathbf{d} riippuva sakkofunktio

$$\begin{aligned} F_{Ed}(\mathbf{x}, \mathbf{d}) &= f(\mathbf{x}) + \nabla f(\mathbf{x})^\top \mathbf{d} \\ &+ \mu \left[\sum_{j=1}^m \max\{0, g_j(\mathbf{x}) + \nabla g_j(\mathbf{x})^\top \mathbf{d}\} \right] \\ &+ \mu \left[\sum_{i=1}^l |h_i(\mathbf{x}) + \nabla h_i(\mathbf{x})^\top \mathbf{d}| \right]. \end{aligned} \tag{39}$$

Jos suunta \mathbf{d} on sallittu, ja kohdefunktion f arvoa parantava, niin myös sakkofunktion (39) arvo on pienempi suunnassa \mathbf{d} . Määritellään lisäksi algoritmia varten uusi funktio

$$W_k = \max_{l=0,\dots,3} F_E(\mathbf{x}_{k-l}),$$

jossa negatiiviset indeksit jätetään huomiotta. Seuraava algoritmi on Eliane R. Pannierin ja Andre L. Titsin artikkelista [12].

Algoritmi 5.2. (SQP kaarihaulla)

1. Asetetaan laskuri $k = 0$ ja valitaan lähtöpisteeksi sallittu primaali-duaaliratkaisu $(\mathbf{x}_0, \mathbf{v}_0, \mathbf{u}_0)$. Valitaan $\alpha \in (0, \frac{1}{2}), \beta \in (0, 1)$.
2. Muodostetaan approksimaatio KKT-pisteestä Newtonin menetelmän avulla eli ratkaistaan minimointialitehtävän (33) avulla suunta \mathbf{d}_k . Usein on hyödyllistä vain arvioida Hessen matriisia $\nabla^2 L(\mathbf{x}_k, \mathbf{v}_k, \mathbf{u}_k)$ jollakin positiividefiniitillä matriisilla \mathbf{B}_k minimointitehtävän ratkaisemisen helpottamiseksi.
3. Jos $\mathbf{d}_k = \mathbf{0}$, ollaan löydetty KKT-piste. Jos

$$F_E(\mathbf{x}_k + \mathbf{d}_k) \leq W_k + \alpha[F_{Ed}(\mathbf{x}_k, \mathbf{d}_k) - F_E(\mathbf{x}_k)], \quad (40)$$

siirrytään kohtaan 5.

4. Ratkaistaan korjaussuunta \mathbf{d}^* (41) käyttäen hyväksi epäonnistunutta askelta \mathbf{d}_k . Tätä varten muodostetaan minimointitehtävä QP*, jossa

$$\begin{aligned} \text{QP}^*(\mathbf{x}_k, \mathbf{d}_k, \mathbf{B}_k) : \min_{\mathbf{d}^* \in \mathbb{R}^n} \quad & \nabla f(\mathbf{x}_k)^\top (\mathbf{d}^* + \mathbf{d}_k) + \frac{1}{2}(\mathbf{d}^* + \mathbf{d}_k)^\top \mathbf{B}_k (\mathbf{d}^* + \mathbf{d}_k) \\ \text{s.t.} \quad & g_j(\mathbf{x}_k + \mathbf{d}_k) + \nabla g_j(\mathbf{x}_k)^\top \mathbf{d}^* \leq 0, j = 1, 2, \dots, m, \\ & h_i(\mathbf{x}_k + \mathbf{d}_k) + \nabla h_i(\mathbf{x}_k)^\top \mathbf{d}^* = 0, i = 1, 2, \dots, l \end{aligned} \quad (41)$$

ja \mathbf{B}_k on arvio matriisista $\nabla^2 L(\mathbf{x}_k, \mathbf{v}_k, \mathbf{u}_k)$. Jos tehtävä ei ole ratkeava, tai $\|\mathbf{d}^*\| > \|\mathbf{d}_k\|$, asetetaan $\mathbf{d}^* = \mathbf{0}$. Muuttujaksi t valitaan suurin arvo joukosta $\{1, \beta, \beta^2, \dots\}$, joka ratkaisee epäyhtälön

$$F_E(\mathbf{x}_k + t\mathbf{d}_k + t^2\mathbf{d}^*) \leq W_k + \alpha[F_{Ed}(\mathbf{x}_k, t\mathbf{d}_k) - F_E(\mathbf{x}_k)]. \quad (42)$$

Asetetaan $\mathbf{d}_k = t\mathbf{d}_k + t^2\mathbf{d}^*$.

5. Päivitetään $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \mathbf{d}_k$, $k = k + 1$ sekä haluttaessa approksimaatiota matriisista \mathbf{B}_k . Palataan kohtaan 2.

Iteraatiopisteiden ollessa aina sallittuja voitaisiin yhtä hyvin määritellä $W_k = F_E(\mathbf{x}_k)$. Vertaamalla kuitenkin suunnan \mathbf{d}_k määräämää pistettä kolmen edellisen pisteen maksimiin, voidaan hetkellisesti sallia sakkofunktion arvon nousu, kunhan $F_E(\mathbf{x}_k) \leq \max\{F_E(\mathbf{x}_{k-i}), i = 1, \dots, 3\}$. Watchdog-menetelmän tapaan algoritmilla saavutetaan superlineaarinen konvergenssi, kunhan k on riittävän suuri [12].

Watchdog-menetelmään verrattuna kaarihaun etu on, että algoritmissa 5.2 ei tarvitse pitää kirjaa edellisten askeleiden tuloksista, vaan askeleen kelpoisuusvertailu tehdään pelkästään muuttujan W_k mukaan. Silloin algoritmin suorittamisesta tulee suoraviivaisempaa, kun ei tarvitse laskea testiaskeleita, joita ei välttämättä kuitenkaan käytetä hyväksi.

Jos tehtävän QP (33) ratkaisusuunta \mathbf{d}_k ei ole parantava suunta, niin uuden suunnan määrittäminen tehdään Watchdog-menetelmästä poiketen kaarihaulla. Apusuunta \mathbf{d}^* ratkaistaan minimointitehtävästä QP* (41), jonka avulla etsitään parantava suunta $\mathbf{d}_{k+1} = t\mathbf{d}_k + t^2\mathbf{d}^*$. Pienentämällä parametria $0 < t \leq 1$ muutetaan alkuperäisen suunnan \mathbf{d}_k ja apusuunnan \mathbf{d}^* vaikutusosuutta suunnassa \mathbf{d}_{k+1} , kunnes suunta \mathbf{d}_{k+1} on sakkofunktion arvoa parantava.

Esimerkki 5.3. Tarkastellaan yksikköympyrärajoitteellista tehtävää

$$\begin{aligned} \min_{x,y \in \mathbb{R}} \quad & f(x) = -x \\ \text{s.t.} \quad & x^2 + y^2 - 1 = 0, \end{aligned} \quad (43)$$

jonka minimipiste on pisteessä $(x^*, y^*) = (1, 0)$. Valitaan lähtöpisteeksi $(x_0, y_0) = (0, 1)$ ja parametreiksi $\alpha = 0.4, \mu = 100, \beta = 0.99$ ja $\mathbf{B}_k = \mathbf{I}$.

Ratkaistaan ensin tehtävästä QP (33) parantava suunta $(d_1, d_2) = (1, 0)$. Epäyhtälö (40) ei toteudu, joten ratkaistaan uusi apusuunta $\mathbf{d}^* = (d_1^*, d_2^*) = (0, -\frac{1}{2})$ tehtävästä QP* (41). Ratkaistaan vielä apusuunnan paino etsimällä sopiva kerroin t niin, että epäyhtälö (42) toteutuu. Näin tapahtuu, kun $t = 0.288$ ja päädytään seuraavaan pisteeseen $(x_1, y_1) = (0.288, 0.9585)$.

Muuttujan t lähestymistä kohti epäyhtälön (42) sallittua ratkaisua on havainnollistettu kuvassa 2. Uusien iteraatiopisteiden laskemista jatketaan, kunnes valittu lopetusehto saavutetaan.

5.2.3 Lisätty Lagrangen sakkofunktio

Kolmas keino välttää Maratos-efekti on täydentää sakkofunktio Lagrangen funktiolla ja toisen asteen sakkotermillä [11] [4]. Esimerkki tällaisesta sakkofunktiosta yhtälörajoitteelliselle minimointitehtävälle, kun $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, on lisätty Lagrangen sakkofunktio

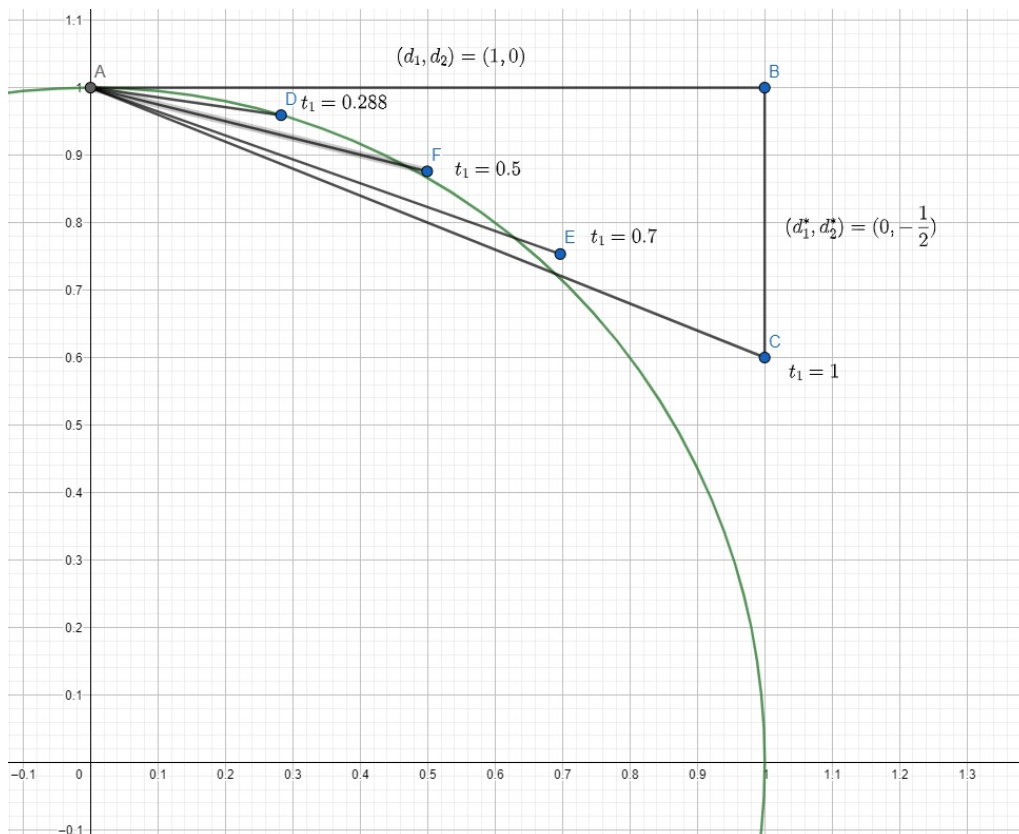
$$L_A(\mathbf{x}, \mathbf{v}, \mu) = f(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^l v_i h_i(\mathbf{x}) + \frac{1}{2}\mu \sum_{i=1}^l h_i(\mathbf{x})^2. \quad (44)$$

Korottamalla viimeinen termi $h(\mathbf{x})$ toiseen potenssiin saadaan sakkofunktiosta kaikkialla differentioituva. Ongelmana tehtävässä on, että yleensä ei tiedetä sopivaa Lagrangen kerrointa \mathbf{v} tai sakkokerrointa $\mu > 0$. Siksi parametreiksi valitaan mielivaltaiset approksimaatiot, jotka päivitetään jokaisen minimointitehtävän ratkaisun jälkeen. Hyvä kaava [4] Lagrangen kertoimien approksimaatioiden päivytykseen on esimerkiksi

$$\mathbf{v}_{k+1} = \mathbf{v}_k + \mu h(\mathbf{x}_k). \quad (45)$$

Lagrangen kertoimelle \mathbf{v} voidaan laskea myös tarkempi arvio, kun käytetään laskennallisesti työlästä Fletcherin lisättyä Lagrangen sakkofunktiota [11]. Silloin kertoimen \mathbf{v}_k arvio muodostetaan kaavalla

$$\mathbf{v}_k = -[\nabla \mathbf{h}(\mathbf{x}_k)^\top \nabla \mathbf{h}(\mathbf{x}_k)]^{-1} \nabla \mathbf{h}(\mathbf{x}_k)^\top \nabla f(\mathbf{x}_k). \quad (46)$$



Kuva 2: Muuttujan t lähestyminen kohti epäyhtälön (42) ratkaisua apusuunnan \mathbf{d}^* avulla.

Esimerkki 5.4. Ratkaistaan SQP-algoritmilla esimerkkit tehtävän (5.1) ensimmäinen askelpitus käyttäen lisättyä Lagrangen sakkofunktiota parametreilla $v_0 = 1$, $\mathbf{x}_0 = (0, 1)^\top$ ja $\mu = 10$. Kun parantavaksi suunnaksi on saatu $\mathbf{d}_0 = (1, 0)^\top$, ratkaistaan askelpitus sakkofunktiosta

$$L_A(\mathbf{x}_0 + \lambda \mathbf{d}_0, \mathbf{v}_0, \mu) = 2((0 + \lambda)^2 + 1^2 - 1) - \lambda + 1(\lambda^2 + 1^2 - 1) + 10 \cdot \frac{1}{2}(\lambda^2 + 1^2 - 1)^2,$$

ja saadaan $\lambda_0 = 0.154398$. Jos optimaalinen arvo muuttujalle $v = -\frac{3}{2}$ tiedettäisiin, askelpitus piteneisi ja saataisiin $\lambda_0 = 0.323418$.

Lagrangen sakkofunktiota voidaan myös käyttää yhtälörajoitteellisen minimointitehtävän ratkaisemiseen ilman SQP-algoritmia. Silloin minimoidaan toistuvasti ratkaistavan tehtävän lisättyä Lagrangen sakkofunktiota (44). Lagrangen kerroin \mathbf{v} päivitetään jokaisen minimoinnin jälkeen perustuen saatuun ratkaisuun \mathbf{x}_k . Kun kerroin \mathbf{v}_k lähestyy ratkaisua \mathbf{v}^* , niin myös \mathbf{x}_k lähestyy KKT-pistettä \mathbf{x}^* .

Esimerkki 5.5. Tarkastellaan jälleen esimerkkit tehtävää (5.1) ja Lagrangen sakkofunktion arvoja tehtävää ratkaistaessa. Esimerkissä ei käytetä SQP-algoritmia, vaan minimoidaan toistuvasti Lagrangen sakkofunktiota päivittäen joka kierroksella Lagrangen kerrointa v . Todellinen ratkaisu tehtävälle on $\mathbf{x}^* = (1, 0)^\top$ ja $v^* = -\frac{3}{2}$. Valitaan aloitusparametrit $\mu_0 = 10$ ja $v_0 = 1$ sekä sakkoparametrin μ päivityskaavaksi

$\mu_{k+1} = 2\mu$. Silloin minimoidaan funktiota

$$L_A(\mathbf{x}, v_0, \mu) = 2(x_1^2 + x_2^2 - 1) - x_1 + 1(x_1^2 + x_2^2 - 1) + 10 \cdot \frac{1}{2}(x_1^2 + x_2^2 - 1)^2.$$

Ensimmäiseksi iteraatiopisteeksi saadaan piste $\mathbf{x}_1 = (0.870316, 0)^\top$. Päivitetään kaava (45) apuna käyttäen $v_{k+1} = 1 + 10(-0.24255) = -1.4255$ ja $\mu_{k+1} = 2 \cdot 10 = 20$. Seuraavalla kierroksella $k = 1$ minimoidaan funktiota

$$L_A(\mathbf{x}, v_1, \mu) = 2(x_1^2 + x_2^2 - 1) - x_1 - 1,4255(x_1^2 + x_2^2 - 1) + 20 \cdot \frac{1}{2}(x_1^2 + x_2^2 - 1)^2.$$

Tämän funktion minimipiste on $\mathbf{x}_2 = (0.998159, 0)^\top$. Ratkaisu lähenee joka askeleella kohti tehtävän todellista ratkaisua ja Lagrangen kerroin v KKT-ehdot täyttävän muuttujan $v^* = -\frac{3}{2}$ arvoa.

Huomataan myös, että optimipisteessä $\mathbf{x}^* = (1, 0)^\top$ ja $v^* = -\frac{3}{2}$ minimointitehtävän

$$\begin{aligned} \min_{x_1, x_2 \in \mathbb{R}} L_A(\mathbf{x}, v^*, \mu) &= 2(x_1^2 + x_2^2 - 1) - x_1 - \frac{3}{2}(x_1^2 + x_2^2 - 1) + \mu \cdot \frac{1}{2}(x_1^2 + x_2^2 - 1)^2 \\ &= \frac{1}{2}(x_1^2 + x_2^2 - 1) - x_1 + \mu \cdot \frac{1}{2}(x_1^2 + x_2^2 - 1)^2 \\ &= \frac{1}{2}(x_1^2 + x_2^2 - 1)(1 + \mu) - x_1 \end{aligned}$$

ratkaisu on riippumaton sakkokertoimesta μ . Silloin minimoitava sakkofunktio on eksakti, eikä sakkokertoimen μ kasvattaminen enää muuta minimointitehtävän ratkaisua.

Jos tehtävä (5.1) sen sijaan ratkaistaan käyttäen kaavan (46) arviota Lagrangen kertoimesta \mathbf{v} , saa minimoitava sakkofunktio ensimmäisellä askeleella muodon

$$L_A(\mathbf{x}, v, \mu) = 2(x_1^2 + x_2^2 - 1) - x_1 - 2(x_1^2 + x_2^2 - 1) + 10 \cdot \frac{1}{2}(x_1^2 + x_2^2 - 1)^2.$$

Ratkaisemalla tästä tehtävästä minimipiste \mathbf{x}_1 päädytään jo ensimmäisellä askeleella pisteeseen $\mathbf{x}_1 = (1.02412, 0)^\top$.

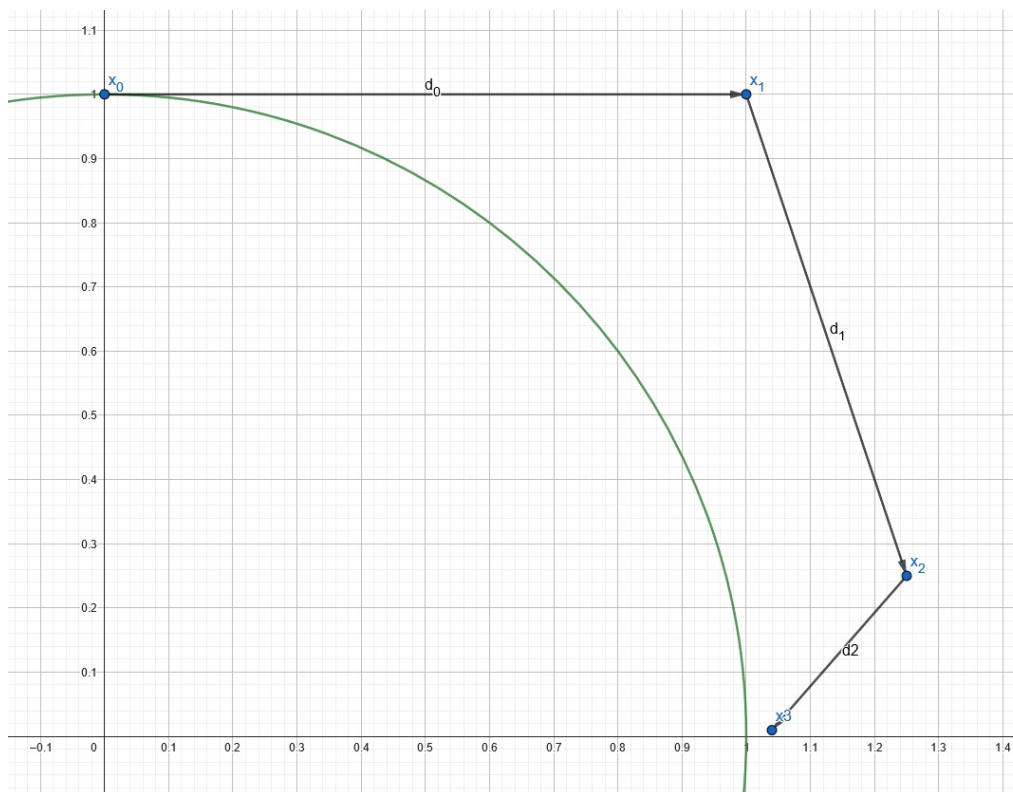
5.2.4 Havaintoja menetelmien eroista

Vaikka useimmiten l_1 -sakkofunktion käyttö nopeuttaa SQP-algoritmin konvergenssia, niin aina ei näin käy. Menetelmät Maratos-efektin torjumiseksi eroavat suuresti toisistaan.

Esimerkki 5.6. Havainnollistetaan vielä l_1 -sakkofunktiosta luopumisen vaikutusta SQP-algoritmin konvergenssiin esimerkkit tehtävässä 5.1. Kuvassa 3 nähdään, kuinka yksinkertainen SQP-algoritmi, jossa kaikki löydetyt suunnat toteutetaan askelpituudella $\lambda = 1$, konvergoi todella nopeasti kohti optimipistettä $\mathbf{x}^* = (1, 0)^\top$.

Sakkofunktion käyttö askelpituuden määrittämiseen siis helposti hidastaa konvergenssia merkittävästi, jos algoritmin eteneminen edellyttää poistumista sallittujen pisteiden joukosta, tai kohdefunktion arvo kasvaa väliaikaisesti seuraavaan iteraatiopisteeseen siirryttäessä. Jos l_1 -sakkofunktiota käytetään löydettyyn parantavaan

suuntaan \mathbf{d} , tulee haasteeksi sopivan sakkokertoimen määritys niin, että algoritmi etenisi edes kohtuullisella nopeudella kohti tehtävän KKT-pistettä, mutta pysytlisi silti lähellä sallittuja pisteitä. Taulukossa 2 on havainnollistettu tehtävän 5.1 ensimmäisiä askeleita edellä kuvatuilla algoritmeilla, sekä tavallisella l_1 -sakkofunktion SQP-algoritmilla. Hessen matriisista on käytetty arviota $\mathbf{B}_k = \mathbf{I}$ ja lisätyn Lagrangen sakkofunktion menetelmässä Lagrangen kertoimen arviota v_k on päivitetty kaavalla (45) ennen laskurin k päivitystä. Sakkokertoimen μ valinta vaikuttaa merkittävästi algoritmien etenemiseen ja sallitun askeleen valintaan. Alussa suuri sakkokerroin estää järkevien askeleiden ottamisen, lopussa taas algoritmin edetessä päästäisiin tarkempiin lopputuloksiin, jos sakkoparametriä μ kasvatettaisiin algoritmin lähestyessä optimipistettä $\mathbf{x}^* = (1, 0)^\top$.



Kuva 3: SQP-algoritmin eteneminen esimerkkit tehtävässä (5.1), jos sakkofunktiota ei käytetä, vaan kaikki askeleet hyväksytään täysimittaisina $\lambda = 1$.

Watchdog- ja kaarihakumenetelmä pyrkivät kiertämään sakkofunktion aiheuttamaa Maratos-efektiä säilyttäen kuitenkin sakkofunktion etuja konvergenssin tehostamiseksi. Molemmissa menetelmissä otetaan lähtökohtaisesti aina täysmittainen askel $\lambda = 1$ parantavaan suuntaan \mathbf{d} , jos askel parantaa sakkofunktion arvoa. Jos taas sakkofunktion arvo ei pienene, niin menettelytapa riippuu valitusta algoritmista.

Watchdog-algoritmi perustuu enemmän yritykseen ja erehdykseen. Askel väliaikaisesti ei-sallittuun pisteeseen saattaa välillä nopeuttaa konvergenssia merkittävä-

	Watchdog	Kaarihaku	SQP ja Lis. Lagr.	SQP ja l_1
\mathbf{x}_0	(0, 1)	(0, 1)	(0, 1)	(0, 1)
\mathbf{x}_1	(0.05, 1)	(0.58, 0.8318)	(0.15440, 1)	(0.041667, 1)
\mathbf{x}_2	(0.10157, 0.99736)	(1.00109, 0.24536)	(0.30763, 0.97447)	(0.08413, 0.99819)
\mathbf{x}_3	(0.15401, 0.99736)	(1.02834, 0.00704)	(0.44659, 0.92711)	(0.12722, 0.99449)
\mathbf{x}_4	(0.21062, 0.98287)		(0.56569, 0.86500)	(0.17078, 0.98880)
\mathbf{x}_5	(0.27269, 0.96923)		(0.66521, 0.79416)	(0.21463, 0.98107)
$f(\mathbf{x}_5)$	-0.24517	$f(\mathbf{x}_3) = -0.91329$	-0.51882	-0.19751

Taulukko 2: Tehtävän 5.1 ensimmäisiä iteraatiopisteitä eri algoritmeilla. Aloitusparametreinä on käytetty $v_0 = 1$ sekä vakioita $\mathbf{B}_k = \mathbf{I}$, $\mu = 10$ ja $\alpha = 0.4$.

ti, tai vaihtoehtoisesti luoda täysin turhan iteraatiopisteen. Algoritmi on herkkä aloitusparametrien suhteen. Jos sakkokerroin tai parametri α on suuri lähtöpisteeseen nähden, ei kaarevalla pinnalla pystytä ottamaan pitkiä askelia.

Kaarihaku toimii suoraviivaisemmin päätyen aina sakkofunktion arvoa pienentävään iteraatiopisteeseen. Kun parantava suunta \mathbf{d} on selvillä, ratkaistaan uusi apusuunta \mathbf{d}^* . Näiden kahden suunnan kombinaationa saadaan suunta, joka parantaa enemmän sakkofunktion arvoa, kuin pelkkä suunta \mathbf{d} . Vertailuja ja laskutoimituksia tarvitaan vähemmän iteraatiokierrosta kohden, kun tyydytään aina sakkofunktiota parantavaan suuntaan, eikä ahnehdita liian suurta konvergenssia.

Jos SQP-algoritmi kärsii Maratos-efektistä, niin myös lisätyn Lagrangen sakkofunktiomenetelmän avulla voidaan ratkaista differentioituva yhtälörajoitteellinen minimointitehtävä. Koska sakkofunktio on differentioituva, voidaan paras askelpituus löytää myös derivointia apuna käyttäen. Algoritmi joudutaan yleensä aloittamaan sattumanvaraisista Lagrangen kertoimista ja sakkokertoimesta sekä päivittämään kertoimia jokaisen iteraatiopisteen jälkeen. Lagrangen lisätty sakkofunktio ei kärsi l_1 -sakkofunktion tavoin Maratos-efektistä, koska Lagrangen kerroin pyrkii kompensoimaan perinteisen sakkofunktion rajoiterikkomuksia.

6 Yhteenveto

Toistettu kvadraattinen optimointi on differentioituvien rajoitteellisten tehtävien optimointiin erittäin tehokas parantavien hakusuuntien menetelmä. Koska parantavat suunnat perustuvat lineaarisiin approksimaatioihin kohde- ja rajoitefunktioista, on hakusuuntien ratkaiseminen helppoa, vaikka kohde- ja rajoitefunktio olisivat epälineaarisia. Käyttämällä aina positiividefiniittiä matriisia voidaan varmistua suunnan parantavasta vaikutuksesta kohdefunktioon. Algoritmi konvergoi kohti tehtävän KKT-pistettä, joka riittävien ehtojen täytyessä on myös tehtävän globaali minimipiste. Konvergenssia pyritään nopeuttamaan määräämällä askelpituus sallituksi l_1 -sakkofunktion avulla. Algoritmin tehokkuuden vuoksi siitä on kehitetty paljon variaatioita, jotka mahdollistavat algoritmin käytön myös poikkeustapauksissa.

Sakkofunktion käyttö saattaa myös hidastaa algoritmin konvergenssia. Aloituspärametrienvä valinnalla onkin suuri merkitys algoritmin konvergenssiin, ja epäsooivan sakkopärametrin käyttö saattaa käytännössä pysäyttää algoritmin etenemisen. Jos tällainen Maratos-efekti ilmenee, ovat kaikki tutkielmassa esitetyt keinot hyviä apuvälineitä ongelman kiertämiseen. Sopivan menetelmän valinta riippuu ratkaistavasta tehtävästä, käytettävissä olevista apuvälineistä ja kriteereistä sekä hieman tuuristakin, jos tehtävän ratkaisija onnistuu valitsemaan tehtävään sopivat aloituspäparametrit.

Lähdeluettelo

- [1] Ioannis K. Argyros, Saïd Hilout, 2012, *Weaker conditions for the convergence of Newton's method*, Journal of Complexity, Vol. 18, No. 3, s. 364-387.
- [2] Mokhtar S. Bazaraa, C.M. Shetty, 1979, *Nonlinear Programming Theory and Algorithms*, 1. painos, John Wiley & Sons, Inc, USA.
- [3] Mokhtar S. Bazaraa, Hanif D. Sherali, C.M. Shetty, 2006, *Nonlinear Programming Theory and Algorithms*, 3. painos, John Wiley & Sons, Inc, USA.
- [4] Dimitri P. Bertsekas, 1981, *Augmented Lagrangian and differentiable exact penalty methods*, artikkeli verkkosivulla DSpace@MIT, <https://dspace.mit.edu/handle/1721.1/947>. Luettu 14.4.2022.
- [5] J. Frederic Bonnans, Eliane R. Panier, Andre L. Tits, Jian L.Zhou, 1992, *Avoiding the Maratos effect by means of a nonmonotone linesearch II. Inequality constrained problems-feasible iterates*, SIAM Journal on Numerical Analysis Vol. 29, No. 4, s. 1187-1202.
- [6] Adriaan van den Bos, 2007, *Parameter Estimation for Scientists and Engineers*, 1. painos, John Wiley & Sons, Inc, USA.
- [7] Philips E. Gill, Elizabeth Wong, 2010, *Sequential quadratic programming methods*, UCSD Department of Mathematics Technical Report NA-10-03, University of California, San Diego.
- [8] A.F. Izmailov, 2008, *A New technique for avoiding the Maratos Effect*, Computational Mathematics and Mathematical Physics, Vol. 49, No. 2, s. 232-245.
- [9] Olvi L. Mangasarian, 1969, *Nonlinear Programming*, 1. painos, McGraw-Hill, Inc, USA.
- [10] Nicholas Maratos, 1978, *Exact penalty function algorithms for finite dimensional and control optimization problems*, Doctoral thesis, Imperial College London.
- [11] Jorge Nocedal, Stephen J. Wright, 2000, *Numerical Optimization*, 2. painos, Springer Science+Business Media, LLC, USA.
- [12] Eliane R. Panier, Anrde L. Tits, 1991, *Avoiding the Maratos Effect by means of a nonmonotone line search I. General constrained problems*, SIAM Journal on Numerical Analysis, Vol. 28, No. 4, s. 1183-1195,