

Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο
Σχολή Μηχανολόγων Μηχανικών
Τομέας Ρευστών
Εργαστήριο Θερμικών Στροβιλομηχανών
Μονάδα Παράλληλης Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής
& Βελτιστοποίησης

Επίλυση Προβλημάτων Βελτιστοποίησης με Χρήση της
Μεθόδου του Διαδοχικού Τετραγωνικού
Προγραμματισμού (SQP) και Εφαρμογές

Διπλωματική Εργασία

Καραμπέκιος Αναστάσιος

Επιβλέπων: Κυριάκος Χ. Γιαννάκογλου , Καθηγητής ΕΜΠ

Αθήνα, 2017

ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΣΧΟΛΗ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ
ΤΟΜΕΑΣ ΡΕΥΣΤΩΝ
ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΟ ΘΕΡΜΙΚΩΝ ΣΤΡΟΒΙΛΟΜΗΧΑΝΩΝ
ΜΟΝΑΔΑ ΠΑΡΑΛΛΗΛΗΣ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗΣ
ΡΕΥΣΤΟΔΥΝΑΜΙΚΗΣ & ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗΣ

Επίλυση Προβλημάτων Βελτιστοποίησης με Χρήση της Μεθόδου του Διαδοχικού Τετραγωνικού Προγραμματισμού (SQP) και Εφαρμογές

Καραμπέκιος Αναστάσιος

Επιβλέπων: Κυριάκος Χ. Γιαννάκογλου, Καθηγητής ΕΜΠ

Αθήνα, 2017

Περίληψη

Η διπλωματική αυτή εργασία πραγματεύεται τον προγραμματισμό και την πιστοποίηση αλγορίθμου βελτιστοποίησης μη-γραμμικών συναρτήσεων με περιορισμούς (γραμμικούς και μη-γραμμικούς) με τη μέθοδο του Διαδοχικού Τετραγωνικού Προγραμματισμού.

Η μέθοδος αυτή αποτελεί μία από τις σημαντικότερες μεθόδους βελτιστοποίησης με περιορισμούς στον τομέα της Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής, καθώς παράγει αξιόπιστα αποτελέσματα χωρίς να απαιτείται υπολογισμός των ακριβών δευτέρων παραγώγων της αντικειμενικής συνάρτησης, μειώνοντας δραστικά το υπολογιστικό κόστος. Χαρακτηριστικό της μεθόδου SQP είναι ο διαχωρισμός της επαναληπτικής διαδικασίας σε εξωτερικούς και εσωτερικούς βρόχους. Βασική ιδέα, λοιπόν, είναι η παραγωγή ενός τετραγωνικού μοντέλου του αρχικού προβλήματος βελτιστοποίησης σε κάθε εξωτερικό βρόχο και η επίλυση του με κάποια από τις γνωστές μεθόδους επίλυσης προβλημάτων βελτιστοποίησης με περιορισμούς τετραγωνικής μορφής, έτσι ώστε να υπολογιστεί η βέλτιστη διόρθωση του διανύσματος τιμών των μεταβλητών βελτιστοποίησης στον εξωτερικό βρόχο.

Στην εργασία αυτή παρουσιάζονται, αρχικά, τα μαθηματικά εργαλεία που είναι απαραίτητα για την κατανόηση της μεθόδου και χρησιμοποιούνται στον αλγόριθμο βελτιστοποίησης καθώς και η γενική δομή της μεθόδου που οδηγεί στη σύγκλιση της διαδικασίας. Στη συνέχεια, παρουσιάζεται, πρώτα η διαδικασία επίλυσης προβλημάτων με περιορισμούς ισότητας μόνο και ύστερα η μέθοδος του Ενεργού Συνόλου, η οποία είναι η μέθοδος βελτιστοποίησης που χρησιμοποιείται για την επίλυση του τετραγωνικού υποπροβλήματος που παράγεται σε κάθε εξωτερικό βρόχο στα προβλήματα με περιορισμούς ανισο-ισότητας. Εν συνεχεία, επιλύονται μαθηματικά προβλήματα με σκοπό την επαλήθευση λειτουργίας του αλγορίθμου, ενώ επιλύονται, τέλος, τέσσερις εφαρμογές

βελτιστοποίησης σε προβλήματα αεροδυναμικής.

NATIONAL TECHNICAL UNIVERSITY OF ATHENS
SCHOOL OF MECHANICAL ENGINEERING
FLUIDS DEPARTMENT
LABORATORY OF THERMAL TURBOMACHINES
PARALLEL CFD & OPTIMIZATION UNIT

Solution of Optimization Problems using the Sequential Quadratic Programming Method and Applications

Karampekios Anastasios

Advisor: Kyriakos C. Giannakoglou, Professor NTUA

Athens, 2017

Abstract

This diploma thesis is related to the development and assessment of an algorithm for the optimization of nonlinear functions under constraints (linear and non-linear) using the Sequential Quadratic Programming (SQP) method.

SQP is a constrained optimization method of great importance in Computational Fluid Dynamics, as it generates reliable results, without the need of computing exact second derivatives of the objective function, reducing thus the computational cost. Splitting the algorithmic process in outer and inner iterations is a basic feature of the SQP method. The basic idea of the method is the production of a quadratic model of the initial optimization problem in every external iteration and the solution of the quadratic model with a known method of Quadratic Programming, so as the optimal correction to the optimization variables for the external iteration to be computed.

Initially, in this diploma thesis, all the mathematical tools that are needed for the analysis of the method are presented, alongside with the general structure of the programmed algorithm. Subsequently, the Active-Set method is presented, which is used in optimization problems with inequality constraints for the solution of the quadratic subproblem in every outer iteration. Additionally, a number of mathematical problems is solved, aiming at the assessment of the optimization algorithm, while, finally, four optimization applications for aerodynamic problems are solved, in order that the algorithm will be tested, also, in real applications.

Ακρωνύμια

ΕΜΠ	Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο
ΕΘΣ	Εργαστήριο Θερμικών Στροβιλομηχανών
ΜΠΤΡ&Β	Μονάδα Παράλληλης Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής & Βελτιστοποίησης
ΥΡΔ	Υπολογιστική Ρευστοδυναμική
ΤΠ	Τετραγωνικός Προγραμματισμός
ΔΤΠ	Διαδοχικός Τετραγωνικός Προγραμματισμός
<hr/>	
CFD	Computational Fluid Dynamics
NTUA	National Technical University of Athens
PCOpt	Parallel CFD & Optimization unit
QP	Quadratic Programming
SQP	Sequential Quadratic Programming
BFGS	Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno
KKT	Karush-Kuhn-Tucker

Περιεχόμενα

Περιεχόμενα	ix
1 Εισαγωγή	1
1.1 Κατηγοριοποίηση προβλημάτων και μεθόδων βελτιστοποίησης	2
1.2 Δομή της Εργασίας	4
2 Βασικές Έννοιες Βελτιστοποίησης με Περιορισμούς	5
2.1 Συνάρτηση Lagrange και Συνθήκες Karush-Kuhn-Tucker(KKT)	5
2.2 Πρώτης Τάξης Αναγκαίες Συνθήκες	9
2.3 Η Μέθοδος Newton στη Βελτιστοποίηση	10
2.4 Επίλυση του Συστήματος Newton	13
2.4.1 Μέθοδος Μηδενικού Υποχώρου	14
2.5 Μέθοδοι Ανίχνευσης κατά Γραμμή σε προβλήματα με περιορισμούς	15
3 Η Μέθοδος του Διαδοχικού Τετραγωνικού Προγραμματισμού (SQP)	19
3.1 Εισαγωγή	19
3.2 Τετραγωνικό Υποπρόβλημα	20
3.3 Ο Αλγόριθμος Βελτιστοποίησης	21
3.4 Η Μέθοδος Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno(BFGS)	23
3.5 Η Μέθοδος SQP για Προβλήματα με Περιορισμούς Ισότητας	26
3.6 Μαθηματικές Εφαρμογές της Μεθόδου SQP σε Προβλήματα με Περιορισμούς Ισότητας	28

4	Τετραγωνικός Προγραμματισμός με τη Μέθοδο του Ενεργού	
	Συνόλου	37
4.1	Εισαγωγή	37
4.2	Μέθοδος Ενεργού Συνόλου Μη-Δεσμευτικής Κατεύθυνσης	41
4.2.1	Εύρεση Αρχικού Στάσιμου Σημείου	47
4.2.2	Εφαρμογές Τετραγωνικού Προγραμματισμού	49
5	Εφαρμογές Βελτιστοποίησης με τη μέθοδο SQP σε μαθημα-	
	τικά προβλήματα με περιορισμούς ανισο-ισότητας	57
5.1	Εφαρμογές σε Μαθηματικά Προβλήματα	58
6	Εφαρμογές Εξωτερικής Αεροδυναμικής με Χρήση της Με-	
	θόδου SQP	67
6.1	Εφαρμογή 1 - NACA 4510 - Περιορισμός Ισότητας	69
6.2	Εφαρμογή 2 - NACA 4510 - Γεωμετρικοί περιορισμοί	73
6.3	Εφαρμογή 3 - NACA0012	77
6.4	Εφαρμογή 4 - NACA8410	82
7	Σύνοψη - Συμπεράσματα - Προτάσεις για μελλοντική μελέτη	89
	Βιβλιογραφία	91

Κεφάλαιο 1

Εισαγωγή

Η αριθμητική βελτιστοποίηση, λόγω της ανάπτυξης και της τεχνολογικής προόδου των ηλεκτρονικών υπολογιστών, αποτελεί τα τελευταία 50 χρόνια ένα ακμάζον πεδίο έρευνας σε πληθώρα επιστημονικών τομέων, όπως η φυσική, η χημεία, οι οικονομικές επιστήμες και, φυσικά, η μηχανική. Η μείωση του υπολογιστικού κόστους με την πάροδο των ετών, δεν μειώνει την ανάγκη προόδου τεχνικών βελτιστοποίησης, αντίθετα την αυξάνει, καθώς αυτή απαιτείται να ακολουθήσει την πρόοδο της τεχνολογίας, που συνδυάζεται με την ανάγκη επίλυσης προβλημάτων, αυξανόμενου πλήθους και πολυπλοκότητας. Η αριθμητική βελτιστοποίηση αποτελεί θεμελιώδες εργαλείο για όλους τους τομείς της μηχανικής, καθώς η έρευνα και η ανάπτυξη στη σύγχρονη βιομηχανία βασίζεται στο μειωμένο κόστος μοντελοποίησης και βελτιστοποίησης προϊόντων και υπηρεσιών σε ηλεκτρονικό υπολογιστή πριν τη διαδικασία ελέγχου και παραγωγής.

Στον τομέα της αεροδυναμικής, τώρα, τα προβλήματα που αντιμετωπίζονται χαρακτηρίζονται ως μία δύσκολη κατηγορία προβλημάτων βελτιστοποίησης, καθώς αυτά εμπλέκουν ροϊκά μεγέθη, τα οποία επηρεάζουν άμεσα ή έμμεσα τη βελτιστοποίηση. Τα ροϊκά μεγέθη περιγράφονται από μερικές διαφορικές εξισώσεις και είναι συγχρόνως προβλήματα των οποίων η επίλυση είναι αρκετά χρονοβόρα. Για το λόγο αυτό, στην αεροδυναμική βελτιστοποίηση υπάρχει η ανάγκη χρήσης μεθόδων οι οποίες παράγουν αξιόπιστα αποτελέσματα, στο μικρότερο δυνατό χρόνο.

1.1 Κατηγοριοποίηση προβλημάτων και μεθόδων βελτιστοποίησης

Η διαδικασία της κατηγοριοποίησης στη βελτιστοποίηση είναι μία διαδικασία χωρίς απαραίτητα ξεκάθαρα αποτελέσματα, καθώς κάθε μέθοδος μπορεί να ενταχθεί σε διάφορες κατηγορίες ανάλογα με τον τρόπο που προσεγγίζει τη λύση, το χώρο στον οποίο την αναζητά ή ακόμα και το σύνολο στο οποίο αναζητά λύσεις, π.χ. στον Ακέραιο Προγραμματισμό (Integer Programming)[10] αναζητούνται λύσεις οι οποίες είναι μόνο ακέραιοι αριθμοί. Η συζήτηση στο Κεφάλαιο αυτό θα περιοριστεί μόνο σε δύο κατηγορίες προβλημάτων βελτιστοποίησης και μία μεθόδων βελτιστοποίησης, οι οποίες άλλωστε αφορούν και τη διπλωματική αυτή εργασία.

Η πρώτη κατηγοριοποίηση, που είναι πολύ χρήσιμη σε προβλήματα αεροδυναμικής, αφορά τη φύση των μεταβλητών βελτιστοποίησης που ορίζουν τις εξής κατηγορίες:

- **Βελτιστοποίηση Μεγέθους (Size Optimization).**

Οι μεταβλητές σχεδιασμού στην κατηγορία αυτή είναι μεγέθη, όπως μήκος, πάχος ή γωνία στοιχείου, των οποίων η μεταβολή δεν καθορίζει πλήρως τη γεωμετρία, καθώς αυτή ακολουθεί μία προκαθορισμένη τοπολογία-συνδεσμολογία. Η κατηγορία αυτή δίνει τη μικρότερη 'ελευθερία' στις μεταβλητές σχεδιασμού.

- **Βελτιστοποίηση Μορφής (Shape Optimization).**

Στην κατηγορία αυτή προβλημάτων, στην οποία εντάσσεται και η εργασία αυτή, το σύνολο των μεταβλητών σχεδιασμού επιτρέπει τη μεταβολή παραμέτρων, οι οποίες εκτός από το μέγεθος, καθορίζουν και τη μορφή της γεωμετρίας. Στην εργασία αυτή, για παράδειγμα, τα σημεία ελέγχου της καμπύλης Bezier αποτελούν τις μεταβλητές σχεδιασμού στα προβλήματα αεροδυναμικής, και η μετατόπιση τους κατά τη διαδικασία βελτιστοποίησης επηρεάζει άμεσα τη γεωμετρία του προβλήματος.

- **Βελτιστοποίηση Τοπολογίας (Topology Optimization).**

Η γενικότερη κατηγορία ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού, καθώς η μεταβολή αυτών μπορεί να μεταβάλλει ολόκληρη την τοπολογία του προβλήματος, αλλοιώνοντας την αρχική γεωμετρία [11].

Η δεύτερη κατηγοριοποίηση, που σχετίζεται με την ύπαρξη ή όχι περιορισμών, είναι η εξής:

- **Βελτιστοποίηση χωρίς Περιορισμούς (Unconstrained Optimization.)**

Στα προβλήματα χωρίς περιορισμούς αναζητείται η βέλτιστη τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης και η αναζήτηση γίνεται σε όλο το σύνολο των πιθανών λύσεων.

- **Βελτιστοποίηση με Περιορισμούς (Constrained Optimization).**

Η λύση στα προβλήματα αυτά περιορίζεται στο σύνολο των εφικτών λύσεων που ορίζουν οι περιορισμοί που τίθενται σε συναρτήσεις των μεταβλητών σχεδιασμού. Τα περισσότερα προβλήματα σε πραγματικές εφαρμογές είναι προβλήματα με περιορισμούς ποικίλου είδους. Τα προβλήματα αυτά κατηγοριοποιούνται, στη συνέχεια, με βάση το είδος των περιορισμών και χωρίζονται σε προβλήματα με περιορισμούς ισότητας, περιορισμούς ανισότητας, και με συνδυασμό και των δύο. Η μέθοδος του Διαδοχικού Τετραγωνικού Προγραμματισμού που χρησιμοποιείται στην εργασία αυτή επιλύει προβλήματα με οποιοδήποτε είδος περιορισμού.

Σε ότι αφορά της μεθόδους βελτιστοποίησης αυτές διακρίνονται σε δύο μεγάλες κατηγορίες:

- **Στοχαστικές Μέθοδοι Βελτιστοποίησης** Οι Στοχαστικές Μέθοδοι [13],[14] χαρακτηρίζονται από την αναζήτηση βέλτιστης τιμής παρέχοντας λύση για τυχαίες τιμές των μεταβλητών βελτιστοποίησης για κάθε λύση. Βασικό τους πλεονέκτημα είναι η δυνατότητα χρησιμοποίησή τους σε κάθε πρόβλημα βελτιστοποίησης ανεξάρτητα από τη μορφή του. Οι σύγχρονες στοχαστικές μέθοδοι, με βασικό τους εκπρόσωπο τους Εξελικτικούς Αλγορίθμους (Evolutionary Algorithm) [15] επιλέγουν τυχηματικά, και όχι τυχαία, υποψήφιες λύσεις, εκμεταλλευόμενες την αξιολόγηση προηγούμενων υπολογισμένων λύσεων και τη διαδικασία της εξέλιξης, παράγοντας τελικά λύσεις που οδηγούν αποτελεσματικά στη σύγκλιση της διαδικασίας βελτιστοποίησης.
- **Αιτιοκρατικές Μέθοδοι Βελτιστοποίησης** Οι Αιτιοκρατικές Μέθοδοι Βελτιστοποίησης λαμβάνουν πληροφορία για την κατεύθυνση μείωσης της αντικειμενικής συνάρτησης από την πρώτη ή τη δεύτερη παράγωγο της συνάρτησης ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού, υπολογίζοντας έτσι συνεχώς καλύτερες λύσεις έως τη σύγκλιση της διαδικασίας σε ακρότατο. Βασικό μειονέκτημα των αιτιοκρατικών μεθόδων είναι το γεγονός ότι το ακρότατο αυτό στο οποίο θα συγκλίνει η διαδικασία μπορεί να είναι τοπικό ακρότατο, αποτυγχάνοντας έτσι να εντοπίσει ολικό ακρότατο της αντικειμενικής συνάρτησης. Οι Αιτιοκρατικές Μέθοδοι οδηγούνται εν γένει σε σύγκλιση σε λιγότερες επαναλήψεις από τις Στοχαστικές Μεθόδους λόγω του υπολογισμού αποτελεσματικών μετατοπίσεων, υστερούν σε κόστος υπολογισμού, όμως, των παραγώγων, καθώς και στην εξασφάλιση εντοπισμού ολικού ακρότατου. Οι Στοχαστικές Μέθοδοι Βελτιστοποίησης αντίθετα εξασφαλίζουν την εύρεση ολικού ακρότατου, με κόστος όμως τον μεγαλύτερο αριθμό επαναλήψεων.

Η μέθοδος Διαδοχικού Τετραγωνικού Προγραμματισμού που χρησιμοποιείται στην εργασία αυτή είναι αιτιοκρατική μέθοδος βελτιστοποίησης και κάνει χρήση πρώτων και δεύτερων παραγώγων (προσεγγιστικών όπως θα αναλυθεί στη συνέχεια) της αντικειμενικής συνάρτησης.

1.2 Δομή της Εργασίας

Η δομή της διπλωματικής εργασίας αυτής είναι η ακόλουθη:

- **Κεφάλαιο 2:** Παρουσιάζονται βασικά μαθηματικά εργαλεία για τη βελτιστοποίηση με περιορισμούς, όπως η συνάρτηση Lagrange, οι συνθήκες Karush-Kuhn-Tucker που αποτελούν κριτήριο τερματισμού και η μέθοδος Newton, εργαλεία που χρησιμοποιούνται στη μέθοδο SQP και βοηθούν στην κατανόηση της.
- **Κεφάλαιο 3:** Παρουσιάζεται η βασική δομή της μεθόδου SQP, ο αλγόριθμος βελτιστοποίησης σε διάγραμμα ροής και η δημιουργία του τετραγωνικού υποπροβλήματος. Ακόμα παρουσιάζεται η μέθοδος BFGS για τον υπολογισμό προσεγγιστικών δευτέρων παραγώγων και επιλύονται μαθηματικά προβλήματα για προβλήματα βελτιστοποίησης με περιορισμούς ισότητας.
- **Κεφάλαιο 4:** Παρουσιάζεται η μέθοδος του Ενεργού Συνόλου που επιλύει προβλήματα Τετραγωνικού Προγραμματισμού και χρησιμοποιείται για την επίλυση του τετραγωνικού υποπροβλήματος σε κάθε εξωτερικό βρόχο της μεθόδου SQP σε προβλήματα με περιορισμούς ανισο-ισότητας. Επιλύονται, ακόμα, μαθηματικά προβλήματα Τετραγωνικού Προγραμματισμού.
- **Κεφάλαιο 5:** Επιλύονται μαθηματικά προβλήματα βελτιστοποίησης μη-γραμμικών συναρτήσεων με μη-γραμμικούς περιορισμούς με τη μέθοδο SQP.
- **Κεφάλαιο 6:** Εφαρμογές βελτιστοποίησης με τη μέθοδο SQP για προβλήματα εξωτερικής αεροδυναμικής. Επιλύεται, αρχικά, πρόβλημα μεγιστοποίησης του συντελεστή άνωσης σε αεροτομή NACA4510 με περιορισμό ισότητας τη διατήρηση σταθερού συντελεστή αντίστασης. Στη συνέχεια, επιλύεται το ίδιο πρόβλημα προσθέτοντας επιπλέον γεωμετρικούς περιορισμούς ανισο-ισότητας. Στη τρίτη εφαρμογή ελαχιστοποιείται ο συντελεστής αντίστασης συμμετρικής αεροτομής NACA0012 υπό σταθερό συντελεστή άνωσης και περιορισμούς ανισο-ισότητας που είναι όλοι ενεργοί στο σημείο εκκίνησης της βελτιστοποίησης, ενώ τέλος στην τέταρτη εφαρμογή ελαχιστοποιείται ο συντελεστής αντίστασης της αεροτομής NACA8410 υπό γεωμετρικούς περιορισμούς ανισο-ισότητας και περιορισμό ισότητας μία συνάρτηση-στόχο για το συντελεστή άνωσης.
- **Κεφάλαιο 8:** Συνοψίζονται τα συμπεράσματα που αφορούν τις περιπτώσεις που εξετάστηκαν στην εργασία και προτείνονται κατευθύνσεις προς τις οποίες μπορεί να κινηθεί κάποιος που θα ήθελε να συνεχίσει τη μελέτη πάνω στα θέματα που αναλύθηκαν εδώ.

Κεφάλαιο 2

Βασικές Έννοιες

Βελτιστοποίησης με Περιορισμούς

2.1 Συνάρτηση Lagrange και Συνθήκες Karush-Kuhn-Tucker (KKT)

Βασικό χαρακτηριστικό των προβλημάτων βελτιστοποίησης σε πραγματικές εφαρμογές είναι η ύπαρξη περιορισμοί και βασικό πρόβλημα ο τρόπος επιβολής τους. Η ύπαρξη περιορισμών ισότητας ή/και ανισότητας τροποποιεί την προς ελαχιστοποίηση ή μεγιστοποίηση αντικειμενικής συνάρτησης. Ένας πολύ εύκολος τρόπος εισαγωγής των περιορισμών στην αντικειμενική συνάρτηση είναι η αφαίρεση τους από τη συνάρτηση-στόχο με χρήση κατάλληλων συντελεστών. Έστω, λοιπόν, το πρόβλημα βελτιστοποίησης

$$\min_{\vec{x} \in \mathbb{R}^N} f(\vec{x}) \quad (2.1)$$

υπό τους περιορισμούς ισότητας ή/και ανισο-ισότητας

$$\begin{aligned} c_i(\vec{x}) &= 0, \forall i \in E \\ c_i(\vec{x}) &\geq 0, \forall i \in I \end{aligned} \quad (2.2)$$

Ορίζεται ως συνάρτηση Lagrange, η συνάρτηση

$$\mathcal{L}(\vec{x}, \lambda_i) = f(\vec{x}) - \sum_{i \in E \cup I} \lambda_i c_i(\vec{x}) \quad (2.3)$$

όπου λ_i είναι οι πολλαπλασιαστές Lagrange που αντιστοιχούν σε κάθε περιορισμό ισότητας ή ανισο-ισότητας. Το σύνολο E είναι το σύνολο τιμών του δείκτη i για τους περιορισμούς ισότητας (Equality Constraints) ενώ το σύνολο I είναι το αντίστοιχο σύνολο για τους περιορισμούς ανισο-ισότητας (Inequality Constraints).

Κάθε μέθοδος βελτιστοποίησης υπό περιορισμούς επιχειρεί τον εντοπισμό ενός διάνυσματος \vec{x} το οποίο ελαχιστοποιεί (ή μεγιστοποιεί ανάλογα τη μέθοδο) την αντικειμενική συνάρτηση, αλλά είναι συγχρόνως αποδεκτή λύση ως προς τους περιορισμούς.

Αποδεκτή λύση ονομάζεται κάθε σημείο του χώρου βελτιστοποίησης που ικανοποιεί συγχρόνως όλους τους περιορισμούς είτε ισότητας είτε ανισο-ισότητας.

Ακολουθεί ο ορισμός των ενεργών και των ανενεργών περιορισμών ανισο-ισότητας. Ορίζεται λοιπόν ως ενεργός ένας περιορισμός ανισο-ισότητας που ικανοποιείται ως ισότητα, ισχύει δηλαδή για ένα διάνυσμα \vec{x} , $c_i(\vec{x}) = 0$, και ως ανενεργός όταν ικανοποιείται ως καθαρή ανισότητα, δηλαδή ισχύει $c_i(\vec{x}) > 0$.

Με αφορμή τα παραπάνω, εισάγεται και ο ορισμός του Ενεργού Συνόλου (Active Set) που είναι σημαντικός για την ανάλυση που θα ακολουθήσει σε επόμενα κεφάλαια.

Το Ενεργό Σύνολο $\mathcal{A}(\vec{x})$, σε οποιοδήποτε αποδεκτό σημείο \vec{x} , αποτελείται από τους δείκτες των περιορισμών ισότητας στο σύνολο E και τους δείκτες των περιορισμών ανισότητας στο σύνολο I για τους οποίους ισχύει $c_i(\vec{x}) = 0$. Δηλαδή

$$\mathcal{A}(\vec{x}) = E \cup \{i \in I \mid c_i(\vec{x}) = 0\}$$

Για να γίνει κατανοητή η χρήση της συνάρτησης Lagrange τίθεται αρχικά προς ελαχιστοποίηση η συνάρτηση $f(\vec{x})$ με έναν περιορισμό ισότητας. Ορίζεται, λοιπόν, το πρόβλημα

$$\begin{aligned} \min_{\vec{x} \in \mathbb{R}^N} f(\vec{x}) \\ \text{υπό τον περιορισμό } c(\vec{x}) = 0 \end{aligned} \quad (2.4)$$

Έστω \vec{x}^* ένα διάνυσμα τιμών των μεταβλητών βελτιστοποίησης. Για να είναι το \vec{x}^* βέλτιστη λύση του προβλήματος 2.4, πρέπει να μην υπάρχει διάνυσμα \vec{p} του οποίου το εσωτερικό γινόμενο με την κλίση της συνάρτησης περιορισμού ισότητας

στο σημείο \vec{x}^* να είναι μηδέν και, συγχρόνως, το εσωτερικό γινόμενο του ίδιου διανύσματος κατεύθυνσης με την κλίση της αντικειμενικής συνάρτησης στο ίδιο σημείο να είναι αρνητικό. Με άλλα λόγια, τοπικά βέλτιστη λύση είναι εκείνη στην οποία δεν υπάρχει κατεύθυνση προς την οποία θα μειώνεται η αντικειμενική συνάρτηση και, συγχρόνως, συνεχίζει να ικανοποιείται ο περιορισμός ισότητας. Μαθηματικά, δεν υπάρχει κατεύθυνση \vec{p} που να συνεχίζει να ικανοποιεί συγχρόνως τις σχέσεις

$$\begin{aligned}\vec{p}^T \nabla c(\vec{x}^*) &= 0, \\ \vec{p}^T \nabla f(\vec{x}^*) &< 0\end{aligned}\tag{2.5}$$

Ισοδύναμη με τις 2.5 είναι η εξίσωση

$$\nabla f(\vec{x}^*) = \lambda^* \nabla c(\vec{x}^*)\tag{2.6}$$

η οποία επιβάλλει τα διανύσματα $\nabla f(\vec{x}^*)$ και $\nabla c(\vec{x}^*)$ να είναι συγγραμμικά, χωρίς το πρόσημο του συντελεστή Lagrange λ^* να έχει σημασία, άρα μπορεί να έχει είτε θετική είτε αρνητική τιμή. Εάν τα διανύσματα δεν είναι συγγραμμικά υπάρχει κατεύθυνση \vec{p} για την οποία ικανοποιούνται συγχρόνως οι σχέσεις 2.5, που σημαίνει πως υπάρχει κατεύθυνση \vec{p} που οδηγεί σε μικρότερη τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης, με το νέο σημείο-λύση να παραμένει αποδεκτό.

Εάν τεθεί, τώρα, προς ελαχιστοποίηση η συνάρτηση

$$\mathcal{L} = f(\vec{x}) - \lambda c(\vec{x})\tag{2.7}$$

στο ζητούμενο στάσιμο σημείο της η κλίση της θα μηδενίζεται. Θα ισχύει δηλαδή

$$\nabla_x \mathcal{L}(\vec{x}, \lambda) = \nabla f(\vec{x}) - \lambda \nabla c(\vec{x}) = 0\tag{2.8}$$

η οποία ικανοποιείται όταν ισχύει η σχέση 2.6. Προκύπτει, δηλαδή, ότι ένα στάσιμο σημείο της εξίσωσης Lagrange ικανοποιεί την εξίσωση 2.6 και είναι, άρα, τοπική βέλτιστη λύση του προβλήματος 2.4.

Αναγκαία συνθήκη ώστε ένα διάνυσμα \vec{x}^* να αποτελεί βέλτιστη λύση στο πρόβλημα 2.1, όταν οι περιορισμοί είναι περιορισμοί ισότητας είναι, εκεί, τα διανύσματα $\nabla f(\vec{x}^*)$ και $\nabla c_i(\vec{x}^*)$ να είναι συγγραμμικά. Το πρόσημο του πολλαπλασιαστή Lagrange στην περίπτωση του περιορισμού ισότητας είναι αδιάφορο.

Έστω, τώρα, το πρόβλημα

$$\begin{aligned} & \min_{\vec{x} \in \mathbb{R}} f(\vec{x}) \\ & \text{υπό τον περιορισμό } c(\vec{x}) \geq 0 \end{aligned} \quad (2.9)$$

όπου c είναι ένας περιορισμός ανισο-ισότητας. Ομοίως με την ανάλυση που προηγήθηκε για περιορισμό ισότητας, εάν το διάνυσμα \vec{x}^* είναι τοπικό ακρότατο της αντικειμενικής συνάρτησης, πρέπει να μην υπάρχει διάνυσμα κατεύθυνσης \vec{p} για το οποίο να ισχύει η ανισότητα

$$\nabla f(\vec{x}^*)^T \vec{p} < 0$$

Παράλληλα, πρέπει να παραμένει αποδεκτή η λύση ως προς τον περιορισμό, δηλαδή να ισχύει η πρώτη τάξης συνθήκη

$$c(\vec{x}^* + \vec{p}) \approx c(\vec{x}^*) + \nabla c(\vec{x}^*)^T \vec{p} \geq 0$$

όπου χρησιμοποιήθηκε η σειρά Taylor με αποκοπή στον όρο πρώτης τάξης. Πρέπει, λοιπόν, να μην υπάρχει διάνυσμα \vec{p} που να ικανοποιεί συγχρόνως τις σχέσεις

$$\begin{aligned} c(\vec{x}^*) + \vec{p}^T \nabla c(\vec{x}^*) & \geq 0 \\ \vec{p}^T \nabla f(\vec{x}^*) & < 0 \end{aligned} \quad (2.10)$$

Κατά την αναζήτηση διανύσματος κατεύθυνσης που να ικανοποιεί τις εξισώσεις 2.10 διακρίνονται δύο περιπτώσεις. Μία κατά την οποία ο περιορισμός ανισο-ισότητας ικανοποιείται αυστηρά, δηλαδή ο περιορισμός ανισο-ισότητας είναι ανενεργός και ισχύει $c(\vec{x}^*) > 0$ και μία όταν ο περιορισμός ανισότητας είναι ενεργός, δηλαδή ισχύει $c(\vec{x}^*) = 0$.

Στην πρώτη περίπτωση, όπου $c(\vec{x}^*) > 0$ για το διάνυσμα \vec{x}^* , κάθε μικρή μετατόπιση \vec{p} ικανοποιεί την πρώτη από τις εξισώσεις 2.10, καθώς υπάρχει περιθώριο να κινηθεί προς ένα άλλο σημείο στο οποίο ο περιορισμός θα γίνει ενεργός. Στην περίπτωση $\nabla f(\vec{x}) \neq 0$, υπάρχει διάνυσμα \vec{p} που ικανοποιεί τις εξισώσεις 2.10 θέτοντας

$$\vec{p} = -a \nabla f(\vec{x})$$

για κάποια θετική ποσότητα a .

Στη δεύτερη περίπτωση, ο περιορισμός ανισο-ισότητας είναι ενεργός στο \vec{x}^* , άρα ισχύει

$c(\vec{x}^*) = 0$. Οι σχέσεις 2.10 μετατρέπονται τώρα στις

$$\begin{aligned} \vec{p}^T \nabla c(\vec{x}^*) &\geq 0 \\ \vec{p}^T \nabla f(\vec{x}^*) &< 0 \end{aligned} \quad (2.11)$$

Η πρώτη από τις σχέσεις 2.11 ορίζει έναν κλειστό υποχώρο ενώ η δεύτερη έναν ανοιχτό υποχώρο. Η τομή των δύο υποχώρων είναι κενός υποχώρος μόνο όταν τα διανύσματα $\nabla f(\vec{x})$ και $\nabla c(\vec{x})$ είναι συγγραμμικά και ομόρροπα που συμβαίνει όταν

$$\nabla f(\vec{x}) = \lambda \nabla c(\vec{x}) \quad (2.12)$$

για οποιοδήποτε $\lambda \geq 0$.

Όταν υπάρχει περιορισμός ανισο-ισότητας το πρόσημο του αντίστοιχου πολλαπλασιαστή Lagrange έχει σημασία καθώς, στην περίπτωση $\lambda < 0$, τα διανύσματα $\nabla f(\vec{x})$ και $\nabla c(\vec{x})$ είναι αντίρροπα και, πλέον, το \vec{x}^* δεν αποτελεί λύση των εξισώσεων 2.11.

Από το συνδυασμό των δύο περιπτώσεων προκύπτει ότι σε στάσιμο σημείο \vec{x}^* της συνάρτησης Lagrange ισχύει

$$\nabla_x \mathcal{L}(\vec{x}^*, \lambda^*) = 0 \quad (2.13)$$

για κάποιο $\lambda^* \geq 0$ εάν ο περιορισμός ανισο-ισότητας είναι ανενεργός στο σημείο εκείνο και για οιαδήποτε τιμή του λ^* εάν ο περιορισμός ανισο-ισότητας είναι ενεργός.

Ακόμα μία συνθήκη που πρέπει να ικανοποιείται σε στάσιμο σημείο είναι η

$$\lambda^* c(\vec{x}^*) = 0 \quad (2.14)$$

Η συνθήκη 2.14 ονομάζεται συνθήκη συμπληρωματικότητας (complementarity condition) και ορίζει ότι ο πολλαπλασιαστής Lagrange του περιορισμού ανισο-ισότητας είναι μηδέν όταν ο περιορισμός είναι ανενεργός και λαμβάνει θετική τιμή μόνο όταν ο περιορισμός είναι ίσος με το μηδέν.

2.2 Πρώτης Τάξης Αναγκαίες Συνθήκες

Όλα όσα αναφέρθηκαν στην παράγραφο για τους περιορισμούς ισότητας και ανισότητας μπορούν να συνοψιστούν στη μορφή θεωρήματος για τη γενική περίπτωση που έχουμε

περισσότερους περιορισμούς και από τα δύο είδη. Ισχύει:

Εάν το διάνυσμα \vec{x}^* είναι τοπικό ακρότατο του προβλήματος 2.1, τότε υπάρχει ένα διάνυσμα πολλαπλασιαστών Lagrange $\vec{\lambda}^*$ με συνιστώσες λ_i^* , τέτοιο ώστε να ισχύουν

$$\nabla \mathcal{L}(\vec{x}^*, \vec{\lambda}^*) = 0 \quad (2.15\alpha')$$

$$c_i(\vec{x}^*) = 0, \forall i \in E \quad (2.15\beta')$$

$$c_i(\vec{x}^*) \geq 0, \forall i \in I \quad (2.15\gamma')$$

$$\lambda_i^* \geq 0, \forall i \in I \quad (2.15\delta')$$

$$\lambda_i c_i(\vec{x}^*) = 0, \forall i \in E \cup I \quad (2.15\epsilon')$$

Οι εξισώσεις 2.15 είναι γνωστές ως συνθήκες **Karush-Kuhn-Tucker** ή **KKT**. Οι KKT αναφέρονται συχνά και ως πρώτης τάξης αναγκαίες συνθήκες. [1].

2.3 Η Μέθοδος Newton στη Βελτιστοποίηση

Έστω το πρόβλημα βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς

$$\min_{\vec{x} \in \mathbb{R}^n} f(\vec{x}) \quad (2.16)$$

Κάθε μέθοδος αιτιοκρατικής βελτιστοποίησης έχει ως στόχο τον εντοπισμό ενός διανύσματος κατεύθυνσης \vec{p} , το οποίο ανανεώνει το τρέχον διάνυσμα των μεταβλητών βελτιστοποίησης \vec{x} σύμφωνα με τη σχέση

$$\vec{x}^{new} = \vec{x}^{old} + \vec{p}$$

έτσι ώστε να μειώνεται η τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης στο σημείο \vec{x}^{new} . Για το νέο διάνυσμα \vec{x}^{new} πρέπει να ισχύει δηλαδή $f(\vec{x}^{new}) < f(\vec{x}^{old})$. Η επαναληπτική

διαδικασία αυτή αρχίζει από οποιοδήποτε τυχαίο διάνυσμα \vec{x}^0 και τερματίζεται όταν ικανοποιηθεί ένα κριτήριο σύγκλισης. Στην περίπτωση βελτιστοποίησης με περιορισμούς το διάνυσμα κατεύθυνσης \vec{p} πρέπει επιπρόσθετα να οδηγεί προς ένα σημείο που θα ικανοποιεί τελικά τους περιορισμούς του προβλήματος.

Μία πολύ διαδεδομένη μέθοδος υπολογισμού του διανύσματος κατεύθυνσης \vec{p} είναι η μέθοδος Newton [16]. Για την περίπτωση της βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς, σχέση 2.16, το ανάπτυγμα Taylor με αποκοπή μετά τον όρο 2ης τάξης δίνεται από τη σχέση

$$f(\vec{x}^{old} + \vec{p}) \approx f(\vec{x}^{old}) + f'(\vec{x}^{old})\vec{p} + \frac{1}{2}\vec{p}^T f''(\vec{x}^{old})\vec{p} \quad (2.17)$$

Για να είναι το νέο διάνυσμα των μεταβλητών βελτιστοποίησης $\vec{x}^{new} = \vec{x}^{old} + \vec{p}$ τοπικό ελάχιστο της συνάρτησης f πρέπει η πρώτη παράγωγός της $f(\vec{x}^{old} + \vec{p})$ ως προς \vec{p} να ισούται με 0. Πρέπει, δηλαδή, να ισχύει

$$\frac{d}{d\vec{p}}(f(\vec{x}^{old}) + f'(\vec{x}^{old})\vec{p} + \frac{1}{2}\vec{p}^T f''(\vec{x}^{old})\vec{p}) = f'(\vec{x}^{old}) + f''(\vec{x}^{old})\vec{p} = 0 \quad (2.18)$$

Η λύση της εξίσωσης 2.18 ως προς το διάνυσμα κατεύθυνσης \vec{p} , το οποίο ονομάζεται και βήμα Newton είναι η

$$\vec{p} = \frac{-f'(\vec{x}^{old})}{f''(\vec{x}^{old})} \quad (2.19)$$

Εάν η συνάρτηση f είναι δύο φορές παραγωγίσιμη, η τιμή της στο σημείο \vec{x}^{new} είναι τοπικό βέλτιστο της συνάρτησης, για το οποίο θα ισχύει

$$f'(\vec{x}^{new}) = 0$$

Στην περίπτωση βελτιστοποίησης με περιορισμούς, όπου το πρόβλημα δίνεται από τη σχέση 2.1, πρέπει, επιπλέον, να αναζητηθεί βέλτιστη κατεύθυνση $\Delta vec\lambda$ και για τις τιμές των πολλαπλασιαστών Lagrange που αντιστοιχούν στους περιορισμούς. Η μέθοδος Newton, λοιπόν, πρέπει να εφαρμοστεί στη συνάρτηση Lagrange που δίνεται από τη σχέση 2.3, και όχι στην αντικειμενική συνάρτηση f . Ορίζεται ως K το Εσσιανό μητρώο (Hessian Matrix) της συνάρτησης Lagrange ως προς τα διανύσματα \vec{x} και $\vec{\lambda}$

$$K = \begin{bmatrix} \frac{d^2 \mathcal{L}}{d\vec{x}^2} & \frac{d^2 \mathcal{L}}{d\vec{x}d\vec{\lambda}} \\ \frac{d^2 \mathcal{L}}{d\vec{\lambda}d\vec{x}} & \frac{d^2 \mathcal{L}}{d\vec{\lambda}^2} \end{bmatrix}$$

Ως $\mathcal{J}_{\mathcal{L}}$ ορίζεται το Ιακωβιανό μητρώο (Jacobian Matrix) της συνάρτησης Lagrange ως προς τα διανύσματα \vec{x} και $\vec{\lambda}$

$$\vec{\mathcal{J}}_{\mathcal{L}} = \begin{bmatrix} \frac{d\mathcal{L}}{d\vec{x}} \\ \frac{d\mathcal{L}}{d\vec{\lambda}} \end{bmatrix}$$

Το βήμα Newton της συνάρτησης Lagrange υπολογίζεται σύμφωνα με τη σχέση 2.19 από τη σχέση

$$K \vec{p} = -\vec{\mathcal{J}}_{\mathcal{L}} \quad (2.20)$$

,όπου με \vec{p} συμβολίζεται, πλέον, το διάνυσμα μεταβολής των τιμών των μεταβλητών βελτιστοποίησης και των πολλαπλασιαστών Lagrange.

Στο σημείο αυτό επαναλαμβάνεται για λόγους πληρότητας η συνάρτηση Lagrange για οποιοδήποτε είδος περιορισμού (είτε ισότητας είτε ανισο-ισότητας)

$$\mathcal{L}(\vec{x}, \vec{\lambda}_i) = f(\vec{x}) - \sum_{i \in E \cup \mathcal{I}} \lambda_i c_i(\vec{x})$$

και για αυτήν υπολογίζονται οι παράγωγοι πρώτης και δεύτερης τάξης ως προς τα διανύσματα \vec{x} και $\vec{\lambda}$

$$\frac{d\mathcal{L}}{d\vec{x}} = \frac{df(\vec{x})}{d\vec{x}} - \frac{d\vec{c}}{d\vec{x}} \vec{\lambda} = \vec{g} - \vec{\mathcal{J}}_c^T \vec{\lambda} \quad (2.21\alpha')$$

$$H(\vec{x}, \vec{\lambda}) = \frac{d^2\mathcal{L}}{d\vec{x}^2} \quad (2.21\beta')$$

$$\frac{d\mathcal{L}}{d\vec{\lambda}} = -\vec{c} \quad (2.21\gamma')$$

$$\frac{d^2\mathcal{L}}{d\vec{x}d\vec{\lambda}} = -\frac{d\vec{c}}{d\vec{x}} = -\vec{\mathcal{J}}_c \quad (2.21\delta')$$

$$\frac{d^2\mathcal{L}}{d\vec{\lambda}^2} = 0 \quad (2.21\epsilon')$$

Αντικαθιστώντας στη σχέση 2.20 τις ποσότητες που υπολογίζονται στις εξισώσεις 2.21

προκύπτει το βήμα Newton για τα διανύσματα \vec{x} και $\vec{\lambda}$ από την επίλυση του συστήματος εξισώσεων

$$\begin{bmatrix} H(\vec{x}, \vec{\lambda}) & -\vec{J}_c^T \\ -\vec{J}_c & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta\vec{x} \\ \Delta\vec{\lambda} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \vec{g} - \vec{J}_c^T \vec{\lambda} \\ -\vec{c} \end{bmatrix} \quad (2.22)$$

Το σύστημα εξισώσεων 2.22 αποτελεί το σύστημα Newton του προβλήματος με περιορισμούς.

Το αν το βήμα Newton οδηγεί σε μικρότερη τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης, οπότε η μέθοδος λειτουργεί ως μέθοδος καθόδου, ελέγχεται υπολογίζοντας το πρόσημο του γινομένου $\vec{p}^T \nabla f(\vec{x}^{old})$. Ισχύει

$$\vec{p}^T \nabla f(\vec{x}^{old}) = \vec{p}^T (-\nabla^2 f(\vec{x}^{old}) \vec{p}) \quad (2.23)$$

Εάν το Εσσιανό μητρώο H της συνάρτησης f είναι θετικά ορισμένο (positive definite), τότε ισχύει σίγουρα $\vec{p}^T (-\nabla^2 f(\vec{x}^{old}) \vec{p}) < 0$, οπότε ισχύει και $\vec{p}^T \nabla f(\vec{x}^{old}) < 0$, άρα η τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης μειώνεται. Εάν αυτό δε συμβαίνει, τότε υπάρχει πιθανότητα το βήμα Newton να αποκλίνει. Τρόποι υπολογισμού του Εσσιανού μητρώου της συνάρτησης f συζητούνται στην ενότητα 3.4.

2.4 Επίλυση του Συστήματος Newton

Στην προηγούμενη ενότητα, όπου παρουσιάστηκε η μέθοδος Newton, προέκυψε προς επίλυση το σύστημα εξισώσεων 2.22. Εάν αντικατασταθούν οι μεταβλητές $\vec{\lambda}^{old}$ από τα διανύσματα $\vec{\lambda}^{new}$ και $\Delta\vec{\lambda}$ σύμφωνα με τη σχέση

$$\vec{\lambda}^{new} = \vec{\lambda}^{old} + \Delta\vec{\lambda}$$

προκύπτει το νέο σύστημα εξισώσεων

$$\begin{bmatrix} H(\vec{x}, \vec{\lambda}) & -\vec{J}_c^T \\ \vec{J}_c & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta\vec{x} \\ \Delta\vec{\lambda} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \vec{g} - \vec{J}_c^T \vec{\lambda}^{old} \\ \vec{c} \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} H(\vec{x}, \vec{\lambda}) & -\vec{J}_c^T \\ \vec{J}_c & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta\vec{x} \\ \vec{\lambda}^{new} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \vec{g} \\ \vec{c} \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} H(\vec{x}, \vec{\lambda}) & \vec{J}_c^T \\ \vec{J}_c & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta \vec{x} \\ -\vec{\lambda}^{new} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \vec{g} \\ \vec{c} \end{bmatrix} \quad (2.24)$$

Στη συνέχεια θα αναπτυχθεί η μέθοδος Μηδενικού Υποχώρου (Null-Space Method), που αποτελεί βασική μέθοδο επίλυσης του συστήματος Newton και θα χρησιμοποιηθεί στη συνέχεια της εργασίας για την επίλυση του [2].

2.4.1 Μέθοδος Μηδενικού Υποχώρου

Η μέθοδος Μηδενικού Υποχώρου [17] προϋποθέτει ότι το μητρώο \mathcal{J}_c είναι πλήρους τάξης και το μητρώο $Z^T H Z$ είναι θετικά ορισμένο. Απαιτεί ακόμα γνώση του μητρώου Z που είναι η βάση μηδενικού υποχώρου του μητρώου \mathcal{J}_c , ισχύει δηλαδή για το Z ότι

$$Z^T \mathcal{J}_c = 0 \quad (2.25)$$

Η μέθοδος αυτή εκμεταλλεύεται τη δομή του συστήματος Newton για να το απεμπλέξει σε δύο μικρότερα συστήματα.

Έστω η διάσπαση του διανύσματος $\Delta \vec{x}$ σε δύο συνιστώσες $\Delta \vec{x}_Y$ και $\Delta \vec{x}_Z$. Ισχύει η σχέση

$$\Delta \vec{x} = Y \Delta \vec{x}_Y + Z \Delta \vec{x}_Z \quad (2.26)$$

όπου Z είναι το $N \times (N - M)$ μητρώο μηδενικού υποχώρου, Y οποιοδήποτε $(N \times N)$ μητρώο έτσι ώστε το μητρώο $\mathcal{J}_c Y$ να είναι μη-μοναδιαίο, $\Delta \vec{x}_Y$ ένα διάνυσμα διάστασης M και $\Delta \vec{x}_Z$ ένα διάνυσμα διάστασης $(N - M)$. Με N έχει συμβολιστεί το πλήθος των μεταβλητών βελτιστοποίησης και με M το πλήθος των περιορισμών. Το γινόμενο $Y \Delta \vec{x}_Y$ είναι λύση της εξίσωσης $\mathcal{J}_c \Delta \vec{x} = c$, ενώ το γινόμενο $Z \Delta \vec{x}_Z$ είναι μια μετατόπιση κατά μήκος των περιορισμών.

Αντικαθιστώντας το βήμα $\Delta \vec{x}$ όπως ορίζεται στη σχέση 2.26 στη δεύτερη εξίσωση του συστήματος 2.24 και απαλείφοντας τον όρο $Z^T \mathcal{J}_c$ που ισούται με μηδέν προκύπτει η εξίσωση

$$(\mathcal{J}_c Y) \Delta \vec{x}_Y = -\vec{c} \quad (2.27)$$

από όπου υπολογίζεται η συνιστώσα $\Delta \vec{x}_Y$. Εάν τώρα αντικατασταθεί το $\Delta \vec{x}$ και στην

πρώτη εξίσωση του συστήματος 2.24 προκύπτει

$$HY\Delta\vec{x}_Y + HZ\Delta\vec{x}_Z - \mathcal{J}_c^T \vec{\lambda}^{new} = -\vec{g}$$

και, πολλαπλασιάζοντας με Z^T ,

$$(Z^T HZ)\Delta\vec{x}_Z = -Z^T HY\Delta\vec{x}_Y - Z^T \vec{g} \quad (2.28)$$

Με υπολογισμένο το $\Delta\vec{x}_Y$, μπορεί το $\Delta\vec{x}_Z$ να υπολογιστεί κάνοντας παραγοντοποίηση Cholesky στο μητρώο $Z^T HZ$. Στη συνέχεια, υπολογίζεται το συνολικό βήμα $\Delta\vec{x} = Y\Delta\vec{x}_Y + Z\Delta\vec{x}_Z$ και για να υπολογιστούν και οι πολλαπλασιαστές Lagrange, αφού πολλαπλασιαστεί η πρώτη εξίσωση του συστήματος 2.24 με Y^T , επιλύεται ως προς τους πολλαπλασιαστές Lagrange το γραμμικό σύστημα

$$(\mathcal{J}_c Y)^T \vec{\lambda}^{new} = Y^T (\vec{g} + H\Delta\vec{x}) \quad (2.29)$$

2.5 Μέθοδοι Ανίχνευσης κατά Γραμμή σε προβλήματα με περιορισμούς

Όλες οι μέθοδοι βελτιστοποίησης που βασίζονται στην εύρεση βήματος Newton έχουν πολύ καλές τοπικές ιδιότητες, είναι δηλαδή πολύ αξιόπιστες όταν το τετραγωνικό μοντέλο κατά Taylor που δίνεται στη σχέση 2.17 είναι καλή προσέγγιση της αντικειμενικής συνάρτησης στο νέο σημείο (όταν πρακτικά το \vec{x}^{old} είναι κοντά στη λύση), δυσκολεύονται όμως στη σύγκλιση όταν εκκινούν μακριά από τη λύση, καθώς η αξιοπιστία του βήματος Newton αυτού εξαρτάται από την απόκλιση του τετραγωνικού μοντέλου που χρησιμοποιείται. Πρέπει λοιπόν να αναπτυχθούν τεχνικές που κατευθύνουν το πρόβλημα προς τη λύση ακόμα και όταν δεν διέπεται από τοπικές ιδιότητες.

Υπάρχουν δύο κύριες κατηγορίες τέτοιων τεχνικών. Οι μέθοδοι Ανίχνευσης κατά Γραμμή (Line Search Methods) και οι μέθοδοι Περιοχής Εμπιστοσύνης (Trust Region Methods) [18]. Και οι δύο μέθοδοι έχουν ως βασική ιδέα τη χρήση της κατεύθυνσης του υπολογισμένου βήματος με έλεγχο του μήκους του, λύνοντας ένα μονοδιάστατο πρόβλημα, ελαχιστοποιώντας τη βοηθητική συνάρτηση

$$\phi(a) = f(a\vec{p}_k + \vec{x}_k)$$

Η βοηθητική συνάρτηση, στην περίπτωση της βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς ταυτίζεται με την αντικειμενική συνάρτηση του προβλήματος. Στην περίπτωση της βελτιστοποίησης με περιορισμούς όμως η συνάρτηση πρέπει να περιλαμβάνει δύο συνήθως αντικρουόμενους στόχους, την ελαχιστοποίηση της αντικειμενικής συνάρτησης και την ικανοποίηση των περιορισμών. Η βοηθητική συνάρτηση λαμβάνει τότε τη μορφή

$$\phi(x) = f(\vec{x}) + P(\vec{x})$$

όπου P είναι μία συνάρτηση ποινής για τους μη τηρούμενους περιορισμούς. Η συνάρτηση P δηλαδή είναι μηδενική όταν ικανοποιούνται οι περιορισμοί και θετική στην αντίθετη περίπτωση. Ο ορισμός της βοηθητικής συνάρτησης ϕ ομοιάζει με αυτόν των συναρτήσεων ποινής διαφέρει όμως στο ότι η βοηθητική συνάρτηση δεν χρησιμοποιείται για τον υπολογισμό της κατεύθυνσης βήματος, όπως συμβαίνει με τις συναρτήσεις ποινής στις μεθόδους που τις χρησιμοποιούν, παρά χρησιμοποιείται ως εργαλείο εκτίμησης της ποιότητας του βήματος που έχει ήδη υπολογιστεί. Βασικό της πλεονέκτημα είναι η δυνατότητα ταχείας σύγκλισης που δίνει κοντά στη λύση του προβλήματος.

Υπάρχουν πολλές διαφορετικές βοηθητικές συναρτήσεις που αναφέρονται στη βιβλιογραφία, στην ανάλυση αυτή όμως θα χρησιμοποιηθεί η μη διαφορίσιμη επαυξημένη συνάρτηση

$$\phi_1(\vec{x}, \sigma) = f(\vec{x}) + \sigma \|c(\vec{x})^+\| \quad (2.30)$$

όπου η ποσότητα

$$\|c(\vec{x})^+\| = \begin{cases} c_i(\vec{x}) & \text{εάν } i \in E \\ \min(0, c_i(\vec{x})) & \text{εάν } i \in \mathcal{I} \end{cases} \quad (2.31)$$

Η συνάρτηση ϕ_1 ονομάζεται στη βιβλιογραφία και l_1 βοηθητική συνάρτηση [9].

Για να γίνει αποδεκτό ένα βήμα $\alpha_k p_k$ σε μία μέθοδο Ανίχνευσης κατά Γραμμή πρέπει να ισχύει η σχέση

$$\phi_1(\vec{x}_k + \alpha_k \vec{p}_k, \sigma_k) \leq \phi_1(\vec{x}_k, \sigma_k) + \eta \alpha_k D(\phi_1(\vec{x}_k, \sigma_k), \vec{p}_k) \quad (2.32)$$

όπου $\eta \in (0, 1)$ και με $D(\phi_1(x_k, \sigma), p_k)$ ορίζεται η παράγωγος κατεύθυνσης της ϕ_1 προς την κατεύθυνση \vec{p}_k . Η συνθήκη που επιβάλλει η 2.32 είναι αντίστοιχη της συνθήκης Armijo [2] για τη βελτιστοποίηση χωρίς περιορισμούς με την προϋπόθεση ότι η \vec{p}_k είναι κατεύθυνση μείωσης, δηλαδή ισχύει $D(\phi_1(\vec{x}_k, \sigma_k), \vec{p}_k) < 0$. Η συνθήκη Armijo

ορίζει ότι για να δίνει ένα βήμα α_k σημαντική μείωση σε μία αντικειμενική συνάρτηση φ , πρέπει να ισχύει

$$f(\vec{x}_k + \alpha \vec{p}_k) \leq f(\vec{x}_k) + \mu \alpha \nabla f_k^T \vec{p}_k$$

για κάποιο σταθερό $\mu \in (0, 1)$. Η συνθήκη $D(\phi_1(\vec{x}_k, \sigma), \vec{p}_k) < 0$ ισχύει όπως αποδεικνύει το παρακάτω θεώρημα εάν η τιμή του σ είναι αρκετά μεγάλη.

Θεώρημα

Έστω $\vec{p}, \vec{\lambda}$ και $\vec{\zeta}$ η μεταβολή των μεταβλητών βελτιστοποίησης, οι πολλαπλασιαστές Lagrange για τους περιορισμούς ισότητας και οι πολλαπλασιαστές Lagrange για τους περιορισμούς ανισότητας αντίστοιχα, όπως υπολογίζονται από την επίλυση του προβλήματος βελτιστοποίησης. Η παράγωγος κατά την κατεύθυνση \vec{p} της ϕ_1 ικανοποιεί τη σχέση

$$D(\phi_1(\vec{x}_k, \sigma), \vec{p}_k) = \nabla f_k^T \vec{p}_k - \sigma \|c(\vec{x})^+\| \quad (2.33)$$

Επίσης ισχύει, χωρίς να δίνεται η απόδειξη [4], ότι

$$D(\phi_1(\vec{x}_k, \sigma), \vec{p}_k) \leq -\vec{p}_k^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}_k \vec{p}_k - (\sigma - \|\vec{y}_{k+1}\|_\infty) \|c(\vec{x})^+\| \quad (2.34)$$

όπου $\|\vec{y}_{k+1}\|_\infty = \max(\|\vec{\lambda}_k\|, \|\vec{\zeta}_k\|)$.

Από τη σχέση 2.34 προκύπτει ότι το \vec{p}_k είναι η κατεύθυνση μείωσης της ϕ_1 αν ισχύουν $\vec{p}_k \neq 0$, $\nabla_{xx}^T \mathcal{L}_k$ θετικά ορισμένο και $\sigma > \|\vec{y}_{k+1}\|_\infty$. Τότε θα είναι $D(\phi_1(\vec{x}_k, \sigma), \vec{p}_k) \leq 0$. Ο προφανής τρόπος υπολογισμού του συντελεστή σ θα ήταν ο υπολογισμός του σε κάθε αξιολόγηση έτσι ώστε να ισχύει διαρκώς η σχέση $\sigma > \|\vec{y}_{k+1}\|_\infty$. Ένας πιο αποτελεσματικός τρόπος υπολογισμού του σ βασίζεται στην απαίτηση να είναι η παράγωγος κατεύθυνσης της συνάρτησης ϕ_1 επαρκώς αρνητική, δηλαδή

$$D(\phi_1(\vec{x}_k, \sigma), \vec{p}_k) = \nabla f_k^T \vec{p}_k - \sigma \|c(\vec{x})^+\| \leq -\rho \sigma \|c(\vec{x})^+\| \quad (2.35)$$

για $\rho \in (0, 1)$. Η ανισότητα αυτή ισχύει εάν

$$\mu \geq \frac{\nabla f_k^T \vec{p}_k}{(1 - \rho) \|c(\vec{x})^+\|} \quad (2.36)$$

Με τον τρόπο αυτό επιτυγχάνεται η μη-εξάρτηση της ποσότητας μ από τους πολλαπλασιαστές Lagrange. Η διαδικασία εύρεσης του βήματος α_k ξεκινά παίρνοντας την περίπτωση όπου ισούται με τη μονάδα και μειώνεται με επαναληπτική διαδικασία έως ότου ικανοποιήσει τη σχέση 2.32.

Κεφάλαιο 3

Η Μέθοδος του Διαδοχικού Τετραγωνικού Προγραμματισμού (SQP)

3.1 Εισαγωγή

Η μέθοδος του Διαδοχικού Τετραγωνικού Προγραμματισμού (Sequential Quadratic Programming method) είναι μία από τις αποτελεσματικότερες μεθόδους για την επίλυση προβλημάτων βελτιστοποίησης που αποτελούν υποπροβλήματα του γενικού προβλήματος βελτιστοποίησης με περιορισμούς που περιλαμβάνει γραμμικές και μη-γραμμικές συναρτήσεις περιορισμών και έχει τη μορφή

$$\begin{aligned} & \min_{\vec{x} \in \mathbb{R}^N} f(\vec{x}) \\ & \text{υπό τους περιορισμούς } \vec{l} \leq \begin{Bmatrix} \vec{x} \\ A\vec{x} \\ c(\vec{x}) \end{Bmatrix} \leq \vec{u} \end{aligned} \quad (3.1)$$

όπου η συνάρτηση f μπορεί να είναι είτε γραμμική είτε μη-γραμμική αντικειμενική συνάρτηση, το $c(\vec{x})$ είναι διάνυσμα μη-γραμμικών περιορισμών, το A είναι ένα μητρώο και τα \vec{l} και \vec{u} είναι τα διανύσματα των ορίων των περιορισμών. Εάν τα διανύσματα \vec{l} και \vec{u} είναι ίσα υποδηλώνουν προφανώς περιορισμό ισότητας.

Η μέθοδος του Διαδοχικού Τετραγωνικού Προγραμματισμού είναι μία μέθοδος που

επιλύει το πρόβλημα βελτιστοποίησης 3.1 υπολογίζοντας μία προσεγγιστική λύση σε μία σειρά από τετραγωνικά υποπρόβλήματα, στα οποία ελαχιστοποιείται ένα τετραγωνικό μοντέλο της αντικειμενικής συνάρτησης υπό τους γραμμικοποιημένους περιορισμούς του αρχικού προβλήματος.

Η μέθοδος SQP αποτελείται από εσωτερικές και εξωτερικές επαναλήψεις, όπου εσωτερικές ονομάζονται οι επαναλήψεις που απαιτούνται για την επίλυση του τετραγωνικού υποπρόβληματος και εξωτερικές ονομάζονται οι επαναλήψεις που ανανεώνουν το τετραγωνικό υποπρόβλημα, ενώ το πλήθος των τελευταίων ταυτίζεται με τον αριθμό των τετραγωνικών υποπροβλημάτων που επιλύονται.

Βασικό πλεονέκτημα των μεθόδων που βασίζονται στην SQP είναι ότι κατά την πρόοδο των εξωτερικών επαναλήψεων το εκάστοτε τετραγωνικό υποπρόβλημα επιτυγχάνει ταχεία σύγκλιση, καθώς ως αρχικοποίηση λαμβάνεται η βέλτιστη λύση του προηγούμενου υποπρόβληματος. Βασικό μειονέκτημα της μεθόδων αυτών είναι η αδυναμία τους να αξιοποιήσουν αποτελεσματικά τις δεύτερες παραγώγους της αντικειμενικής συνάρτησης (όταν αυτές είναι εύκολο να υπολογιστούν), καθώς εάν το μητρώο αυτών δεν είναι θετικά ορισμένο, τότε είναι πιθανό το τετραγωνικό υποπρόβλημα να μην επιτυγχάνει σύγκλιση [3],[4]. Για το λόγο αυτό, στη μέθοδο SQP δεν υπολογίζονται ακριβείς δεύτεροι παράγωγοι της αντικειμενικής συνάρτησης και οι δεύτεροι παράγωγοι που απαιτούνται κατά τη διαδικασία επίλυσης υπολογίζονται προσεγγιστικά. Η μη-απαίτηση υπολογισμού δευτέρων παραγώγων καθιστά τη μέθοδο SQP δημοφιλή σε εφαρμογές βελτιστοποίησης στην Υπολογιστική Ρευστοδυναμική, όπου ο υπολογισμός τους καθίσταται υπολογιστικά πολύ ακριβός.

3.2 Τετραγωνικό Υποπρόβλημα

Στην εισαγωγή του κεφαλαίου αυτού αναφέρθηκε ότι η μέθοδος SQP είναι μία μέθοδος που επιλύει το πρόβλημα βελτιστοποίησης 3.1 υπολογίζοντας μία προσεγγιστική λύση σε μία σειρά από τετραγωνικά υποπρόβλήματα, στα οποία ελαχιστοποιείται ένα τετραγωνικό μοντέλο της αντικειμενικής συνάρτησης υπό τους γραμμικοποιημένους περιορισμούς του αρχικού προβλήματος. Σε κάθε εξωτερική επανάληψη της αλγοριθμικής διαδικασίας, δηλαδή, πρέπει να χρησιμοποιηθεί ένα τετραγωνικό μοντέλο της αντικειμενικής συνάρτησης, το οποίο προκύπτει από το ανάπτυγμα Taylor αυτής με αποκοπή μετά τον όρο δεύτερης τάξης. Χωρίς βλάβη της γενικότητας και για το επόμενο του κεφαλαίου, θα συμβολίζονται όλοι οι περιορισμοί με τον ενιαίο συμβολισμό μη-γραμμικών περιορισμών $c(\vec{x})$, ο οποίος συμπεριλαμβάνει και τους γραμμικούς περιορισμούς της μορφής $A\vec{x}$ και τους περιορισμούς σε μορφή ορίων \vec{x} . Το δεξί μέλος \vec{l} και το αριστερό μέλος \vec{u} συμπεριλαμβάνονται στον ενιαίο συμβολισμό $c(\vec{x})$ και όλοι οι περιορισμοί γράφονται πια στη μορφή $c(\vec{x}) \geq 0$. Τέλος, ο δείκτης I θα υποδηλώνει τους περιορισμούς ανισο-ισότητας και ο δείκτης E τους περιορισμούς ισότητας, $c_I(\vec{x})$ και $c_E(\vec{x})$ αντίστοιχα.

Το τετραγωνικό μοντέλο της αντικειμενικής συνάρτησης δίνεται, λοιπόν, από τη σχέση

$$f(\vec{x}) \approx f(\vec{x}_0) + g^T \Delta \vec{x} + \frac{1}{2} \Delta \vec{x}^T B \Delta \vec{x} \quad (3.2)$$

όπου με g συμβολίζεται η κλίση της αντικειμενικής συνάρτησης ως προς το διάνυσμα των μεταβλητών βελτιστοποίησης \vec{x} και με B συμβολίζεται το Εσσιανό μητρώο της αντικειμενικής συνάρτησης ως προς το ίδιο διάνυσμα.

Οι περιορισμοί του προβλήματος γραμμικοποιούνται, επίσης, με ανάπτυγμα Taylor, η αποκοπή όμως εδώ πραγματοποιείται μετά τους όρους πρώτης τάξης, οπότε οι γραμμικοποιημένοι περιορισμοί του υποπροβλήματος έχουν τη μορφή

$$\begin{aligned} c_E(\vec{x}_0) + \mathcal{J}_E^T \Delta \vec{x} &= 0 \\ c_I(\vec{x}_0) + \mathcal{J}_I^T \Delta \vec{x} &\geq 0 \end{aligned} \quad (3.3)$$

όπου με \mathcal{J}_E και \mathcal{J}_I συμβολίζεται η κλίση των περιορισμών, ισότητας και ανισο-ισότητας αντίστοιχα, ως προς τις μεταβλητές βελτιστοποίησης.

Το τετραγωνικό υποπρόβλημα που τίθεται προς επίλυση για τον υπολογισμό της κατεύθυνσης για κάθε εξωτερική επανάληψη του προβλήματος βελτιστοποίησης είναι το

$$\begin{aligned} \min_{\vec{x} \in \mathbb{R}} \quad & g^T \Delta \vec{x} + \frac{1}{2} \Delta \vec{x}^T B \Delta \vec{x} \\ \text{υπό τους περιορισμούς} \quad & c_E(\vec{x}) + \mathcal{J}_E^T \Delta \vec{x} = 0 \\ & c_I(\vec{x}) + \mathcal{J}_I^T \Delta \vec{x} \geq 0 \end{aligned} \quad (3.4)$$

όπου με B συμβολίζεται το Εσσιανό μητρώο της συνάρτησης Lagrange ως προς τις μεταβλητές βελτιστοποίησης.

3.3 Ο Αλγόριθμος Βελτιστοποίησης

Εδώ θα παρουσιαστεί συνοπτικά η διαδικασία που ακολουθείται ως την εύρεση της βέλτιστης λύσης ενός προβλήματος με περιορισμούς με τη μέθοδο του SQP. Ως κριτήριο σύγκλισης επιλέγεται η ικανοποίηση των συνθηκών KKT, που δίνονται από τις σχέσεις 2.15.

Ο αλγόριθμος SQP για προβλήματα βελτιστοποίησης με περιορισμούς παίρνει γενικά την παρακάτω μορφή:

Βήμα 1 Επιλέγεται αρχική τιμή του διανύσματος των μεταβλητών σχεδιασμού \vec{x}_0 και αρχική τιμή του διανύσματος των πολλαπλασιαστών Lagrange $\vec{\lambda}_0$ (συνήθως μηδενική).

Βήμα 2 Υπολογίζονται οι αρχικές τιμές της αντικειμενικής συνάρτησης $f(\vec{x}_0)$, των περιορισμών $c(\vec{x}_0)$, της κλίσης της αντικειμενικής συνάρτησης g και τις κλίσης των περιορισμών \mathcal{J} .

Βήμα 3 Ελέγχεται η σύγκλιση της μεθόδου με τη βοήθεια των συνθηκών KKT στο σημείο $(\vec{x}_k, \vec{\lambda}_k)$. Εάν η μέθοδος δεν έχει συγκλίνει, εκτελείται το επόμενο βήμα. Διαφορετικά η αλγοριθμική διαδικασία τερματίζεται.

Βήμα 4 Υπολογίζεται ένα συμμετρικό μητρώο H_k με τη μέθοδο BFGS που παρουσιάζεται στην ενότητα 3.4, που είναι μία προσέγγιση του Εσσιανού μητρώου της συνάρτησης Lagrange ως προς τις μεταβλητές βελτιστοποίησης και τους πολλαπλασιαστές.

Βήμα 5 Επιλύεται το τετραγωνικό υποπρόβλημα

$$\begin{aligned} \min_{\vec{x} \in \mathbb{R}} \quad & g^T \Delta \vec{x} + \frac{1}{2} \Delta \vec{x}^T B \Delta \vec{x} \\ \text{υπό τους περιορισμούς} \quad & c_E(\vec{x}) + \mathcal{J}_E^T \Delta \vec{x} = 0 \\ & c_I(\vec{x}) + \mathcal{J}_I^T \Delta \vec{x} \geq 0 \end{aligned} \tag{3.5}$$

και υπολογίζεται το βέλτιστο $\Delta \vec{x}_k$ που ελαχιστοποιεί το τετραγωνικό υποπρόβλημα, καθώς και οι βέλτιστες τιμές των πολλαπλασιαστών Lagrange $\vec{\lambda}_k$ για το υποπρόβλημα.

Βήμα 6 Γνωρίζοντας την κατεύθυνση $\Delta \vec{x}_k$ που θα χρησιμοποιηθεί στην ανανέωση του διανύσματος των μεταβλητών βελτιστοποίησης \vec{x}_k , με χρήση μεθόδου Ανίχνευσης κατά Γραμμή υπολογίζεται το μέγιστο βήμα α_k που επιτυγχάνει μείωση της αντικειμενικής συνάρτησης $f(\vec{x})$

Βήμα 7 Ανανεώνονται οι τιμές των μεταβλητών βελτιστοποίησης και των πολλαπλασιαστών Lagrange σύμφωνα με τις σχέσεις

$$\begin{aligned} \vec{x}_{k+1} &= \vec{x}_k + \alpha_k \Delta \vec{x}_k \\ \vec{\lambda}_{k+1} &= \vec{\lambda}_k + \alpha_k \Delta \vec{\lambda}_k \end{aligned} \tag{3.6}$$

χρησιμοποιώντας τα $\Delta \vec{x}_k$ και $\Delta \vec{\lambda}_k$ που υπολογίστηκαν στο Βήμα 5.

Βήμα 8 Υπολογίζονται εκ νέου οι ποσότητες $f(\vec{x}_{k+1})$, $c(\vec{x}_{k+1})$, g_{k+1} , \mathcal{J}_{k+1}

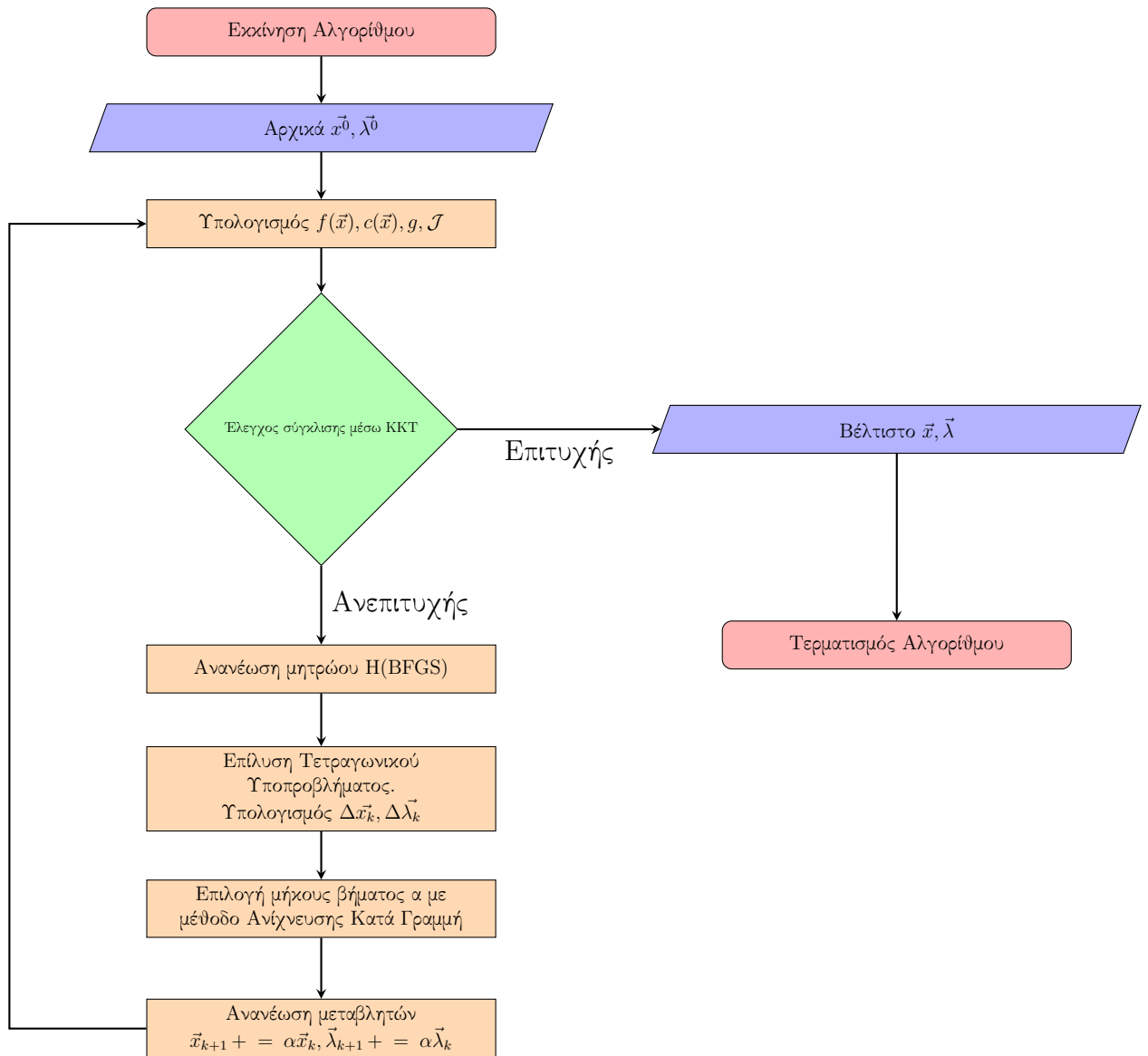
Βήμα 9 Αυξάνεται ο μετρητής k κατά μία μονάδα και ο αλγόριθμος επιστρέφει στο Βήμα 3

Στο Βήμα 4 της αλγοριθμικής διαδικασίας αναφέρθηκε ότι στις περισσότερες περιπτώσεις το συμμετρικό μητρώο H είναι μία προσέγγιση του Εσσιανού μητρώου Lagrange και όχι το ακριβές Εσσιανό μητρώο αυτής, καθότι στις πραγματικές εφαρμογές, όπως παραδείγματος χάρη στα προβλήματα αεροδυναμικής βελτιστοποίησης, ο υπολογισμός της δεύτερης παραγώγου μίας συνάρτησης ως προς τις μεταβλητές βελτιστοποίησης είναι πολύ ακριβή υπολογιστικά. Για το λόγο αυτό, σε όλες τις εφαρμογές που θα ακολουθήσουν στην εργασία αυτή, το μητρώο H είναι μία προσέγγιση του ακριβούς Εσσιανού μητρώου της συνάρτησης Lagrange, το οποίο αρχικοποιείται ως ο μοναδιαίος διαγώνιος πίνακας και σε κάθε εξωτερική επανάληψη επανυπολογίζεται με τη βοήθεια μίας Προσεγγιστικής Μεθόδου Newton. Στην εργασία αυτή γίνεται χρήση της Προσεγγιστικής Μεθόδου Newton Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno(BFGS) που θα παρουσιαστεί στην επόμενη παράγραφο. Η μέθοδος BFGS εξασφαλίζει ότι εάν το Εσσιανό μητρώο σε μία επανάληψη είναι θετικά ορισμένο, τότε και το ανανεωμένο μητρώο που υπολογίζεται θα είναι και αυτό θετικά ορισμένο.

Στο Βήμα 5 της αλγοριθμικής διαδικασίας πραγματοποιείται η επίλυση του τετραγωνικού υποπροβλήματος για να υπολογιστεί η μεταβολή των μεταβλητών βελτιστοποίησης. Η επίλυση του τετραγωνικού υποπροβλήματος αποτελεί από μόνο του ξεχωριστή αλγοριθμική διαδικασία εάν το πρόβλημα περιέχει περιορισμούς ανισο-ισότητας, ενώ γίνεται πολύ απλούστερα με την επίλυση ενός μόνο συστήματος Newton εάν το πρόβλημα περιέχει μόνο περιορισμούς ισότητας. Η δεύτερη περίπτωση θα αναλυθεί σε επόμενη παράγραφο αυτού του Κεφαλαίου, ενώ η πρώτη υπάγεται σε ξεχωριστή κατηγορία μεθόδων βελτιστοποίησης που ονομάζεται Τετραγωνικός Προγραμματισμός και θα αναλυθεί σε ξεχωριστό Κεφάλαιο.

3.4 Η Μέθοδος Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno(BFGS)

Όταν σε ένα πρόβλημα βελτιστοποίησης η εύρεση της δεύτερης παραγώγου μίας συνάρτησης είναι αδύνατο να υπολογιστεί ή είναι υπολογιστικά ακριβή χρησιμοποιείται, όπως ήδη αναφέρθηκε κάποια προσεγγιστική μέθοδος Newton υπολογισμού του Εσσιανού μητρώου της συνάρτησης κατά. Η πιο ευρέως χρησιμοποιούμενη και πολλές φορές αποτελεσματικότερη προσεγγιστική μέθοδος Newton είναι η μέθοδο Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno(BFGS) [1]. Στην περίπτωση βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς, με υπολογισμένο το νέο διάνυσμα των μεταβλητών βελτιστοποίησης \vec{x}_{k+1} και γνωρίζοντας ήδη το διάνυσμα των μεταβλητών βελτιστοποίησης στην προηγούμενη



Σχήμα 3.1: Διάγραμμα Ροής Αλγορίθμου Βελτιστοποίησης SQP

επανάληψη, καθώς και το Εσσιανό μητρώο της αντικειμενικής συνάρτησης, έστω \vec{x}_k και W_k αντίστοιχα, το νέο προσεγγιστικό μητρώο W_{k+1} υπολογίζεται από τη σχέση

$$W_{k+1} = W_k - \frac{W_k \vec{p}_k \vec{p}_k^T W_k}{\vec{p}_k^T W_k \vec{p}_k} + \frac{\vec{y}_k \vec{y}_k^T}{\vec{y}_k^T \vec{p}_k} \quad (3.7)$$

όπου $\vec{p}_k = \vec{x}_{k+1} - \vec{x}_k$ και $\vec{y}_k = \nabla_x f(\vec{x}_{k+1}) - \nabla_x f(\vec{x}_k)$.

Εάν το μητρώο W_k είναι θετικά ορισμένο, τότε το W_{k+1} είναι θετικά ορισμένο αν και μόνο αν η ποσότητα $\vec{y}_k^T \vec{p}_k$ είναι θετική [2]. Η ποσότητα $\vec{y}_k^T \vec{p}_k$ ονομάζεται προσεγγιστική καμπυλότητα.

Στην περίπτωση βελτιστοποίησης με περιορισμούς μπορεί να χρησιμοποιηθεί μία θετικά ορισμένη προσέγγιση του Εσσιανού μητρώου της συνάρτησης Lagrange κατά BFGS και ο υπολογισμός του νέου μητρώου γίνεται χρησιμοποιώντας τις σχέσεις

$$\vec{p}_k = \vec{x}_{k+1} - \vec{x}_k \quad (3.8\alpha')$$

$$\vec{y}_k = \nabla_x \mathcal{L}(\vec{x}_{k+1}, \vec{\lambda}_{k+1}) - \nabla_x \mathcal{L}(\vec{x}_k, \vec{\lambda}_{k+1}) \quad (3.8\beta')$$

Εάν το διάνυσμα των μεταβλητών βελτιστοποίησης στην επανάληψη k \vec{x}_k βρίσκεται μακριά από τη βέλτιστη λύση, η προσεγγιστική καμπυλότητα $\vec{y}_k^T \vec{p}_k$ μπορεί να είναι αρνητική και το νέο μητρώο W_{k+1} που προκύπτει από τη μέθοδο BFGS να είναι θετικά ημι-ορισμένο. Ίδανικά, όμως, το Εσσιανό μητρώο πρέπει να είναι θετικά ορισμένο. Στην περίπτωση αυτή θα μπορούσε να μην πραγματοποιηθεί ανανέωση του Εσσιανού μητρώου. Έτσι, όμως, δεν λαμβάνεται νέα πληροφορία σχετικά με την καμπυλότητα της συνάρτησης Lagrange. Για το λόγο αυτό, πρέπει να χρησιμοποιηθούν τροποποιημένα διανύσματα \vec{y}_k και \vec{p}_k , έτσι ώστε να ισχύει $\vec{y}_k^T \vec{p}_k > 0$.

Εάν εισαχθεί μια ποσότητα τ_k , η οποία ονομάζεται ελάχιστη αποδεκτή καμπυλότητα, και προστεθεί στο διάνυσμα \vec{y}_k ένα διάνυσμα $\Delta \vec{y}_k$, τέτοιο ώστε να ισχύει $(\vec{y}_k + \Delta \vec{y}_k)^T \vec{p}_k = \tau_k$, θα ισχύει $(\vec{y}_k + \Delta \vec{y}_k)^T \vec{p}_k > 0$ και το ανανεωμένο Εσσιανό μητρώο θα είναι θετικά ορισμένο.

Η ποσότητα τ_k ορίζεται ως

$$\tau_k = (1 - \eta) \vec{p}_k^T W_k \vec{p}_k \quad (3.9)$$

όπου η μία προκαθορισμένη ποσότητα για την οποία ισχύει $0 < \eta < 1$. Εύκολα συμπεραίνεται από την εξίσωση 3.9 ότι η ελάχιστη αποδεκτή καμπυλότητα τ_k είναι θετική, αφού η ποσότητα $\vec{p}_k^T W_k \vec{p}_k$ είναι πάντα θετική.

Σύμφωνα με τον τρόπο που ορίστηκε και για να ισχύει $(\vec{y}_k + \Delta \vec{y}_k)^T \vec{p}_k = \tau_k$, το διάνυσμα

$\Delta \vec{y}_k$ είναι το

$$\Delta \vec{y}_k = \frac{\tau_k - \vec{y}_k^T \vec{p}_k}{\vec{p}_k^T (\vec{y}_k - W_k \vec{p}_k)} (\vec{y}_k - W_k \vec{p}_k) \quad (3.10)$$

3.5 Η Μέθοδος SQP για Προβλήματα με Περιορισμούς Ισότητας

Έστω το πρόβλημα βελτιστοποίησης

$$\begin{aligned} & \min_{\vec{x} \in \mathbb{R}} f(\vec{x}) \\ & \text{υπό τους περιορισμούς } c_E(\vec{x}) = 0 \end{aligned} \quad (3.11)$$

Στην ενότητα αυτή επιλύεται το πρόβλημα βελτιστοποίησης 3.11 προκειμένου ναδειχθεί η άμεση σχέση που έχει η επίλυση με τη μέθοδο SQP με την επίλυση του προβλήματος αυτού με τη μέθοδο Newton με περιορισμούς [4].

Ως γνωστόν σε ένα πρόβλημα βελτιστοποίησης το βέλτιστο σημείο $(\vec{x}^*, \vec{\lambda}^*)$ των μεταβλητών βελτιστοποίησης και των πολλαπλασιαστών Lagrange αντίστοιχα, πρέπει να ικανοποιεί τη σχέση $\mathcal{F}(\vec{x}^*, \vec{\lambda}^*) = 0$, όπου

$$\mathcal{F}(\vec{x}, \vec{\lambda}) = \nabla \mathcal{L}(\vec{x}, \vec{\lambda}) = \begin{pmatrix} g - \mathcal{J}_c^T \vec{\lambda} \\ c_E(\vec{x}) \end{pmatrix} \quad (3.12)$$

Το πρόβλημα αυτό επιλύεται σύμφωνα με τη μέθοδο Newton που παρουσιάστηκε στην παράγραφο 2.3 ως εξής. Έστω \vec{x}_k και $\vec{\lambda}_k$ οι τιμές των μεταβλητών στην υπ' αριθμό k αξιολόγηση και w_k το διάνυσμα που ορίζεται ως το διάνυσμα διάστασης $N \times M$ των διανυσμάτων \vec{x}_k και $\vec{\lambda}_k$ στην αξιολόγηση k , όπου με N συμβολίζεται ο αριθμός των μεταβλητών βελτιστοποίησης και με M ο αριθμός των πολλαπλασιαστών Lagrange. Σύμφωνα με τη μέθοδο Newton η τιμή του \vec{w} , στη νέα επανάληψη θα υπολογίζεται από τη σχέση $\vec{w}_{k+1} = \vec{w}_k + \Delta \vec{w}_k$, όπου το $\Delta \vec{w}$ υπολογίζεται από τη σχέση

$$\mathcal{F}'(\vec{w}_k) \Delta \vec{w}_k = -\mathcal{F}(\vec{w}_k) \quad (3.13)$$

Η διαφορίση της συνάρτησης \mathcal{F} ως προς τα διανύσματα \vec{x} και $\vec{\lambda}$ δίνει

$$\mathcal{F}'(\vec{x}, \vec{\lambda}) = \begin{pmatrix} B & -\mathcal{J}_c^T \\ \mathcal{J}_c & 0 \end{pmatrix}$$

Οπότε το σύστημα Newton μπορεί να γραφεί στη μορφή

$$\begin{pmatrix} B_k & -\mathcal{J}_c^T \\ \mathcal{J}_c & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta \vec{x}_k \\ \Delta \vec{\lambda}_k \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} g - \mathcal{J}_c^T \vec{\lambda} \\ c_E \end{pmatrix} \implies$$

$$\begin{pmatrix} B_k & \mathcal{J}_c^T \\ \mathcal{J}_c & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta \vec{x}_k \\ -\Delta \vec{\lambda}_k \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} g - \mathcal{J}_c^T \vec{\lambda} \\ c_E \end{pmatrix} \quad (3.14)$$

Έστω, τώρα, το πρόβλημα βελτιστοποίησης που προκύπτει ως το τετραγωνικό υποπρόβλημα του προβλήματος 3.11, όπως αυτό δίνεται από τη σχέση 3.5 χωρίς τους περιορισμούς ανισο-ισότητας, δηλαδή το

$$\min_{\vec{x} \in \mathbb{R}} g^T \Delta \vec{x} + \frac{1}{2} \Delta \vec{x} H \Delta \vec{x} \quad (3.15)$$

$$\text{υπό τους περιορισμούς} \quad c_E + \mathcal{J}_E^T \Delta \vec{x} = 0$$

Η συνάρτηση Lagrange του προβλήματος 3.15 δίνεται από τη σχέση

$$\mathcal{L} = g^T \Delta \vec{x} + \frac{1}{2} \Delta \vec{x} H \Delta \vec{x} - (c_E + \mathcal{J}_E^T \Delta \vec{x})^T \vec{\lambda} \quad (3.16)$$

Στο βέλτιστο σημείο $(\Delta \vec{x}_*, \lambda_*)$ πρέπει η παράγωγος της αντικειμενικής ως προς τις μεταβλητές βελτιστοποίησης και ως προς τους πολλαπλασιαστές Lagrange να ισούται με 0. Πρέπει να ισχύουν δηλαδή οι σχέσεις

$$\nabla_x \mathcal{L} = g^T + H \Delta \vec{x} - \mathcal{J}_E^T \vec{\lambda} = 0 \quad (3.17\alpha')$$

$$\nabla_\lambda \mathcal{L} = c_E + \mathcal{J}_E^T \Delta \vec{x} = 0 \quad (3.17\beta')$$

ή σε μητρωϊκή μορφή

$$\begin{pmatrix} H & -\mathcal{J}_E^T \\ \mathcal{J}_E & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta \vec{x}_* \\ \vec{\lambda}_* \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} g \\ c_E \end{pmatrix} \quad (3.18)$$

Επιστρέφοντας, τώρα, στο σύστημα εξισώσεων 3.14 και αντικαθιστώντας το διάνυσμα $\Delta \vec{\lambda}_k$ από τη σχέση

$$\vec{\lambda}^{opt} = \Delta \vec{\lambda}_k + \vec{\lambda}_k$$

προκύπτει το νέο σύστημα εξισώσεων

$$\begin{pmatrix} B_k & -\mathcal{J}_c^T \\ \mathcal{J}_c & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta \vec{x}_k \\ \vec{\lambda}^{opt} \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} g \\ c_E \end{pmatrix} \quad (3.19)$$

Συγκρίνοντας τις σχέσεις 3.18 και 3.19 εύκολα εξάγεται το συμπέρασμα ότι τα δύο συστήματα εξισώσεων είναι ισοδύναμα, οπότε η επίλυση του τετραγωνικού υποπροβλήματος στην περίπτωση των περιορισμών ισότητας ισοδυναμεί με την εφαρμογή της μεθόδου Newton στο αρχικό πρόβλημα βελτιστοποίησης 3.11.

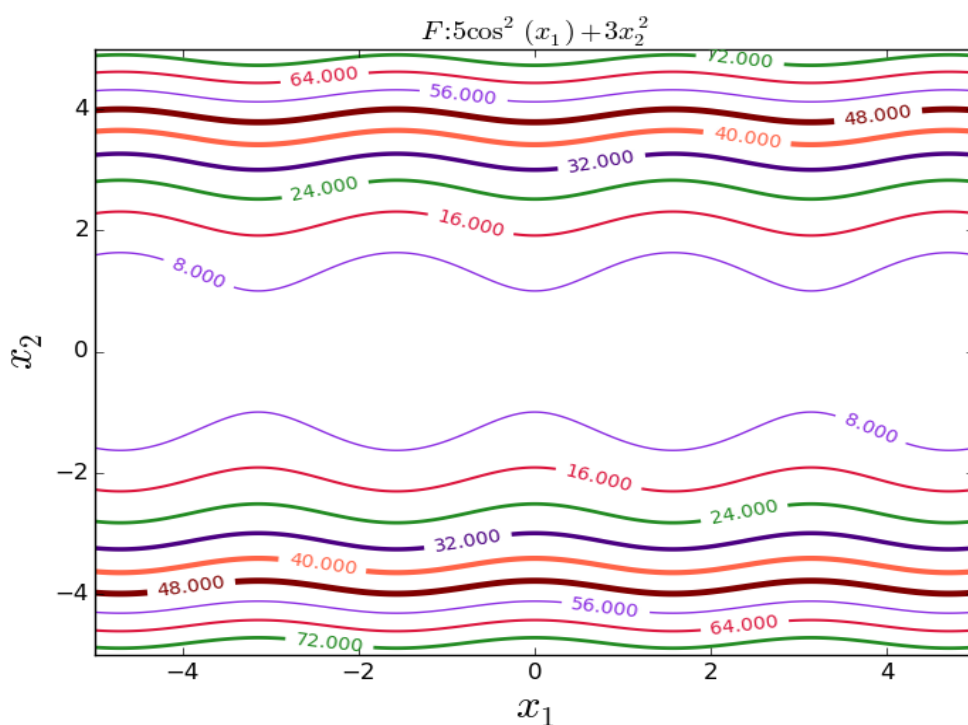
3.6 Μαθηματικές Εφαρμογές της Μεθόδου SQP σε Προβλήματα με Περιορισμούς Ισότητας

Στην παράγραφο αυτή θα παρουσιαστούν αποτελέσματα από την επίλυση προβλημάτων με τη μέθοδο του ΔΤΠ στα οποία επιβάλλονται μόνο περιορισμοί ισότητας. Τα προβλήματα που θα επιλυθούν στην παράγραφο αυτή, όπως και τα περισσότερα μαθηματικά προβλήματα που θα χρησιμοποιηθούν για την ανάλυση της μεθόδου, είτε αυτά περιλαμβάνουν μόνο περιορισμούς ισότητας είτε περιλαμβάνουν συνδυασμό περιορισμών ισότητας και ανισο-ισότητας έχουν ληφθεί από τη συλλογή προβλημάτων ελέγχου αλγορίθμων μη-γραμμικού προγραμματισμού των **Hock** και **Schittkowski**[6].

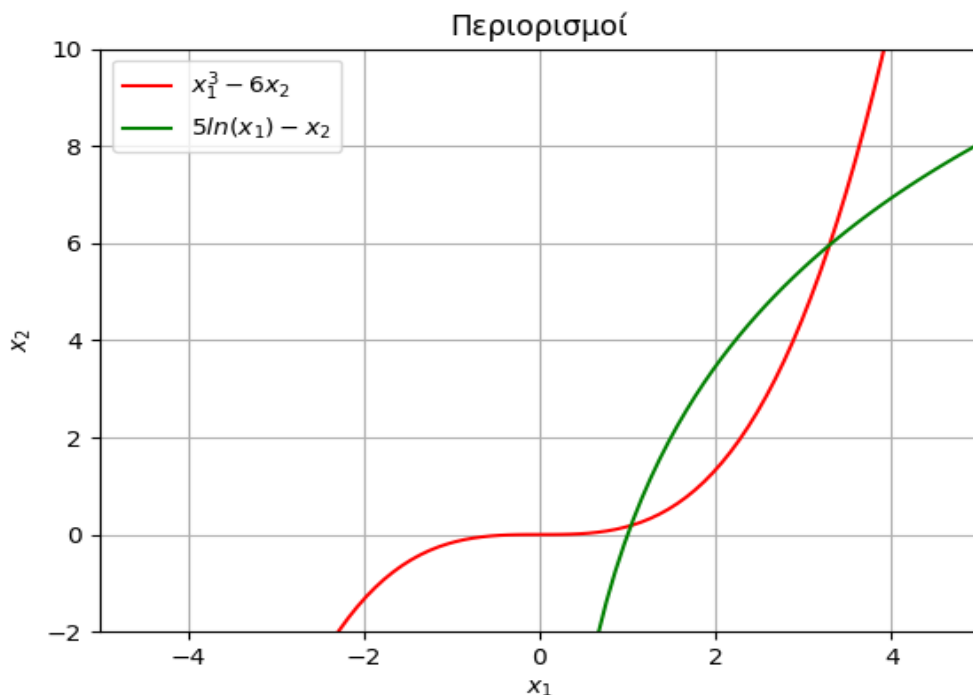
Εξάιρεση αποτελεί το πρόβλημα

$$\begin{aligned} \min f_1 &= 5\cos^2 x_1 + 3x_2^2 \\ \text{υπό τους περιορισμούς} \quad x_1^3 - 6x_2 &= 0 \\ 5\ln(x_1) - x_2 &= 0 \end{aligned} \quad (3.20)$$

Το πρόβλημα 3.20 είναι ένα μαθηματικό πρόβλημα που λήφθηκε προς ανάλυση και ο λόγος που χρησιμοποιείται είναι για δοθεί μία γραφική απεικόνιση της επίλυσης του για ευκολότερη προκαταρκτική κατανόηση της μεθόδου. Αποτελεί ένα πρόβλημα δύο μεταβλητών βελτιστοποίησης, σε αντίθεση με τα προβλήματα της συλλογής προβλημάτων των **Hock** και **Schittkowski** [6], που είναι προβλήματα 3 μεταβλητών και άνω, γεγονός που καθιστά τη γραφική απεικόνιση τους πολύ δυσκολότερη.



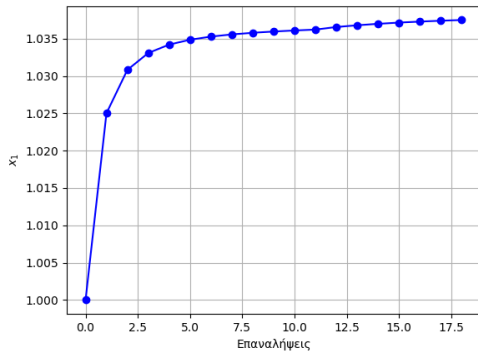
Σχήμα 3.2: Ισοϋψείς καμπύλες της αντικειμενικής συνάρτησης f_1 .



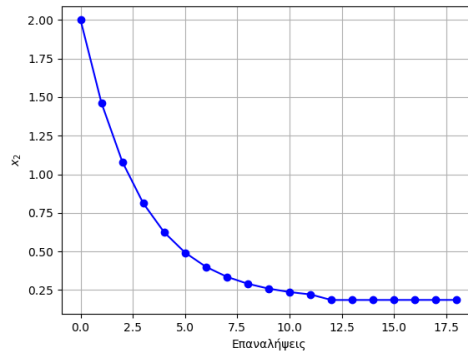
Σχήμα 3.3: Γραφική παράσταση των περιορισμών ισότητας του προβλήματος 3.20. Το σύνολο των αποδεκτών λύσεων για κάθε περιορισμό κινείται πάνω στη γραφική του παράσταση. Το σύνολο των αποδεκτών λύσεων για το συνδυασμό των δύο περιορισμών είναι τα δύο σημεία τομής των γραφικών παραστάσεών τους.

Στο Σχήμα 3.2 παρατηρείται η ημιτονοειδής συμπεριφορά της αντικειμενικής συνάρτησης f_1 , η οποία είναι εντονότερη όσο η τιμή της μεταβλητής βελτιστοποίησης x_2 προσεγγίζει το 0. Η τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης f_1 μειώνεται με τη μείωση της μεταβλητής x_2 και έχει ελάχιστη τιμή το 0 για άπειρες τιμές της μεταβλητής σχεδιασμού x_1 . Στο Σχήμα 3.3 φαίνονται με κόκκινο και πράσινο χρώμα οι γραφικές παραστάσεις των περιορισμών ισότητας. Παρατηρείται λοιπόν ότι υπάρχουν δύο σημεία μόνο τα οποία ικανοποιούν συγχρόνως και τους δύο περιορισμούς ισότητας, τα οποία στο Σχήμα 3.3 είναι αυτά στα οποία τέμνονται οι γραφικές παραστάσεις των δύο περιορισμών.

Ιδανικά, λοιπόν, ξεκινώντας από ένα σημείο το οποίο δεν ικανοποιεί κανέναν από τους δύο περιορισμούς ισότητας, η μέθοδος ΔΤΠ θα εντοπίσει το σημείο εκείνο που ικανοποιεί συγχρόνως και τους δύο περιορισμούς και θα δίνει συγχρόνως την ελάχιστη τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης f_1 μεταξύ των δύο αυτών σημείων (εφόσον τα δύο αυτά σημεία αποτελούν το σύνολο των αποδεκτών λύσεων του προβλήματος 3.20). Από το Σχήμα 3.2 προκύπτει εύκολα ότι μεταξύ των δύο σημείων, το σημείο αυτό που δίνει τη μικρότερη τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης f_1 είναι εκείνο που βρίσκεται κοντά στο σημείο $[x_1 = 1, x_2 = 0]$

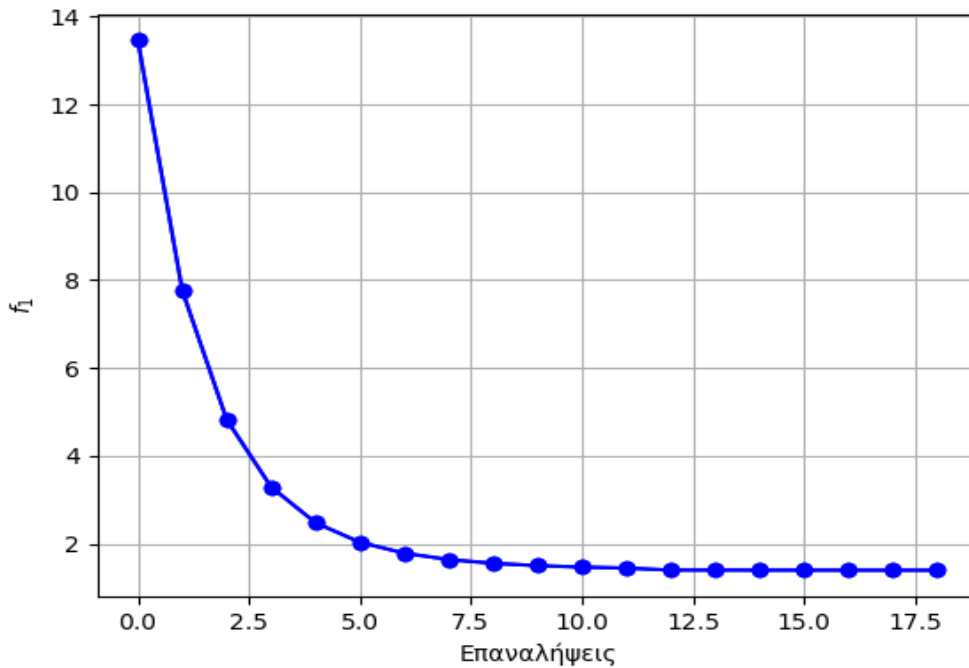


(α') Μεταβολή x_1 .



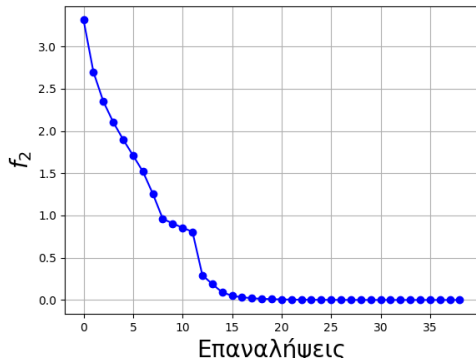
(β') Μεταβολή x_2 .

Σχήμα 3.5: Μεταβολή μεταβλητών βελτιστοποίησης.

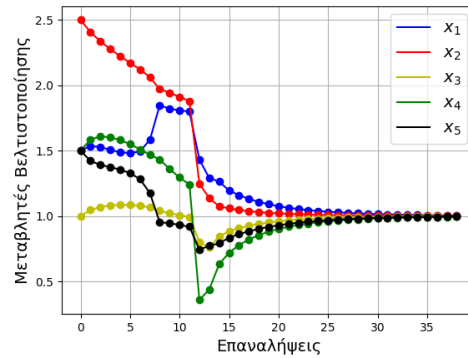


Σχήμα 3.4: Σύγκλιση της αντικειμενικής συνάρτησης f_1 .

Στα Σχήματα 3.4 και 3.5 φαίνονται τα αποτελέσματα της ελαχιστοποίησης της αντικειμενικής συνάρτησης f_1 με τη μέθοδο SQP για περιορισμούς ισότητας. Η διαδικασία βελτιστοποίησης εκκινεί από το σημείο $[x_1 = 1, x_2 = 2]$, το οποίο δεν ικανοποιεί αρχικά κανέναν από τους περιορισμούς ισότητας, με αρχική τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης $f_1 = 13.45$ και ύστερα από 18 εξωτερικές επαναλήψεις συγκλίνει στην τελική ελάχιστη τιμή της $f_1 = 1.3962$ για τις τελικές τιμές



(α') Σύγκλιση της συνάρτησης f_2 .



(β') Μεταβολή μεταβλητών βελτ/σης.

Σχήμα 3.6: Πρόβλημα 47 - 1η περίπτωση.

των μεταβλητών βελτιστοποίησης $[x_1 = 1.0375, x_2 = 0.1861]$. Οι τιμές των μεταβλητών βελτιστοποίησης επαληθεύονται ως έγκυρες και από το Σχήμα 3.3. Στο σημείο αυτό κρίνεται σκόπιμο να αναφερθεί ότι ως αρχικό Εσσιανό μητρώο H_0 της αντικειμενικής συνάρτησης επιλέχτηκε το μοναδιαίο διαγώνιο μητρώο και η ανανέωση του πραγματοποιείται σε κάθε επανάληψη με τη μέθοδο BFGS. Η επιλογή αυτού του αρχικού Εσσιανού μητρώου παραμένει ίδια σε όλες τις εφαρμογές που πραγματοποιούνται σε αυτή την εργασία.

Στη συνέχεια δίνονται τα αποτελέσματα εφαρμογής της μεθόδου SQP σε τρία προβλήματα από τη συλλογή προβλημάτων βελτιστοποίησης των **Hock** και **Schittkowski** και, συγκεκριμένα, τα υπ' αριθμόν 47, 61 και 63, στα οποία εμπλέκονται περισσότερες από 2 μεταβλητές βελτιστοποίησης.

Πρόβλημα 47

$$\min f_2 = (x_1 - x_2)^2 + (x_2 - x_3)^2 + (x_3 - x_4)^4 + (x_4 - x_5)^4$$

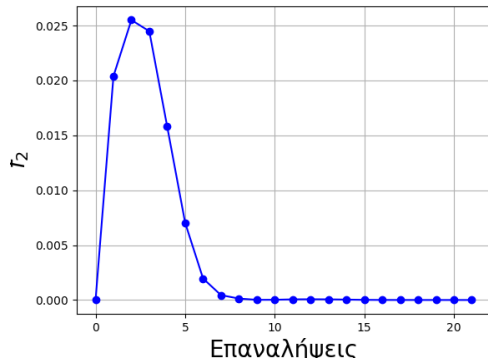
$$x_1 + x_2^2 + x_3^3 - 3 = 0 \quad (3.21)$$

$$\text{υπό τους περιορισμούς } x_2 - x_3^2 + x_4 - 1 = 0$$

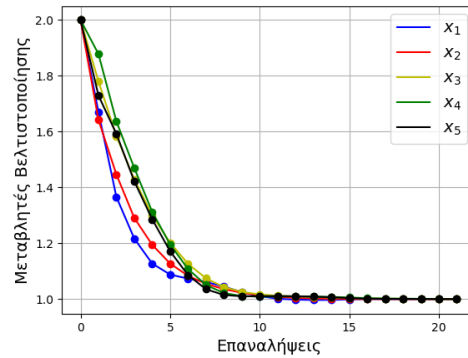
$$x_1 x_5 - 1 = 0$$

Για το Πρόβλημα 47, το οποίο δίνεται από τη σχέση 3.21, εξετάστηκαν δύο περιπτώσεις. Τα αποτελέσματα της πρώτης περίπτωσης φαίνονται στο Σχήμα 3.6 και τα αποτελέσματα της δεύτερης επίλυσης στο Σχήμα 3.7.

Στην πρώτη περίπτωση, επιλέχτηκε ως αρχικό σημείο για τις μεταβλητές βελτιστοποίησης το σημείο $[x_1 = 1.5, x_2 = 2.5, x_3 = 1, x_4 = 1.5, x_5 = 1.5]$, για το



(α') Σύγκλιση της συνάρτησης f_2 .



(β') Μεταβολή μεταβλητών βελτ/σης.

Σχήμα 3.7: Πρόβλημα 47 - 2η περίπτωση.

οποίο η αντικειμενική συνάρτηση f_2 έχει την τιμή 3.31 και οι περιορισμοί ισότητας δεν ικανοποιούνται. Όπως φαίνεται στα διαγράμματα του Σχήματος 3.6, η αντικειμενική συνάρτηση συγκλίνει ύστερα από 37 επαναλήψεις στην τιμή 0 και όλες οι μεταβλητές βελτιστοποίησης συγκλίνουν στην τιμή 1, η οποία και ικανοποιεί τους περιορισμούς ισότητας.

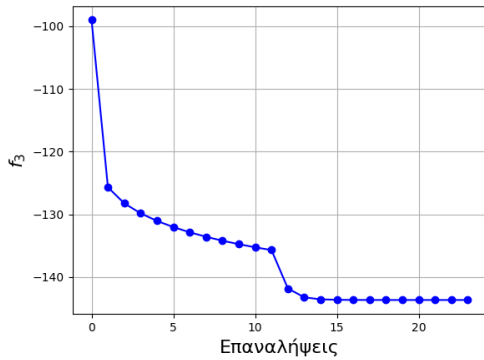
Λόγω της μορφής της αντικειμενικής συνάρτησης f_2 , οποιαδήποτε τιμή, ίση για όλες τις μεταβλητές βελτιστοποίησης, ελαχιστοποιεί προφανώς την τιμή της. Για το λόγο αυτό, κρίθηκε ενδιαφέρουσα η εξέταση της περίπτωσης κατά την οποία η αντικειμενική συνάρτηση είναι ήδη ελάχιστη, δεν ικανοποιούνται όμως οι περιορισμοί ισότητας. Στη δεύτερη περίπτωση, επιλέχτηκε ως αρχική τιμή για τις μεταβλητές βελτιστοποίησης το σημείο $[x_1 = x_2 = x_3 = x_4 = x_5 = 0]$, για το οποίο η αντικειμενική συνάρτηση f_2 έχει την τιμή 0 και οι περιορισμοί ισότητας δεν ικανοποιούνται. Στα διαγράμματα του Σχήματος 3.7 φαίνεται ότι η αντικειμενική συνάρτηση f_2 διατηρεί, μετά το πέρας της βελτιστοποίησης, τη μηδενική τιμή της και παράλληλα οι μεταβλητές βελτιστοποίησης συγκλίνουν κατόπιν 21 εξωτερικών επαναλήψεων στην τιμή 1, η οποία ικανοποιεί και τους περιορισμούς ισότητας.

Πρόβλημα 61

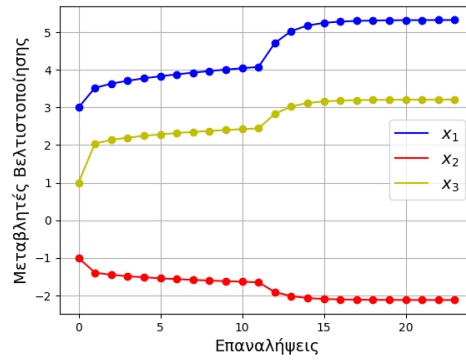
$$\min f_3 = 4x_1^2 + 2x_2^2 + 2x_3^2 - 33x_1 + 16x_2 - 24x_3$$

$$\begin{aligned} \text{υπό τους περιορισμούς} \quad 3x_1 - 2x_2^2 - 7 &= 0 \\ 4x_1 + x_3^2 - 11 &= 0 \end{aligned} \quad (3.22)$$

Στο Διάγραμμα (α') του Σχήματος 3.8 φαίνεται η σύγκλιση της αντικειμενικής συνάρτησης f_3 , η οποία εκκινώντας από τη τιμή -99, για την αρχική τιμή των

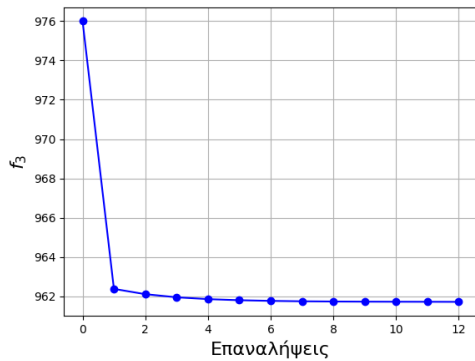


(α') Σύγκλιση της συνάρτησης f_3 .

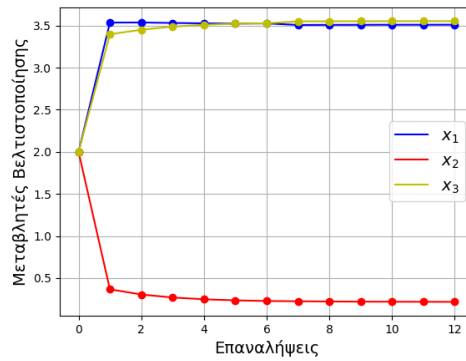


(β') Μεταβολή μεταβλητών βελτ/σης.

Σχήμα 3.8: Πρόβλημα 61.



(α') Σύγκλιση της συνάρτησης f_4 .



(β') Μεταβολή μεταβλητών βελτ/σης.

Σχήμα 3.9: Πρόβλημα 63.

μεταβλητών βελτιστοποίησης $[x_1 = 3, x_2 = -1, x_3 = 1]$, συγκλίνει μετά από 22 επαναλήψεις στην τελική τιμή $f_3 = -143.646$. Η τελική τιμή των μεταβλητών βελτιστοποίησης για αυτήν την τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης είναι, όπως φαίνεται και στο διάγραμμα (β') του Σχήματος 3.22, $[x_1 = 5.3247, x_2 = -2.1182, x_3 = 3.2]$.

Πρόβλημα 63

$$\min f_4 = 1000 - x_1^2 - 2x_2^2 - x_3^2 - x_1x_2 - x_1x_3$$

$$\begin{aligned} \text{υπό τους περιορισμούς} \quad 8x_1 + 14x_2 + 7x_3 - 56 &= 0 \\ x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 - 25 &= 0 \end{aligned} \quad (3.23)$$

Στο Διάγραμμα (α') του Σχήματος 3.9 φαίνεται η σύγκλιση της αντικειμενικής

συνάρτησης f_4 , η οποία εκκινώντας από τη τιμή $f_4 = 976$, για την αρχική τιμή των μεταβλητών βελτιστοποίησης $[x_1 = 2, x_2 = 2, x_3 = 2]$, συγκλίνει μετά από 12 εξωτερικές επαναλήψεις στην τελική τιμή $f_4 = 961.715$. Η τελική τιμή των μεταβλητών βελτιστοποίησης για αυτή την τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης είναι, όπως φαίνεται και στο διάγραμμα (β') του Σχήματος 3.23, $[x_1 = 3.511, x_2 = 0.217, x_3 = 3.553]$.

Συνοψίζοντας, στην ενότητα αυτή παρουσιάστηκαν αποτελέσματα βελτιστοποίησης συναρτήσεων με περιορισμούς ισότητας, τα οποία πιστοποιούν την αξιοπιστία της μεθόδου ως προς την επίλυση αυτής της κατηγορίας προβλημάτων βελτιστοποίησης μη-γραμμικών συναρτήσεων με μη-γραμμικούς περιορισμούς ισότητας, καθότι τα αποτελέσματα αυτά επαληθεύονται είτε γραφικά, όπως έγινε στην περίπτωση του Προβλήματος 3.20, είτε από τη βιβλιογραφία.

Κεφάλαιο 4

Τετραγωνικός Προγραμματισμός με τη Μέθοδο του Ενεργού Συνόλου

4.1 Εισαγωγή

Στην ενότητα 3.3, όπου παρουσιάζεται ο αλγόριθμος βελτιστοποίησης, αναφέρεται στο Βήμα 5 ότι απαιτείται η επίλυση του τετραγωνικού υποπροβλήματος του αρχικού προβλήματος βελτιστοποίησης, έτσι ώστε να υπολογιστεί το βέλτιστο $\Delta \vec{x}_k$ που ελαχιστοποιεί το υποπρόβλημα. Το $\Delta \vec{x}_k$ που υπολογίζεται χρησιμοποιείται στη συνέχεια για την ανανέωση των μεταβλητών βελτιστοποίησης στην εξωτερική αξιολόγηση. Το τετραγωνικό υποπρόβλημα που περιγράφει η Σχέση (3.5) κατατάσσεται στην κατηγορία των προβλημάτων Τετραγωνικού Προγραμματισμού (Quadratic Programming) [19].

Η γενική μορφή των προβλημάτων αυτών είναι η

$$\begin{aligned} \min_{\vec{x} \in \mathbb{R}} \phi(\vec{x}) &= g^T \vec{x} + \frac{1}{2} \vec{x}^T H \vec{x} \\ \text{υπό τους περιορισμούς} \quad & A \vec{x} = b \\ & D \vec{x} \geq f \end{aligned} \tag{4.1}$$

Στο Κεφάλαιο αυτό θα παρουσιαστεί μία μέθοδος επίλυσης Τετραγωνικού

Προγραμματισμού. Ο Τετραγωνικός Προγραμματισμός (Quadratic Programming) αποτελεί κατηγορία μεθόδων βελτιστοποίησης που στόχο έχουν την ελαχιστοποίηση μίας αντικειμενικής συνάρτησης τετραγωνικής μορφής υπό γραμμικούς περιορισμούς. Η μέθοδος που θα παρουσιαστεί στο Κεφάλαιο αυτό χρησιμοποιείται, στην εργασία αυτή, στον αλγόριθμο βελτιστοποίησης για την επίλυση του Βήματος 5 της επαναληπτικής διαδικασίας.

Η δυσκολία επίλυσης ενός τετραγωνικού προβλήματος εξαρτάται από την κυρτότητα της τετραγωνικής αντικειμενικής συνάρτησης φ . Εάν το τετραγωνικό μητρώο H είναι θετικά ημι-ορισμένο, τότε το τετραγωνικό πρόβλημα είναι κυρτό, διαφορετικά είναι μη-κυρτό και η εύρεση ακόμα και τοπικού ελαχίστου είναι σχεδόν αδύνατη.

Η πλειοψηφία των μεθόδων επίλυσης τετραγωνικών προβλημάτων υπάγονται είτε στις μεθόδους Ενεργού Συνόλου είτε στις μεθόδους Εσωτερικού Σημείου [2]. Συνοπτικά, οι μέθοδοι Ενεργού Συνόλου είναι επαναληπτικές μέθοδοι που επιλύουν μία σειρά τετραγωνικών υποπροβλημάτων με περιορισμούς ισότητας. Στόχος κάθε μεθόδου είναι ο υπολογισμός του Ενεργού Συνόλου, του συνόλου των περιορισμών ανισο-ισότητας δηλαδή που ικανοποιούνται ως ισότητες, στη βέλτιστη λύση του προβλήματος. Οι μέθοδοι του Ενεργού Συνόλου χωρίζεται σε δύο κύριες φάσεις. Η πρώτη φάση επικεντρώνεται στην ικανοποίηση των περιορισμών, ενώ η δεύτερη επικεντρώνεται στην ελαχιστοποίηση της αντικειμενικής συνάρτησης. Βασικό πλεονέκτημα των μεθόδων Ενεργού Συνόλου είναι η δυνατότητά τους να εκμεταλλεύονται μία καλή αρχική πρόβλεψη για το Ενεργό Σύνολο. Το πλεονέκτημα τους αυτό καθιστά τις μεθόδους Ενεργού Συνόλου ιδανικές για την επίλυση των τετραγωνικών υποπροβλημάτων στη μέθοδο SQP, καθώς η λύση κάθε υποπροβλήματος μπορεί να θεωρηθεί πολύ καλή πρόβλεψη της λύσης του επόμενου υποπροβλήματος [5].

Στο κεφάλαιο αυτό οι πολλαπλασιαστές Lagrange θα αναφέρονται με διαφορετικό συμβολισμό για τους περιορισμούς ισότητας και για τους περιορισμούς ανισο-ισότητας. Οι πολλαπλασιαστές Lagrange των περιορισμών ισότητας συμβολίζονται με λ , ενώ των περιορισμών ανισο-ισότητας με z . Παρατίθενται στη συνέχεια οι πρώτης τάξης αναγκαίες συνθήκες του προβλήματος 4.1 κάνοντας χρήση των συμβολισμών που αναφέρθηκαν

$$g + H\vec{x} = A^T \vec{\lambda} + D^T \vec{z} \quad (4.2\alpha')$$

$$A\vec{x} = b, \quad D\vec{x} = f \quad (4.2\beta')$$

$$\vec{z} \geq 0 \quad (4.2\gamma')$$

$$\vec{z}(D\vec{x} - f) = 0 \quad (4.2\delta')$$

Απαραίτητος, στο σημείο αυτό, για την ανάλυση που ακολουθεί είναι ο ορισμός του μητρώου ενεργών περιορισμών A_α . Ως μητρώο ενεργών περιορισμών ορίζεται το μητρώο που προκύπτει εάν στις σειρές του μητρώου A των περιορισμών ισότητας προστεθούν οι σειρές του μητρώου D , οι οποίες αντιστοιχούν στους περιορισμούς ανισο-ισότητας που είναι ενεργοί σε κάθε σημείο \vec{x} ή διαφορετικά οι περιορισμοί που ανήκουν στο Ενεργό Σύνολο \mathcal{A} . Εάν το τελευταίο μητρώο συμβολιστεί με D_α προκύπτει το μητρώο

$$A_\alpha = \begin{pmatrix} A \\ D_\alpha \end{pmatrix}$$

Όπως ήδη αναφέρθηκε προτύτερα, η μέθοδος Ενεργού Συνόλου αποτελεί μία επαναληπτική διαδικασία δύο φάσεων. Στην πρώτη φάση, ή αλλιώς φάση Αποδεκτού Σημείου (Feasibility Phase), αγνοείται αρχικά η αντικειμενική συνάρτηση και εντοπίζεται ένα διάνυσμα \vec{x}^* , το οποίο ικανοποιεί τους περιορισμούς ισότητας $A\vec{x}^* = b$ και τους περιορισμούς ανισο-ισότητας $D\vec{x}^* \geq f$. Στη δεύτερη φάση, ή αλλιώς φάση βελτιστοποίησης (Optimality Phase), ελαχιστοποιείται η αντικειμενική συνάρτηση ϕ , λαμβάνοντας μόνο βήματα προς τη βέλτιστη λύση, τα οποία διατηρούν την υποψήφια λύση \vec{x} αποδεκτή ως προς τους περιορισμούς. Στην ανάλυση που ακολουθεί περιγράφεται πρώτα η δεύτερη φάση της μεθόδου, η φάση της βελτιστοποίησης και, στη συνέχεια, γίνεται η ανάλυση της πρώτης φάσης, της φάσης Αποδεκτού Σημείου

Αρχίζοντας από ένα αρχικό αποδεκτό σημείο \vec{x}_0 η μέθοδος Ενεργού Συνόλου υπολογίζει μια σειρά υποψήφιας λύσεων $\{x_k\}$, έτσι ώστε να ισχύει σε κάθε αξιολόγηση $\vec{x}_{k+1} = \vec{x}_k + \alpha_k \vec{p}_k$ και $\phi(\vec{x}_{k+1}) \leq \phi(\vec{x}_k)$, όπου \vec{p}_k μία μη μηδενική κατεύθυνση και α_k ένα μη μηδενικό βήμα προς την κατεύθυνση αυτή. Η μέθοδος Ενεργού Συνόλου βασίζεται στο Λήμμα του Farka [8], σύμφωνα με το οποίο:

Κάθε αποδεκτό διάνυσμα \vec{x} πρέπει είτε να ικανοποιεί τις πρώτης τάξης αναγκαίες συνθήκες KKT είτε να είναι αρχικό σημείο μίας αποδεκτής κατεύθυνσης μείωσης της αντικειμενικής συνάρτησης, δηλαδή πρέπει να ισχύει για την κατεύθυνση \vec{p}

$$A_\alpha^T \vec{p} \geq 0 \quad \text{και} \quad (g + H\vec{x})^T \vec{p} < 0 \quad (4.3)$$

Η μέθοδος Ενεργού Συνόλου που θα αναλυθεί παρακάτω υπολογίζει το Ενεργό Σύνολο μέσω ενός Συνόλου Εργασίας \mathcal{W} που αποτελείται από δείκτες σειρών του μητρώου D . Το Σύνολο Εργασίας έχει τη μορφή $\mathcal{W} = \{\mathcal{V}_1, \mathcal{V}_2, \dots, \mathcal{V}_{M_w}\}$ όπου M_w ο αριθμός των δεικτών στο \mathcal{W} . Ομοίως με το μητρώο των ενεργών περιορισμών A_α το μητρώο A_w , που είναι διάστασης $(M + M_w) \times N$, περιέχει τις κλίσεις των περιορισμών ισότητας και των περιορισμών ανισότητας στο \mathcal{W} . Η μορφή του μητρώου του Συνόλου Εργασίας είναι

$$A_w(x) = \begin{pmatrix} A \\ D_w(x) \end{pmatrix}$$

όπου το μητρώο D_w σχηματίζεται από τις M_w σειρές του μητρώου D που περιλαμβάνονται στο Σύνολο Εργασίας \mathcal{W} .

Μεταξύ των \mathcal{A} και \mathcal{W} υπάρχουν δύο σημαντικές διαφορές στον τρόπο ορισμού τους.

- Οι δείκτες του Συνόλου Εργασίας \mathcal{W} ορίζουν ένα υποσύνολο των σειρών του μητρώου D που είναι γραμμικά ανεξάρτητες από τις σειρές του μητρώου A , χωρίς να απαιτείται οι δείκτες του μητρώου D που συμπεριλαμβάνονται στο Σύνολο Εργασίας να αντιστοιχούν σε ενεργούς περιορισμούς ανισο-ισότητας.
- Το Ενεργό Σύνολο \mathcal{A} ορίζεται κατά μοναδικό τρόπο σε οποιοδήποτε σημείο \vec{x} , ενώ μπορούν να υπάρξουν πολλές διαφορετικές επιλογές για το Σύνολο Εργασίας \mathcal{W} .

Για δοσμένο Σύνολο Εργασίας \mathcal{W} και αντίστοιχο μητρώο A_w σε ένα σημείο \vec{x} , θα δοθούν στη συνέχεια οι ορισμοί ώστε το σημείο \vec{x} να καθίσταται καταρχήν στάσιμο σημείο του προβλήματος και στη συνέχεια ακρότατο του υποχώρου του προβλήματος. Τονίζεται ότι σύμφωνα με τον ορισμό του Συνόλου Εργασίας οι περιορισμοί που βρίσκονται σε αυτό δεν είναι απαραίτητως ενεργοί.

Ορισμός στάσιμου σημείου : Έστω \mathcal{W} ένα Σύνολο Εργασίας και \vec{x}^* ένα σημείο, τέτοιο ώστε να ισχύει $A\vec{x}^* = b$. Το \vec{x}^* είναι στάσιμο σημείο εάν υπάρχει διάνυσμα \vec{y} τέτοιο ώστε να ισχύει $g + H\vec{x}^* = A_w^T \vec{y}$. Ισοδύναμα, το \vec{x}^* είναι στάσιμο σημείο εάν η ποσότητα $Z_w^T(g + H\vec{x}^*)$ ισούται με το μηδέν, όπου Z_w^T είναι η βάση μηδενικού υποχώρου του A_w .

Στον παραπάνω ορισμό, με \vec{y} συμβολίζονται οι πολλαπλασιαστές Lagrange του τετραγωνικού προβλήματος με περιορισμούς ισότητας $A\vec{x}^* = b$ και $D_w\vec{x}^* = f_w$. Οι πρώτες M τιμές του \vec{y} δηλαδή είναι οι πολλαπλασιαστές λ των περιορισμών ισότητας και οι υπόλοιπες M_w τιμές του \vec{y} είναι οι πολλαπλασιαστές z_w των περιορισμών ανισο-ισότητας που ανήκουν στο Σύνολο Εργασίας. Με τον ορισμό του στάσιμου σημείου που δόθηκε δηλαδή ισχύει στο στάσιμο σημείο $g + H\vec{x}^* = A_w^T \vec{y} = A^T \lambda + D_w^T z_w$.

Ορισμός ακρότατου υποχώρου : Έστω \mathcal{W} ένα Σύνολο Εργασίας στο σημείο \vec{x}^* και Z_w^T η βάση του μηδενικού υποχώρου του A_w . Το \vec{x}^* είναι ακρότατο του υποχώρου που ορίζει το Σύνολο Εργασίας \mathcal{W} εάν η ποσότητα $Z_w^T H Z_w$ είναι θετικά ημι-ορισμένη. Εάν κάθε περιορισμός στο Σύνολο Εργασίας είναι ενεργός το \vec{x}^* ονομάζεται κανονικό ακρότατο υποχώρου, ενώ διαφορετικά ονομάζεται μη-κανονικό ακρότατο υποχώρου.

4.2 Μέθοδος Ενεργού Συνόλου Μη-Δεσμευτικής Κατεύθυνσης

Οι ορισμοί που προηγήθηκαν είναι απαραίτητοι για να αναπτυχθεί η μέθοδος Ενεργού Συνόλου μη-δεσμευτικής κατεύθυνσης. Η μέθοδος μη-δεσμευτικής κατεύθυνσης εκκινείται πάντα σε ένα κανονικό ακρότατο υποχώρου \vec{x}^* , ισχύει δηλαδή στην έναρξη της επαναληπτικής διαδικασίας $g + H\vec{x}^* = A^T\lambda + D_w^T z_w$ και όλοι οι περιορισμοί στο Σύνολο Εργασίας είναι ενεργοί. Εάν το διάνυσμα \vec{x}^* είναι κανονικό ακρότατο υποχώρου και για τους πολλαπλασιαστές Lagrange των ανισο-ισοτήτων στο Σύνολο Εργασίας ισχύει $z_w > 0$, τότε το διάνυσμα \vec{x}^* είναι βέλτιστο για το τετραγωνικό πρόβλημα. Διαφορετικά υπάρχει δείκτης s για τον οποίο θα ισχύει $z_{w_s} < 0$. Αναζητείται λοιπόν μία κατεύθυνση \vec{p} που να ικανοποιεί τους περιορισμούς ισότητας και τους περιορισμούς ανισο-ισότητας στο Σύνολο Εργασίας. Αναζητείται κατεύθυνση \vec{p} τέτοια ώστε να ικανοποιούνται οι σχέσεις

$$A_w \vec{p} = e_{M+s} \text{ και } (g + H\vec{x}^*)^T \vec{p} < 0 \quad (4.4)$$

όπου ο συμβολισμός e_j υποδηλώνει την j σειρά του μοναδιαίου μητρώου I .

Υπολογισμός Κατεύθυνσης

Κάθε κατεύθυνση \vec{p} που ικανοποιεί τη συνθήκη 4.4 ονομάζεται μη-δεσμευτική κατεύθυνση, διότι κάθε μη-αρνητικό βήμα προς αυτήν την κατεύθυνση θα αυξήσει το υπόλοιπο του περιορισμού ανισότητας με δείκτη s καθιστώντας τον ανενεργό. Επειδή όμως ο δείκτης s δεν αφαιρείται από το Σύνολο Εργασίας (τουλάχιστον όχι άμεσα), εύκολα συμπεραίνεται από αυτό για ποιο λόγο το Σύνολο Εργασίας δεν ταυτίζεται με το Ενεργό Σύνολο. Το διάνυσμα \vec{p} είναι λύση λοιπόν του υποπροβλήματος με περιορισμούς ισότητας

$$\begin{aligned} \min_{\vec{p}} \phi(\vec{x} + \vec{p}) \\ \text{s.t. } A_w \vec{p} = e_{M+s} \end{aligned} \quad (4.5)$$

Οι πρώτης τάξης αναγκαίες συνθήκες KKT για βέλτιστη λύση του προβλήματος 4.5 προϋποθέτουν την ύπαρξη διανύσματος \vec{r} τέτοιου ώστε να ισχύει

$$\frac{d\phi(\vec{x} + \vec{p})}{d\vec{p}} = A_w^T (\vec{y} + \vec{r}) ==>$$

$$(g^T + Hx^*) + H\vec{p} = A_w^T(\vec{y} + \vec{r}) \quad (4.6)$$

όπου με \vec{r} συμβολίζεται η κατεύθυνση των αρχικών πολλαπλασιαστών Lagrange προς τους τελικούς πολλαπλασιαστές Lagrange που αντιστοιχούν στο σημείο $(\vec{x} + \vec{p})$. Προκύπτει, έτσι, το προς επίλυση σύστημα εξισώσεων για το πρόβλημα 4.5

$$\begin{pmatrix} H & A_w^T \\ A_w & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{p} \\ -\vec{r} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -(g + Hx^*) + A_w^T\vec{y} \\ e_{M+s} \end{pmatrix} \quad (4.7)$$

Έστω τώρα ότι το διάνυσμα x^* είναι ακρότατο υποχώρου για το πρόβλημα 4.5 και ισχύουν για αυτό $g + Hx^* = A_w^T\vec{y}$ και $z_{w_s} < 0$. Τα διανύσματα \vec{p} και \vec{r} που ικανοποιούν το διευρυμένο σύστημα εξισώσεων 4.7 της μορφής

$$\begin{pmatrix} H & A_w^T \\ A_w & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{p} \\ -\vec{r} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -(g + Hx^*) + A_w^T\vec{y} \\ e_{M+s} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ e_{M+s} \end{pmatrix} \quad (4.8)$$

αποτελούν μοναδική λύση του προβλήματος ισότητας που ορίζεται από το ακρότατο υποχώρου της συνάρτησης $\phi(\vec{x} + \vec{p})$ υπό τον περιορισμό $A_w p = e_{m+s}$.

Ακόμα, από τη σχέση $g + Hx^* = A_w^T\vec{y}$, πολλαπλασιάζοντας με το διάνυσμα \vec{p} προκύπτει κάνοντας χρήση της δεύτερης εξίσωσης του συστήματος 4.7 η σχέση

$$(g + Hx^*)^T \vec{p} = y_{M+s} = z_{w_s} \quad (4.9)$$

και από την 1η εξίσωση του συστήματος 4.8 πολλαπλασιάζοντας πάλι με το διάνυσμα \vec{p} προκύπτει

$$\vec{p}^T H \vec{p} = r_{m+s} = r_{w_s} \quad (4.10)$$

Υπολογισμός Μήκους Βήματος

Αφού υπολογιστούν τα διανύσματα \vec{p} και \vec{r} επιλύοντας το σύστημα εξισώσεων 4.8 πρέπει να υπολογιστεί ένα μήκος βήματος α στην κατεύθυνση \vec{p} έτσι ώστε το νέο διάνυσμα $\vec{x}^{new} = \vec{x}^* + \alpha\vec{p}$ να τηρεί τους περιορισμούς και, συγχρόνως, να ισχύει για αυτό $\phi(\vec{x}^* + \alpha\vec{p}) \leq \phi(\vec{x}^*)$.

Εφόσον ισχύει για την κατεύθυνση \vec{p} που υπολογίστηκε η σχέση

$$\vec{p}^T H \vec{p} > 0$$

υπάρχει μήκος βήματος α_* για το οποίο η κλίση της συνάρτησης $\phi(\vec{x}^* + \alpha_*\vec{p})$ ως προς α θα μηδενίζεται. Θα ισχύει δηλαδή

$$\frac{d}{d\alpha}\phi(\vec{x}^* + \alpha_*\vec{p}) = (g + H\vec{x}^*)^T\vec{p} + \alpha_*\vec{p}^T H\vec{p} = 0 \quad (4.11)$$

Σύμφωνα με τη σχέση 4.11, το μήκος βήματος α που ελαχιστοποιεί τη συνάρτηση $\phi(\vec{x}^* + \alpha\vec{p})$ συναρτήσει του α δίνεται από τη σχέση

$$\alpha_* = -(g + H\vec{x}^*)^T\vec{p}/\vec{p}^T H\vec{p} \quad (4.12)$$

Κάνοντας χρήση των σχέσεων 4.9 και 4.10, προκύπτει η σχέση για το βήμα α

$$\alpha_* = -(g + H\vec{x}^*)^T\vec{p}/\vec{p}^T H\vec{p} = -z_{w_s}/r_{w_s} \quad (4.13)$$

Εφόσον το $z_{w_s} < 0$, εάν $r_{w_s} = \vec{p}^T H\vec{p} > 0$ το βέλτιστο βήμα α_* είναι θετικό. Διαφορετικά θα ισχύει $r_{w_s} = \vec{p}^T H\vec{p} \leq 0$ και η συνάρτηση ϕ θα έχει μη οριοθετημένο ακρότατο υποχώρου στην κατεύθυνση \vec{p} και για το μήκος βήματος θα ισχύει $\alpha_* = +\infty$.

Εάν η συνάρτηση ϕ είναι μη οριοθετημένη ή η τιμή της στο σημείο $(\vec{x}^* + \alpha_*\vec{p})$ δεν είναι αποδεκτή ως προς τους περιορισμούς, πρέπει να υπολογιστεί μια ποσότητα α_F που περιορίζει το μήκος βήματος α και αποτελεί το μέγιστο αποδεκτό μήκος βήμα από το σημείο \vec{x} κατά την κατεύθυνση \vec{p} . Το μέγιστο αποδεκτό μήκος βήματος α_F ορίζεται ως

$$\alpha_F = \min \{\alpha_i\} \quad \text{με} \quad \alpha_i = \begin{cases} \frac{D^T\vec{x}^* - f}{-D^T\vec{p}}, & \text{εάν } D^T\vec{p} < 0 \\ +\infty & \text{αλλιώς} \end{cases} \quad (4.14)$$

Το μήκος βήματος α υπολογίζεται τελικά ως το $\min \{\alpha_*, \alpha_F\}$. Εάν $\alpha = +\infty$, το τετραγωνικό πρόβλημα δεν έχει οριοθετημένη λύση και ο αλγόριθμος σταματά. Στη συζήτηση που ακολουθεί θεωρείται ότι το α είναι οριοθετημένο βήμα.

Διαγραφή Περιορισμού από το Σύνολο Εργασίας

Αφού το βήμα α έχει υπολογιστεί, το νέο διάνυσμα \vec{x} είναι το $\vec{x}_{k+1} = \vec{x}_k + \alpha\vec{p}_k$. Η συγκρότηση του νέου Συνόλου Εργασίας βασίζεται στο μήκος βήματος που επιλέχτηκε. Διακρίνονται δύο περιπτώσεις

Περίπτωση 1 : Να είναι $\alpha = \alpha_*$. Στην περίπτωση αυτή, αφού το α_* που ελαχιστοποιεί το $\phi(\vec{x} + \alpha\vec{p})$ προκύπτει από τη σχέση $\alpha_* = -z_{w_s}/r_{w_s}$, ισχύει $z_{w_s} + \alpha_*r_{w_s} = 0$, που υποδηλώνει ότι ο πολλαπλασιαστής Lagrange που συνδέεται με

τον περιορισμό με δείκτη s είναι μηδέν στο σημείο \vec{x}_{k+1} . Αποτέλεσμα του περιορισμού που θέτει το μήκος βήματος α_* είναι ο παρακάτω ορισμός

Διαγραφή Περιορισμού : Έστω \vec{x}^* ένα ακρότατο υποχώρου ως προς το Σύνολο Εργασίας \mathcal{W} . Θεωρείται ότι $z_{w_s} < 0$. Έστω \vec{x}_{k+1} το διάνυσμα που ισούται με την ποσότητα $\vec{x}_k + \alpha\vec{p}$, όπου το διάνυσμα \vec{p} ορίζεται από τη σχέση 4.8 και το μήκος βήματος $\alpha = \alpha_*$ είναι οριοθετημένο. Τότε το διάνυσμα \vec{x}_{k+1} είναι ακρότατο υποχώρου ως προς το Σύνολο Εργασίας $\mathcal{W} = \mathcal{W} - \{\mathcal{V}_s\}$.

Η απόδειξη του θεωρήματος αυτού υπερβαίνει κατά πολύ την ουσία της περιγραφής της μεθόδου και δεν παρατίθεται.

Περίπτωση 2 : Να είναι $\alpha = \alpha_F$. Στην περίπτωση αυτή, το α είναι το μήκος βήματος προς τον περιορισμό $D_r^T \vec{x} \geq f_r$ που γίνεται ενεργός και είναι υποψήφιος για να συμπεριληφθεί στο ανανεωμένο Σύνολο Εργασίας στο σημείο $\vec{x} + \alpha\vec{p}$. Ο καθορισμός του νέου Συνόλου Εργασίας όμως βασίζεται στο εάν ο περιορισμός που μπλοκάρει τη μείωση της αντικειμενικής συνάρτησης είναι εξαρτώμενος από τους περιορισμούς που βρίσκονται ήδη στο εργαζόμενο σύνολο ή όχι. Εάν το D_r είναι γραμμικά ανεξάρτητο από τις στήλες του A_w^T , τότε ο δείκτης r προστίθεται στο Σύνολο Εργασίας. Διαφορετικά, όπως θα αναφερθεί και στη συνέχεια, ορίζεται ένα νέο Σύνολο Εργασίας αντικαθιστώντας το δείκτη s με το δείκτη r . Σε επόμενο ορισμό αναφέρεται και κατάλληλη διαδικασία ελέγχου της ανεξαρτησίας του D_r από τις στήλες του A_w^T .

Έλεγχος Ανεξαρτησίας και Προσθήκη Περιορισμού στο Σύνολο Εργασίας

Έλεγχος Ανεξαρτησίας Περιορισμών : Έστω \vec{x}^* ένα ακρότατο υποχώρου και r ο δείκτης του περιορισμού ανισότητας που περιορίζει το μήκος βήματος κατά την κατεύθυνση \vec{p} . Ορίζονται διανύσματα u και v τέτοια ώστε να ισχύει

$$\begin{pmatrix} H & A_w^T \\ A_w^T & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_r \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.15)$$

τότε

1. το d_r και οι στήλες του μητρώου A_w^T είναι γραμμικά ανεξάρτητα αν και μόνο αν $u \neq 0$
2. $v_{m+s} = d_r^T \vec{p} < 0$ και εάν $u \neq 0$, τότε είναι $u^T d_r > 0$.

Η απόδειξη του θεωρήματος για τον έλεγχο της ανεξαρτησίας των περιορισμών είναι σχετικά απλή. Οι εξισώσεις του συστήματος 4.15 δίνουν $Hu + A_w^T v = d_r$ και $A_w^T u = 0$. Εάν $u = 0$, ισχύει $A_w^T v = d_r$, που σημαίνει ότι το d_r θα είναι γραμμικά εξαρτημένο από τις στήλες του μητρώου A_w^T . Για το δεύτερο συμπέρασμα του θεωρήματος γίνεται χρήση των σχέσεων 4.8 και 4.15 και προκύπτει η ακολουθία σχέσεων

$$v_{m+s} = e_{m+s}^T v = \bar{p}^T A_w v = p^T (d_r - Hu) = p^T d_r - r^T A_w u = d_r^T p < 0$$

όπου η τελευταία σχέση προκύπτει από το γεγονός ότι το γινόμενο $d_r^T p$ πρέπει να είναι αρνητικό εάν ο περιορισμός $d_r^T x \geq f_r$ είναι δεσμευτικός για το πρόβλημα.

Στον ορισμό που ακολουθεί γίνεται ανάλυση της ανανέωσης των τιμών των πολλαπλασιαστών Lagrange κατόπιν προσθήκης περιορισμού στο Σύνολο Εργασίας.

Προσθήκη Περιορισμού : Έστω \bar{x}^* ένα ακρότατο υποχώρου και r ο δείκτης του περιορισμού που περιορίζει το μήκος βήματος κατά την κατεύθυνση \bar{p} . Τα διανύσματα u και v ικανοποιούν το σύστημα 4.15.

1. Εάν το d_r και οι στήλες του μητρώου A_w^T είναι γραμμικά ανεξάρτητες, τότε το διάνυσμα \bar{y} που προκύπτει επεκτείνοντας το διάνυσμα $\bar{y} + \alpha \bar{r}$ προσθέτοντας έναν μηδενικό όρο, ικανοποιεί τη σχέση $g + H(\bar{x}) = \bar{A}_w^T \bar{y}$, όπου με \bar{A}_w^T συμβολίζεται το μητρώο A_w^T στο οποίο έχει προστεθεί η γραμμή d_r^T στο τέλος του πίνακα A_w^T .
2. Εάν το d_r και οι στήλες του μητρώου A_w^T είναι γραμμικά εξαρτημένες, τότε το διάνυσμα \bar{y} οριζόμενο ως

$$\bar{y} = \bar{y} + \alpha \bar{r} - \sigma v \quad \mu\epsilon \quad \sigma = [y + \alpha r]_{M+s} / v_{M+s}$$

ικανοποιεί την εξίσωση $g + H(\bar{x}) = A_w^T \bar{y} + \sigma d_r$ με $\bar{y}_{M+s} = 0$ και $\sigma > 0$.

Η απόδειξη του πρώτου συμπεράσματος του παραπάνω ορισμού είναι απλή καθώς η πρώτη από τις σχέσεις του συστήματος 4.8 υποδηλώνει ότι για ένα μήκος βήματος α προς την κατεύθυνση \bar{p} , ισχύει

$$\phi'(\bar{x}^* + \alpha \bar{p}) = g + H\bar{x}^* + \alpha H\bar{p} = A_w^T \bar{y} + \alpha A_w^T \bar{r} = A_w^T (\bar{y} + \alpha \bar{r})$$

που σημαίνει ότι η κλίση της αντικειμενικής στο σημείο $(\bar{x} + \alpha \bar{p})$ είναι γραμμικός συνδυασμός των στηλών του μητρώου A_w^T . Προκύπτει, λοιπόν, ότι $\phi'(\bar{x} + \alpha \bar{p}) =$

$\phi'(\bar{x}) = A_w^T(\bar{y} + \alpha \bar{r})$. Εφόσον το d_r και οι στήλες του A_w^T είναι γραμμικά ανεξάρτητες, μπορεί στο εργαζόμενο σύνολο \mathcal{W} να προστεθεί ο δείκτης r και να οριστεί το μητρώο κλίσεων του νέου Συνόλου Εργασίας $\bar{A}_w^T = (A_w^T \ d_r)$. Προκύπτει έτσι η σχέση $\phi'(\bar{x}) = \bar{A}_w^T \bar{y}$, με το \bar{y} να δίνεται από το διάνυσμα $\bar{y} + \alpha \bar{r}$ προσθέτοντάς του μία μηδενική συνιστώσα.

Έστω, τώρα, ότι τα d_r και A_w^T γραμμικά εξαρτημένα. Σύμφωνα με το σύστημα 4.15 θα είναι $u = 0$ και θα υπάρχει μοναδικό v τέτοιο ώστε να ισχύει $d_r = A_w^T v$. Για οποιαδήποτε ποσότητα σ θα ισχύει

$$\phi'(\bar{x}) = A_w^T(\bar{y} + \alpha \bar{r} - \sigma v) + \sigma d_r.$$

Εαν επιλεγθεί $\sigma = [y + \alpha r]_{m+s} / v_{m+s}$ και τεθεί $\bar{y} = \bar{y} + \alpha \bar{r} - \sigma v$ τότε

$$\phi'(\bar{x}) = A_w^T \bar{y} + \sigma d_r \quad \text{με} \quad \bar{y}_{m+s} = [y + \alpha r - \sigma v]_{m+s} = 0.$$

Προκύπτει δηλαδή ότι το $\phi'(\bar{x})$ είναι γραμμικός συνδυασμός του d_r και κάθε στήλης του A_w^T εκτός από το d_s .

Η ανάλυση σχετικά με τη σχέση που έχουν τα d_r και οι στήλες του A_w^T οδηγούν στο εξής συμπέρασμα. Έστω \bar{x}^* ένα ακρότατο υποχώρου και r ο δείκτης του περιορισμού που περιορίζει το μήκος βήματος κατά την κατεύθυνση \bar{p} .

1. Εαν το d_r είναι γραμμικά ανεξάρτητο από τις στήλες του μητρώου A_w^T , τότε το \bar{x} είναι ακρότατο υποχώρου που ορίζει το Σύνολο Εργασίας $\bar{\mathcal{W}} = \mathcal{W} + \{r\}$.
2. Εάν το d_r είναι εξαρτημένο από τις στήλες του A_w^T , τότε το \bar{x} είναι ακρότατο υποχώρου που ορίζει το Σύνολο Εργασίας $\bar{\mathcal{W}} = \mathcal{W} + \{r\} - \{v_s\}$.

Η απόδειξη του παραπάνω συμπεράσματος παραλείπεται. Το πρώτο μέρος του συμπεράσματος υποδηλώνει ότι το \bar{x} είναι ακρότατο υποχώρου και πριν και αφότου μία ανεξάρτητη μεταβλητή προστεθεί στο Σύνολο Εργασίας. Το γεγονός αυτό είναι πολύ μεγάλης σημασίας για τη μέθοδο γιατί δείχνει ότι οι υπολογιζόμενες κατευθύνσεις \bar{p} και \bar{r} ικανοποιούν τις συνθήκες KKT του συστήματος 4.8 αντικαθιστώντας το A_w^T με το \bar{A}_w^T στην επόμενη επανάληψη. Το δεύτερο μέρος του συμπεράσματος δείχνει ότι οι περιορισμοί στο Σύνολο Εργασίας μπορούν να είναι γραμμικά εξαρτημένοι μόνο σε έναν κανονικό ακρότατο υποχώρου που ορίζει ένα Σύνολο Εργασίας, το οποίο δεν περιλαμβάνει τον περιορισμό \mathcal{V}_s . Ο περιορισμός \mathcal{V}_s πρέπει, δηλαδή, να αφαιρεθεί από το Σύνολο Εργασίας. Ο περιορισμός $d_{v_s}^T \bar{x} \geq f_{v_s}$ διαδραματίζει σημαντικό ρόλο στον ορισμό της κατεύθυνσης αναζήτησης και ονομάζεται μη-δεσμευτικός περιορισμός Συνόλου Εργασίας. Η μέθοδος αυτή παράγει μία σειρά επαναλήψεων που ξεκινούν και τελειώνουν σε ένα κανονικό ακρότατο υποχώρου. Ο μη-δεσμευτικός περιορισμός

$d_{v_s}^T \vec{x} \geq f_{v_s}$ εντοπίζεται στην αρχή της διαδικασίας και αφαιρείται στο τελευταίο στάδιο αυτής. Συνοψίζοντας τα παραπάνω, συμπεραίνεται ότι σε κάθε επανάληψη πραγματοποιείται η επίλυση δύο συστημάτων εξισώσεων ΚΚΤ, των

$$\begin{pmatrix} H & A_w^T \\ A_w^T & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ e_{M+s} \end{pmatrix} \quad (4.16\alpha')$$

$$\begin{pmatrix} H & A_w^T \\ A_w^T & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_r \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.16\beta')$$

4.2.1 Εύρεση Αρχικού Στάσιμου Σημείου

Η προηγούμενη ενότητα επικεντρώθηκε στη δεύτερη φάση της μεθόδου Ενεργού Συνόλου, στη φάση της βελτιστοποίησης. Στην ενότητα αυτή περιγράφεται η διαδικασία κατά την οποία, ξεκινώντας από ένα αποδεκτό σημείο \vec{x}^0 , το οποίο ικανοποιεί τις σχέσεις

$$A\vec{x}^0 = b$$

$$D\vec{x}^0 \geq 0$$

υπολογίζεται ένα στάσιμο σημείο \vec{x}^* το οποίο ικανοποιεί τη σχέση

$$g + H\vec{x}^* = A^T\vec{\lambda} + D_w^T\vec{z}$$

Η εν λόγω διαδικασία αποτελεί την πρώτη φάση της μεθόδου του Ενεργού Συνόλου.

Έστω, λοιπόν, το σημείο \vec{x}^0 το οποίο είναι αποδεκτό ως προς τους περιορισμούς, δεν ικανοποιεί όμως τις συνθήκες ΚΚΤ. Για να ικανοποιούνται οι συνθήκες ΚΚΤ και να είναι το διάνυσμα \vec{x} στάσιμο σημείο της συνάρτησης φ θα πρέπει να ικανοποιείται το σύστημα εξισώσεων

$$\begin{pmatrix} H & A^T & D_w^T \\ A & 0 & 0 \\ D_w & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{p} \\ -\vec{r}_\lambda \\ -\vec{r}_w \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} g + H\vec{x} - A^T\vec{\lambda} - D_w^T\vec{z} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.17)$$

Έστω \vec{p} το διάνυσμα που προκύπτει από την επίλυση του συστήματος εξισώσεων 4.17. Εάν το διάνυσμα \vec{p} ισούται με μηδέν, τότε το διάνυσμα \vec{x} αποτελεί αποδεκτό στάσιμο σημείο της συνάρτησης φ . Διαφορετικά, όταν $\vec{p} \neq 0$, διακρίνονται δύο περιπτώσεις.

Αλγόριθμος 1 Μέθοδος Ενεργού Συνόλου μη-δεσμευτικής κατεύθυνσης

Εντοπισμός αρχικού \vec{x}^0 που ικανοποιεί τις $A\vec{x}^0 = b, D\vec{x}^0 \geq f, k = 0$.

Επιλογή Συνόλου Εργασίας \mathcal{W} . Επιλογή $\vec{\lambda}^0$ και \vec{z}_w^0 .

$[\vec{x}^0, \vec{\lambda}, \vec{z}_w, \mathcal{W}_0] = \text{subspaceMin}(\vec{x}, \lambda, \vec{z}_w, \mathcal{W})$. $M_w = |\mathcal{W}|$.

$s = \text{argmin}_i [z_w]_i$.

while $[z_w]_s < 0$ **do**

$$\text{Επίλυση συστήματος } \begin{pmatrix} H & A^T & D_w^T \\ A & 0 & 0 \\ D_w & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{p} \\ -\vec{r}_\lambda \\ -\vec{r}_w \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ e_s \end{pmatrix}.$$

$\alpha_F = \text{maxStep}(\vec{x}, \vec{p}, D, f)$

if $[r_w]_s > 0$ **then**

$\alpha_* = -[z_w]_s / [r_w]_s$

else

$\alpha_* = +\infty$

end if

$\alpha = \min\{\alpha_*, \alpha_F\}$

if $\alpha = +\infty$ **then**

stop.

▷ η λύση είναι μη οριοθετημένη

end if

$\vec{x} \leftarrow \vec{x} + \alpha \vec{p}, \quad \vec{\lambda} \leftarrow \vec{\lambda} + \alpha \vec{r}_\lambda, \quad \vec{z}_w \leftarrow \vec{z}_w + \alpha \vec{r}_w$

if $\alpha_F < \alpha_*$ **then**

▷ προσθήκη περιορισμού r στο Σύνολο Εργασίας

Επιλογή του δείκτη r του κατάλληλου περιορισμού.

$$\text{Επίλυση του συστήματος } \begin{pmatrix} H & A^T & D_w^T \\ A & 0 & 0 \\ D_w & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ u_\pi \\ u_w \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_r \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

if $u = 0$ **then**

$\sigma = [z_w]_s / [u_w]_s$

else

$\sigma = 0$

end if

$\vec{\lambda} \leftarrow \vec{\lambda} - \sigma v_\pi, \quad \vec{z}_w \leftarrow \begin{pmatrix} \vec{z}_w - \sigma v_w \\ \sigma \end{pmatrix}$

$\mathcal{W} \leftarrow \mathcal{W} + \{r\}, \quad M_w \leftarrow M_w + 1$.

end if

if $[z_w]_s = 0$ **then**

▷ διαγραφή περιορισμού \mathcal{V}_s από το Σύνολο Εργασίας

$\mathcal{W} \leftarrow \mathcal{W} - \{\mathcal{V}_s\}, \quad M_w \leftarrow M_w - 1$

for $i = s : m_w$ **do**

$[z_w]_i \leftarrow [z_w]_{i+1}$.

$s = \text{argmin}_i [z_w]_i$.

end for

end if

$k \leftarrow k + 1$

end while

Στην πρώτη περίπτωση το διάνυσμα $\vec{x} + \vec{p}$ καθιστά κάποιον από τους περιορισμούς ανισο-ισότητας μη-αποδεκτό. Στην περίπτωση αυτή, πρέπει να υπολογιστεί ένα μη αρνητικό μέγιστο μήκος βήματος α , το οποίο θα περιορίζει το βήμα του διανύσματος των μεταβλητών βελτιστοποίησης και θα το διατηρεί αποδεκτό ως προς όλους τους περιορισμούς. Στη συνέχεια, ο δείκτης του περιορισμού ανισο-ισότητας που καθορίζει το μέγιστο μήκος βήματος α , προστίθεται στο Σύνολο Εργασίας και ο αλγόριθμος συνεχίζει στην επόμενη επανάληψη, επιλύοντας διαδοχικά συστήματα της μορφής 4.17 έως ότου το διάνυσμα \vec{p} υπολογιστεί μηδενικό, όποτε και τερματίζεται η διαδικασία.

Στη δεύτερη περίπτωση, το διάνυσμα $\vec{x} + \vec{p}$ είναι αποδεκτό ως προς τους περιορισμούς. Στο σημείο αυτό, θα ισχύει η σχέση

$$g + H(\vec{x} + \vec{p}) = A^T(\vec{\lambda} + \vec{r}_\lambda) + D_w^T(\vec{z} + \vec{r}_w) \quad (4.18)$$

Εφόσον ισχύει η σχέση 4.18 το διάνυσμα $\vec{x} + \vec{p}$ αποτελεί στάσιμο σημείο της συνάρτησης φ ως προς το Σύνολο Εργασίας \mathcal{W} και, στην επόμενη επανάληψη, το διάνυσμα \vec{p}_{k+1} θα είναι μηδενικό, οπότε και ο αλγόριθμος τερματίζεται. Το σημείο αυτό, πλέον, είναι ικανό ώστε, από αυτό, να εκκινήσει η επαναληπτική διαδικασία εύρεσης του ελαχίστου της συνάρτησης φ που περιγράφηκε στην προηγούμενη παράγραφο.

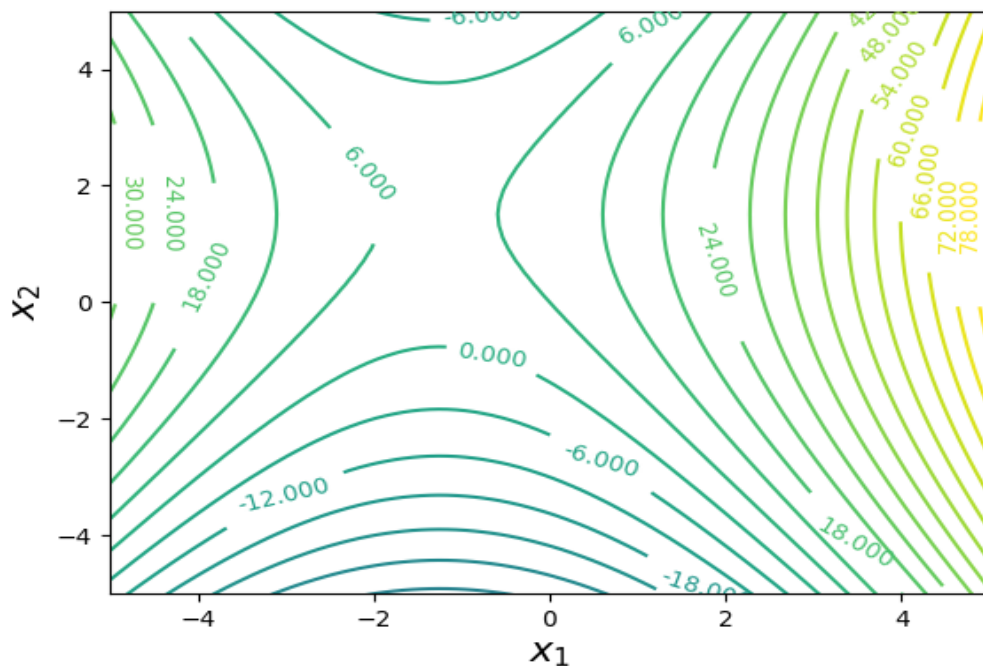
4.2.2 Εφαρμογές Τετραγωνικού Προγραμματισμού

Στην ενότητα αυτή επιλύονται μαθηματικά προβλήματα Τετραγωνικού Προγραμματισμού με τη μέθοδο του Ενεργού Συνόλου. Το πρώτο πρόβλημα που θα επιλυθεί είναι ένα απλό μαθηματικό πρόβλημα, το οποίο χρησιμοποιείται λόγω της δυνατότητας που παρέχει να παρουσιαστεί γραφικά η επίλυση του, χωρίς να απαιτούνται παράλληλα πολλές επαναλήψεις, γεγονός που θα καθιστούσε την αναλυτική παρουσίασή του προβληματική. Στη συνέχεια, επιλύονται διάφορα μαθηματικά προβλήματα Τετραγωνικού Προγραμματισμού, τα οποία έχουν ληφθεί, όπως και στο Κεφάλαιο 3, από τη συλλογή των **Hock** και **Schittkowski** και θα παρουσιαστούν τα αποτελέσματα της επίλυσης.

Το πρώτο προς επίλυση πρόβλημα προς ελαχιστοποίηση είναι το

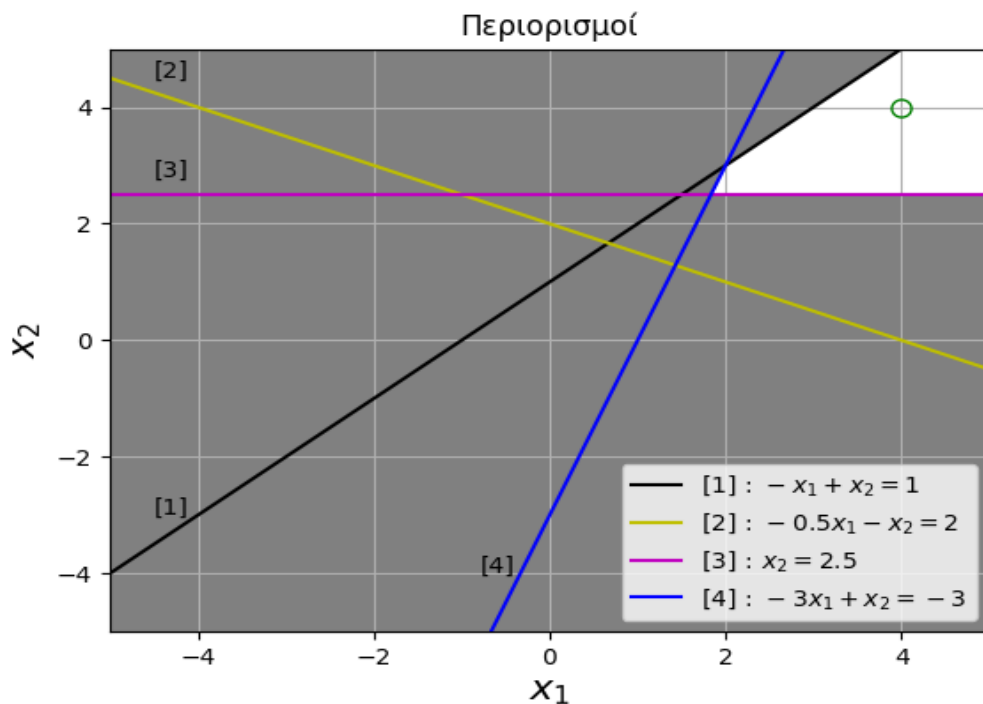
$$\begin{aligned} \min f &= 2x_1^2 - x_2^2 + 5x_1 + 3x_2 + 6 \\ & \quad x_1 - x_2 + 1 \geq 0 \\ & \quad \frac{1}{2}x_1 + x_2 - 2 \geq 0 \\ & \quad x_2 - 2.5 \geq 0 \\ & \quad 3x_1 - x_2 - 3 \geq 0 \end{aligned} \quad (4.19)$$

υπό τους περιορισμούς



Σχήμα 4.1: Ισοϋψείς καμπύλες της αντικειμενικής συνάρτησης f

Στο Σχήμα 4.1 φαίνονται οι ισοϋψείς καμπύλες της αντικειμενικής συνάρτησης που δίνουν τη δυνατότητα παρακολούθησης της συμπεριφοράς της αντικειμενικής συνάρτησης ανάλογα με τη μεταβολή των μεταβλητών βελτιστοποίησης. Στη συνέχεια θα γίνει βήμα προς βήμα ανάλυση της διαδικασίας βελτιστοποίησης κάνοντας χρήση της γραφικής απεικόνισης των περιορισμών ανισο-ισότητας. Στη γραφική απεικόνιση αυτή όταν ένας περιορισμός ανισο-ισότητας είναι ενεργός θα παριστάνεται με κόκκινο χρώμα, ενώ όταν είναι ανενεργός θα παριστάνεται με διαφορετικό χρώμα. Το σημείο εκκίνησης της διαδικασίας βελτιστοποίησης είναι το σημείο $\vec{x} = [4.0, 4.0]$ στο οποίο όλοι οι περιορισμοί είναι ανενεργοί. Στο Σχήμα 4.2 δίνεται η γραφική απεικόνιση των περιορισμών και φαίνεται η περιοχή στην οποία οι μεταβλητές βελτιστοποίησης δίνουν αποδεκτές λύσεις ως προς αυτούς.



Σχήμα 4.2: Περιορισμοί των μεταβλητών βελτιστοποίησης - Αρχική Κατάσταση. Με γκρι χρώμα σκιαγραφείται η περιοχή μη-αποδεκτών λύσεων, ενώ με λευκό η περιοχή αποδεκτών λύσεων.

1η Επανάληψη

Το σημείο εκκίνησης της πρώτης επανάληψης είναι αυτό που φαίνεται στο Σχήμα 4.2 και η αντικειμενική συνάρτηση έχει την τιμή $f = 54$. Η πρώτη επανάληψη εκκινεί όντας στη Φάση 1 της μεθόδου του Ενεργού Συνόλου, όπου αναζητείται στάσιμο σημείο της συνάρτησης Lagrange. Κατά την πρώτη επανάληψη υπολογίζεται ως κατεύθυνση βελτίωσης το διάνυσμα $\Delta \vec{x} = [-5.25, -2.5]$. Όπως φαίνεται και στο Σχήμα 4.2, εάν η λύση κινηθεί κατά $\Delta \vec{x}$ θα παραβιάσει τον περιορισμό [1] για οποιοδήποτε μήκος βήματος $\alpha > 0.3636$. Για το λόγο αυτό, οι μεταβλητές βελτιστοποίησης μεταβάλλονται σύμφωνα με τη σχέση

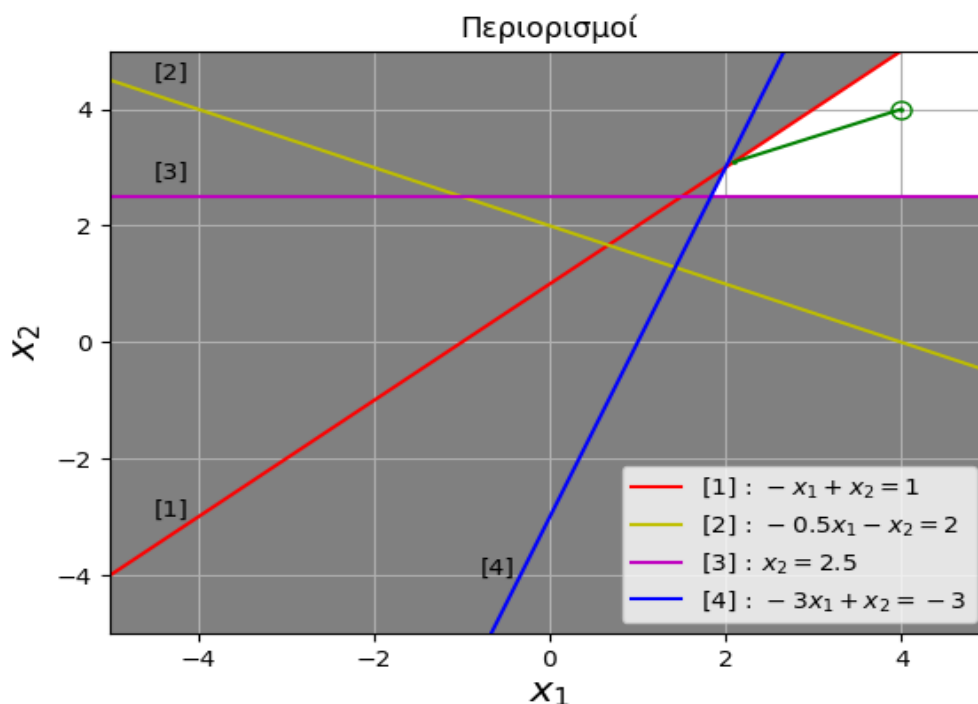
$$\vec{x}^{new} = \vec{x}^{old} + \alpha \Delta \vec{x}$$

όπου $\alpha = 0.3636$. Η νέα τιμή των μεταβλητών βελτιστοποίησης είναι τώρα

$$\vec{x}^1 = [2.09, 3.09]$$

και το Σύνολο Εργασίας που αρχικά ήταν κενό, περιλαμβάνει πλέον τον δείκτη 1, $\mathcal{W} = 1$, που αντιστοιχεί στον πρώτο περιορισμό ανισο-ισότητας. Στο Σχήμα 4.3 φαίνεται η μεταβολή των μεταβλητών βελτιστοποίησης και χρωματίζεται με κόκκινο χρώμα ο περιορισμός υπ' αριθμόν [1], που υποδηλώνει την είσοδο του στο Σύνολο Εργασίας. Ο

περιορισμός υπ' αριθμόν [4] δεν είναι ενεργός, παρόλο που η λύση είναι πολύ στο να τον καθιστά ενεργό, για αυτό το λόγο κιόλας το χρώμα του έχει παραμείνει μπλε.



Σχήμα 4.3: Περιορισμοί των μεταβλητών βελτιστοποίησης - Επανάληψη 1

2η Επανάληψη

Το σημείο εκκίνησης της δεύτερης επανάληψης είναι αυτό που φαίνεται στο Σχήμα 4.3. Η τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης στο σημείο αυτό είναι $f = 24.9$. Η νέα κατεύθυνση βελτίωσης υπολογίζεται ως $\Delta \vec{x} = [-5.09, -5.09]$, όμως όπως φαίνεται και στο Σχήμα 4.3 ο περιορισμός [4] είναι πάρα πολύ κοντά στο να παραβιαστεί, οπότε και το βήμα που μπορεί να γίνει προς την κατεύθυνση $\Delta \vec{x}$ πολλαπλασιάζεται με το μέγιστο αποδεκτό μήκος βήματος $\alpha = 0.01785$. Το νέο διάνυσμα των μεταβλητών βελτιστοποίησης είναι το

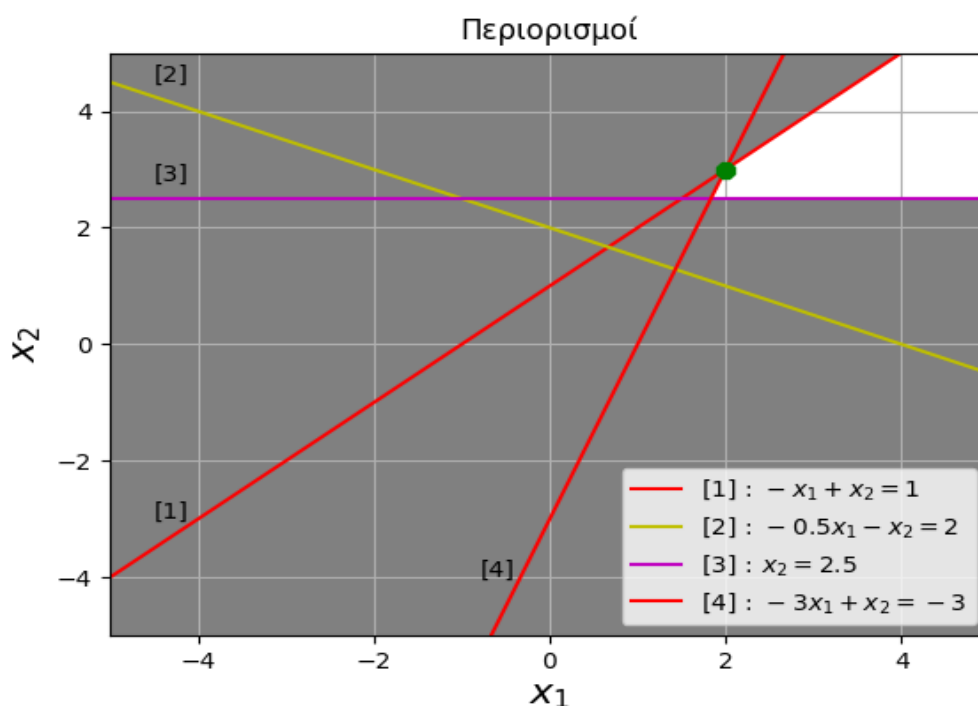
$$\vec{x}^2 = [2., 3.]$$

και ο περιορισμός [4] γίνεται ενεργός και προστίθεται στο Σύνολο Εργασίας, το οποίο είναι πλέον το $\mathcal{W} = 1,4$. Η γραφική απεικόνιση των παραπάνω φαίνεται στο Σχήμα 4.4. Μετά το πέρας της δεύτερης επανάληψης η επαναληπτική διαδικασία της Φάσης 1 της μεθόδου Ενεργού Συνόλου τερματίζεται, καθώς το σημείο $\vec{x}^2 = [2., 3.]$ είναι στάσιμο σημείο της συνάρτησης Lagrange για τους υπολογισμένους στην επανάληψη

αυτή πολλαπλασιαστές Lagrange

$$\vec{z} = [-2., 0, 0, 5.]$$

Η τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης κατά την ολοκλήρωση της πρώτης φάσης της μεθόδου είναι $f = 24.$.



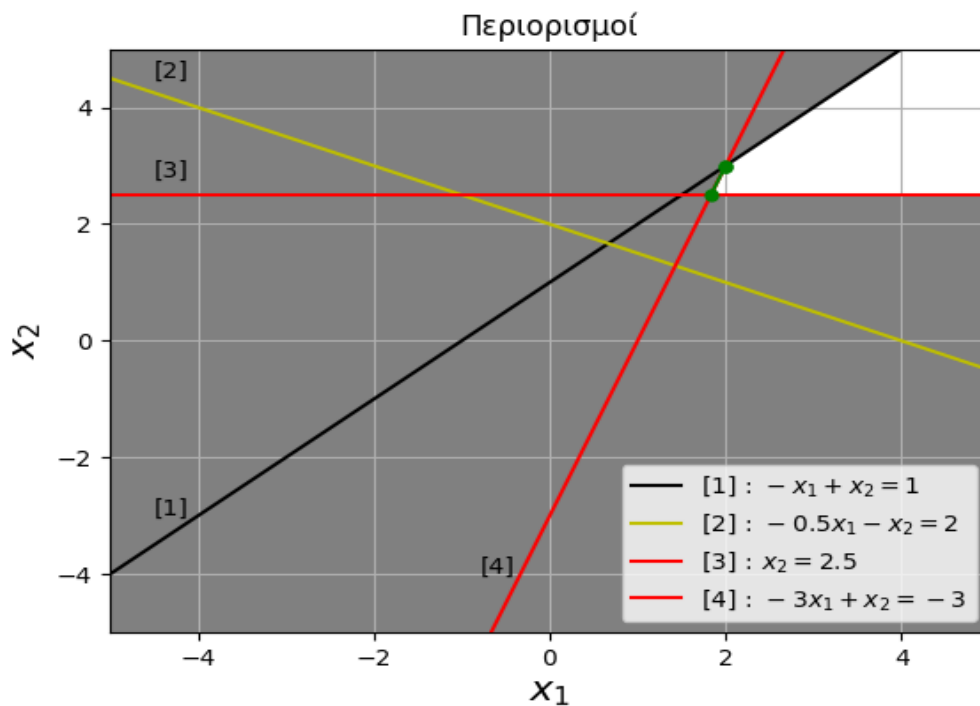
Σχήμα 4.4: Περιορισμοί των μεταβλητών βελτιστοποίησης - Επανάληψη 2

3η Επανάληψη

Στο σημείο αυτό εφόσον έχει βρεθεί στάσιμο σημείο της αντικειμενικής συνάρτησης, η μέθοδος του Ενεργού Συνόλου εισέρχεται στη Φάση 2, όπου στόχος είναι η ελαχιστοποίηση της αντικειμενικής συνάρτησης βρίσκοντας σε κάθε επανάληψη σημεία που μειώνουν τη συνάρτηση αυτή και παράλληλα διατηρούν την ιδιότητα του στάσιμου σημείου. Κατά την επίλυση του συγκεκριμένου προβλήματος έχει εντοπιστεί ήδη ένα στάσιμο σημείο κατά τη δεύτερη επανάληψη και η κατάσταση στην οποία βρίσκεται η επίλυση στο σημείο αυτό απεικονίζεται στο Σχήμα 4.4. Εκκινώντας από το σημείο αυτό η νέα κατεύθυνση βελτίωσης των μεταβλητών βελτιστοποίησης υπολογίζεται ως $\Delta\vec{x} = [-0.5, -1.5]$. Η μετακίνηση αυτή, όπως φαίνεται και στο Σχήμα 4.4 θα παραβίαζε τον περιορισμό [3] και για αυτό το λόγο η μετατόπιση κατά αυτό το βήμα περιορίζεται από το μήκος βήματος $\alpha = 0.333$. Η νέα τιμή λοιπόν των μεταβλητών βελτιστοποίησης είναι

$$\bar{x}^3 = [1.83, 2.5]$$

και ο περιορισμός [4] γίνεται ενεργός και για το λόγο αυτό προστίθεται στο Σύνολο Εργασίας. Παράλληλα όμως αφαιρείται από το Σύνολο Εργασίας ο δείκτης [1], ο οποίος αντιστοιχεί στον πρώτο περιορισμό, ο οποίος καθίσταται πλέον ανενεργός. Η γραφική επιβεβαίωση των παραπάνω φαίνεται στο Σχήμα 4.5



Σχήμα 4.5: Περιορισμοί των μεταβλητών βελτιστοποίησης - Επανάληψη 3

Το νέο διάνυσμα των πολλαπλασιαστών Lagrange που υπολογίζεται σε αυτή την επανάληψη είναι το

$$\bar{z} = [0, 0, 2.11, 4.11]$$

Το σύνολο των πολλαπλασιαστών Lagrange έχουν πλέον θετικό πρόσημο, οπότε το σημείο που έχει υπολογιστεί θεωρείται βέλτιστο και η τελική τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης στο σημείο αυτό είναι $f = 23.09$. Πράγματι το Σχήμα 4.1 επιβεβαιώνει ότι η κατεύθυνση μείωση της αντικειμενικής συνάρτησης είναι αυτή που ακολουθείται στις επαναλήψεις που πραγματοποιήθηκαν και το Σχήμα 4.5 επιβεβαιώνει ότι η τιμή που υπολογίστηκε είναι η ελάχιστη αποδεκτή προς αυτή την κατεύθυνση. Προκύπτει λοιπόν ότι η λύση που επιτεύχθηκε με τη μέθοδο του Ενεργού Συνόλου επιβεβαιώνεται και με τη γραφική επίλυση του προβλήματος.

Στη συνέχεια, επιλύεται ακόμα ένα μαθηματικό πρόβλημα Τετραγωνικού Προγραμματισμού, που έχει αυτή τη φορά δύο είδη περιορισμών, ισότητας και ανισο-ισότητας. Το πρόβλημα αυτό είναι το

$$\begin{aligned} \min f_2 &= x_1^2 - 8x_1x_2 + 3x_1x_4 + 16x_2^2 + x_3^2 + x_3x_4 + x_4^2 - 5x_1 - 2x_2 - 5x_3 - 2x_4 \\ \text{υπό τους περιορισμούς} \quad & x_1 + x_2 + 5x_4 = 0 \\ & x_i \geq 0, i = 1, 2, 3, 4 \end{aligned} \quad (4.20)$$

Εκκινώντας από το σημείο $\vec{x}^0 = [1., 1., 0., 2.5]$ εισέρχεται η μέθοδος βελτιστοποίησης στη Φάση 1 της μεθόδου Ενεργού Συνόλου, όπου αναζητείται στάσιμο σημείο. Στη Φάση αυτή εντοπίζεται μετά από μία μόνο επανάληψη ως στάσιμο το σημείο $\vec{x}^1 = [3.69, 0.91, 0, 0.92]$ και το διάνυσμα των πολλαπλασιαστών Lagrange των περιορισμών ανισο-ισότητας είναι το $\vec{z} = [0, 0, -4.077, 0]$. Η αντικειμενική συνάρτηση στο σημείο αυτό έχει μειωθεί από $f_2 = 2.56$ που ήταν αρχικά στην τιμή $f_2 = -11.077$. Εφόσον υπάρχει πολλαπλασιαστής Lagrange που έχει αρνητικό πρόσημο, η μέθοδος συνεχίζει στη Φάση 2, τη Φάση της βελτιστοποίησης, όπου εκεί ύστερα από μία ακόμα επανάληψη υπολογίζεται η βέλτιστη λύση του προβλήματος

$$\vec{x}^{opt} = [3.37, 0.83, 2.07, 0.84]$$

Στο σημείο αυτό, οι πολλαπλασιαστές Lagrange των περιορισμών ανισο-ισότητας είναι προφανώς όλοι μηδενικοί, οπότε και η λύση που εντοπίστηκε είναι βέλτιστη. Η τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης για τη βέλτιστη αυτή λύση είναι $f_2 = -15.31$.

Υπάρχουν πολλές φορές προβλήματα για την επίλυση των οποίων η μέθοδος του Ενεργού Συνόλου δεν εισέρχεται καθόλου στη Φάση 2, καθώς κατά την επαναληπτική διαδικασία εύρεσης στάσιμου σημείου στη Φάση 1 εντοπίζεται σημείο για το οποίο όλοι οι πολλαπλασιαστές Lagrange έχουν θετικό πρόσημο, που υποδηλώνει ότι η λύση είναι βέλτιστη. Τέτοια προβλήματα είναι συνήθως αυτά στα οποία υπάρχουν παραπάνω από ένας περιορισμός ισότητας, όπου και το σύνολο των αποδεκτών λύσεων περιορίζεται αισθητά από την απαίτηση να ισχύουν συγχρόνως όλοι. Τέτοιο πρόβλημα για παράδειγμα είναι το πρόβλημα 4.20, εάν σε αυτό προστεθεί ένας περιορισμός ισότητας. Για την επίλυση του προβλήματος

$$\begin{aligned} \min f_2 &= x_1^2 - 8x_1x_2 + 3x_1x_4 + 16x_2^2 + x_3^2 + x_3x_4 + x_4^2 - 5x_1 - 2x_2 - 5x_3 - 2x_4 \\ \text{υπό τους περιορισμούς} \quad & x_1 + x_2 + 5x_4 = 0 \\ & x_1 - x_2 + x_3 - x_4 - 0.6 = 0 \\ & x_i \geq 0, i = 1, 2, 3, 4 \end{aligned} \quad (4.21)$$

και για αρχικό σημείο $\vec{x}^0 = [5., 5., 2.6, 2.]$, απαιτούνται συνολικά δύο επαναλήψεις, όπως και στο προηγούμενο πρόβλημα, τώρα όμως πραγματοποιούνται και οι δύο κατά τη διάρκεια της Φάσης 1 της μεθόδου. Έτσι εκκινώντας από σημείο για το οποίο η αντικειμενική συνάρτηση έχει τιμή $f_2 = 218.96$, υπολογίζεται στην πρώτη επανάληψη νέο σημείο

$$\vec{x}^1 = [2.36, 1.07, 0, 6.86]$$

στο οποίο καθίσταται ο τρίτος περιορισμός ανισότητας ενεργός και η αντικειμενική συνάρτηση έχει την τιμή $f_2 = -6.24$, και στη δεύτερη και τελευταία επανάληψη υπολογίζεται το βέλτιστο σημείο

$$\vec{x}^2 = [1.8, 0.7, 0, 0.5]$$

για το οποίο όλοι οι πολλαπλασιαστές Lagrange των περιορισμών ανισο-ισότητας έχουν θετικό πρόσημο και η αντικειμενική συνάρτηση έχει την τιμή $f_2 = -7.45$.

Κεφάλαιο 5

Εφαρμογές Βελτιστοποίησης με τη μέθοδο SQP σε μαθηματικά προβλήματα με περιορισμούς ανισο-ισότητας

Στο Κεφάλαιο 3 όπου έγινε η παρουσίαση της μεθόδου του Διαδοχικού Τετραγωνικού Προγραμματισμού επιλύθηκαν μαθηματικά προβλήματα που είχαν μόνο περιορισμούς ισότητας. Στο Κεφάλαιο 4 έγινε παρουσίαση της μεθόδου Ενεργού Συνόλου, η οποία χρησιμοποιείται στην επίλυση προβλημάτων Τετραγωνικού Προγραμματισμού με περιορισμούς ανισο-ισότητας (όπου φυσικά μπορούν να υπάρχουν συγχρόνως και περιορισμοί ισότητας). Γνωρίζοντας πλέον και τον τρόπο επίλυσης του τετραγωνικού υποπροβλήματος που παράγεται σε κάθε εξωτερική επανάληψη της μεθόδου SQP, το οποίο είναι και το κρίσιμότερο σημείο της διαδικασίας, μπορεί να γίνει επίλυση μη-γραμμικών προβλημάτων με μη-γραμμικούς περιορισμούς και σε προβλήματα που έχουν και περιορισμούς ανισο-ισότητας. Αρχικά στο Κεφάλαιο αυτό θα γίνει επίλυση κάποιων μαθηματικών προβλημάτων βελτιστοποίησης, έτσι ώστε να γίνει επισκόπηση της διαδικασίας και να αναλυθεί η σύγκλιση της μεθόδου και, στη συνέχεια, θα εφαρμοστεί η μέθοδος του SQP σε προβλήματα αεροδυναμικής.

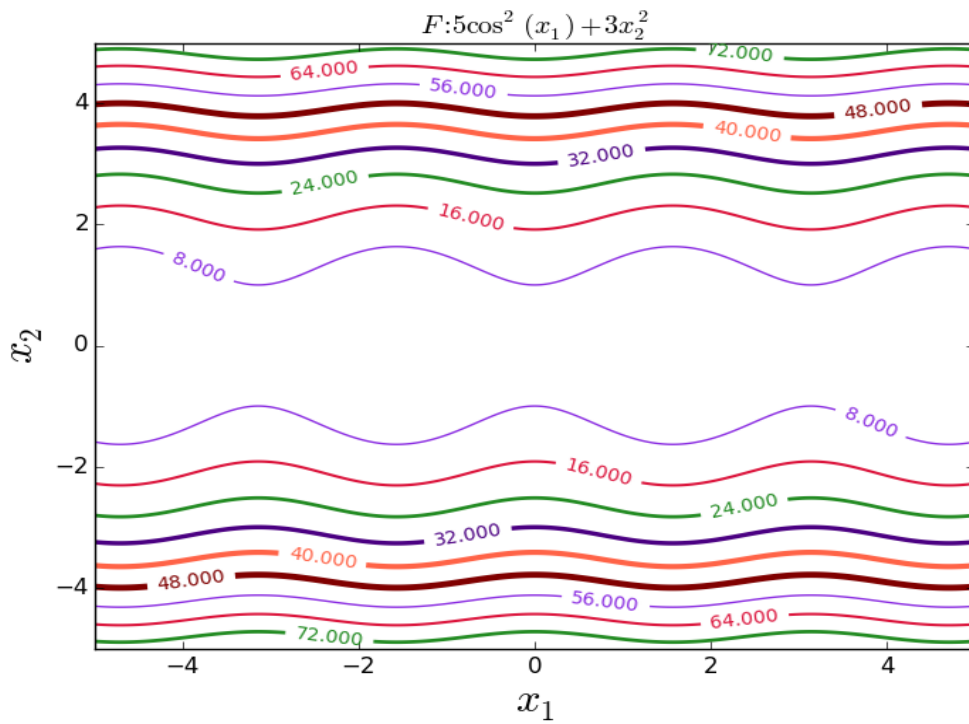
5.1 Εφαρμογές σε Μαθηματικά Προβλήματα

Τα προβλήματα που θα επιλυθούν στην παράγραφο αυτή, εκτός από το πρώτο το οποίο είναι παραλλαγή του προβλήματος [3.19], είναι μαθηματικά προβλήματα βελτιστοποίησης τα οποία βρίσκονται στη συλλογή προβλημάτων των **Hock** και **Schittkowski** [6], η οποία έχει χρησιμοποιηθεί ήδη στο Κεφάλαιο 3. Τα προβλήματα της παραγράφου αυτής είναι προβλήματα ελαχιστοποίησης μη-γραμμικών συναρτήσεων με μη-γραμμικούς περιορισμούς.

Αρχική επιλύεται το πρόβλημα

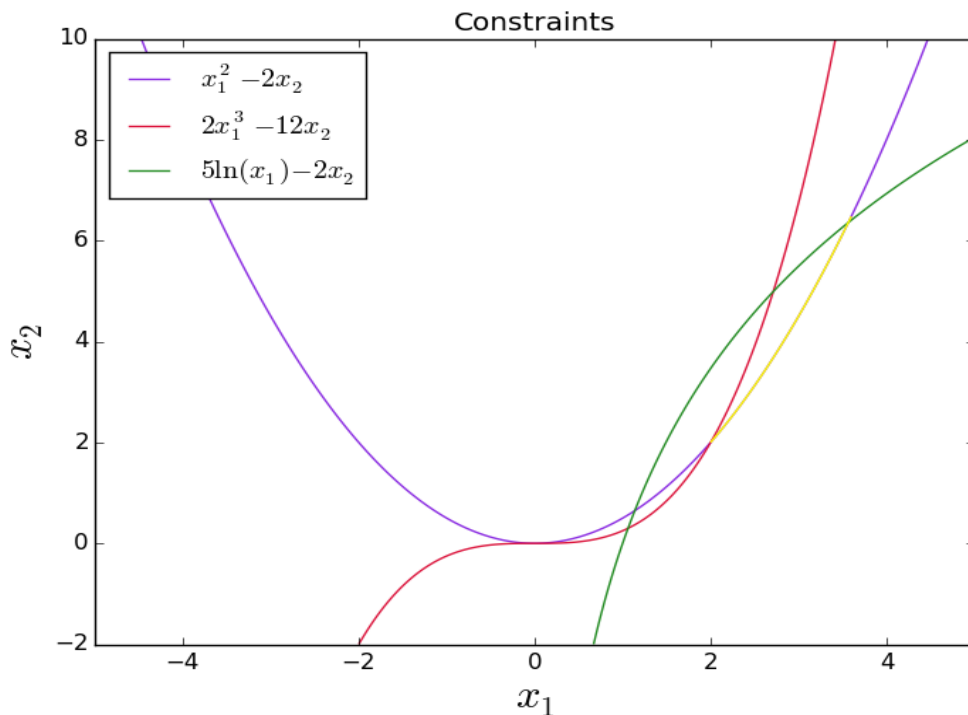
$$\begin{aligned} \min f_1 &= 5\cos^2 x_1 + 3x_2^2 \\ \text{υπό τους περιορισμούς} \quad x_1^2 - 2x_2 &= 0 \\ x_1^3 - 4x_2 &\geq 0 \\ 5\ln(x_1) - x_2 &\geq 0 \end{aligned} \tag{5.1}$$

του οποίου η αντικειμενική συνάρτηση είναι ίδια με το πρόβλημα [3.19], οι περιορισμοί του προβλήματος [3.19] έχουν μετατραπεί πλέον σε περιορισμούς ανισο-ισότητας και έχει προστεθεί και ένας περιορισμός ισότητας.



Σχήμα 5.1: Ισοϋψείς καμπύλες της αντικειμενικής συνάρτησης f_1 .

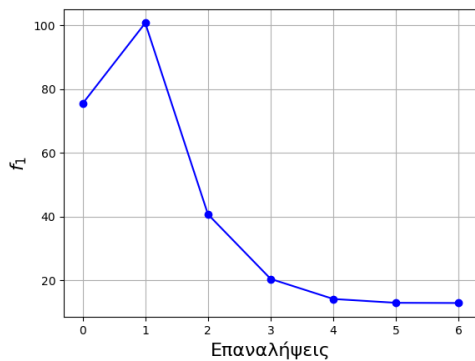
Στο Σχήμα 5.1 φαίνονται οι ισοϋψείς καμπύλες της συνάρτησης f_1 οι οποίες δίνουν μία εικόνα της συμπεριφοράς της αντικειμενικής συνάρτησης ανάλογα με τις μεταβολές των μεταβλητών βελτιστοποίησης.



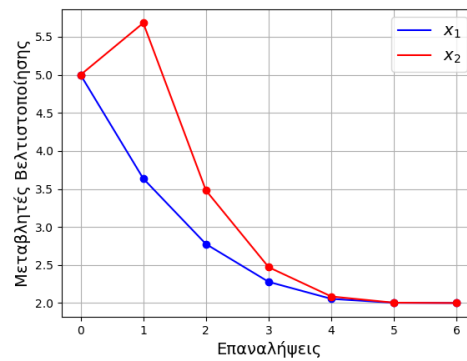
Σχήμα 5.2: Γραφική παράσταση των περιορισμών του προβλήματος 5.1.

Στο Σχήμα 5.2 φαίνονται οι γραφικές παραστάσεις των περιορισμών, όπου με κόκκινο και πράσινο χρωματίζονται οι γραφικές παραστάσεις των περιορισμών ανισο-ισότητας στην περίπτωση που αυτοί είναι ενεργοί (ισούνται δηλαδή με 0), ενώ με μωβ χρωματίζεται η γραφική παράσταση του περιορισμού ισότητας. Το σύνολο των αποδεκτών λύσεων του προβλήματος κινούνται προφανώς πάνω στη μωβ γραμμή. Οι περιοχές στις οποίες ικανοποιούνται οι περιορισμοί ανισο-ισότητας είναι οι περιοχές δεξιά της κόκκινης και της πράσινης γραμμής. Με κίτρινο χρώμα λοιπόν έχει χρωματιστεί η περιοχή της μωβ γραμμής (που σημαίνει ότι ο περιορισμός ισότητας ισχύει) η οποία βρίσκεται συγχρόνως εκ δεξιών και των δύο άλλων γραμμών. Με άλλα λόγια, η κίτρινη γραμμή συμβολίζει το σύνολο των αποδεκτών λύσεων για το πρόβλημα 5.1. Λαμβάνοντας υπόψη τη συμπεριφορά της αντικειμενικής συνάρτησης που φαίνεται στο Σχήμα 5.1 και το σύνολο των αποδεκτών λύσεων μπορεί να γίνει μια γραφική πρόβλεψη του σημείου που ελαχιστοποιεί την αντικειμενική συνάρτηση και αυτό λογικά θα είναι το σημείο στο οποίο τέμνεται η κόκκινη με τη μωβ γραμμή, κοντά στο σημείο $\vec{x} = [2., 2.]$. Η τιμή που βρίσκεται στην τομή των δύο γραμμών αποτελεί αποδεκτή τιμή καθώς ο περιορισμός είναι ανισο-ισότητας, οπότε και ο δεύτερος περιορισμός θα είναι ενεργός στο σημείο αυτό.

Στο Σχήμα 5.3 φαίνονται η επιτυχής σύγκλιση της αντικειμενικής συνάρτησης f_1 σε 6 εξωτερικές και 14 εσωτερικές επαναλήψεις από αρχική τιμή $f_1 = 75.4$ στην τελική τιμή της $f_1^{opt} = 12.86$. Οι μεταβλητές βελτιστοποίησης συγκλίνουν τελικώς στην τιμή $\vec{x}^{opt} = [2., 2.]$. Η διαδικασία της βελτιστοποίησης επομένως κρίνεται επιτυχής.



(α') Σύγκλιση της συνάρτησης f_1 .



(β') Μεταβολή μεταβλητών βελτ/σης.

Σχήμα 5.3: Πρόβλημα 5.1.

Στη συνέχεια, θα επιλυθούν δύο μαθηματικά προβλήματα βελτιστοποίησης τα οποία λαμβάνονται από τη συλλογή των **Hock** και **Schittkowski**. Τα προβλήματα και τα αποτελέσματα της βελτιστοποίησης ακολουθούν.

Πρόβλημα 80

$$\min f_2 = e^{x_1 x_2 x_3 x_4 x_5}$$

$$\begin{aligned} x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + x_4^2 + x_5^2 - 10 &= 0 \\ x_2 x_3 - 5 x_4 x_5 &= 0 \end{aligned} \quad (5.2)$$

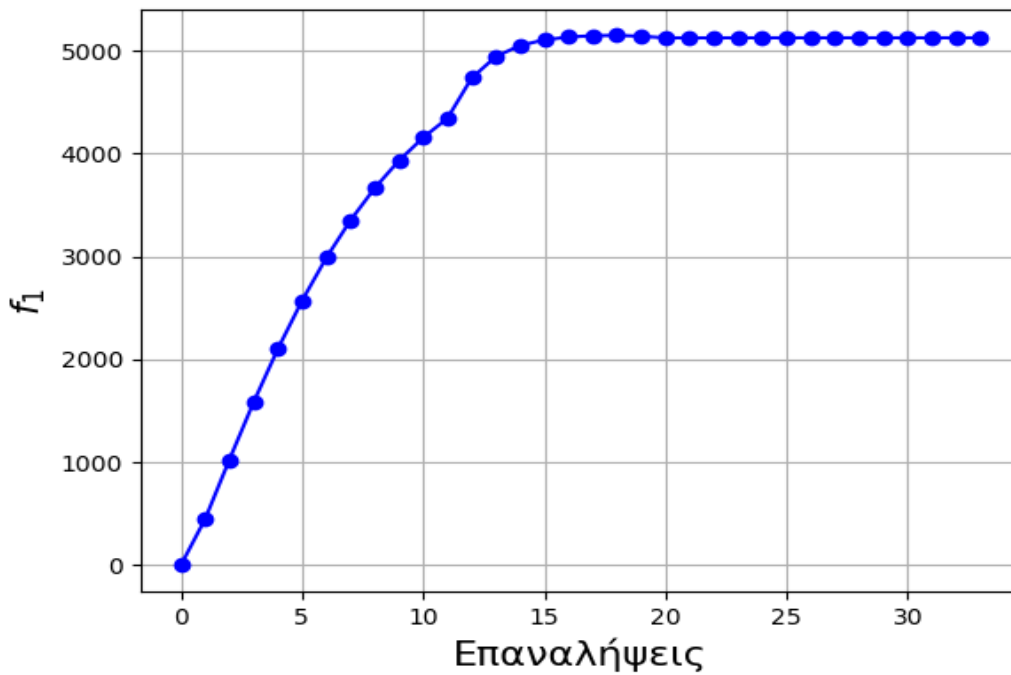
υπό τους περιορισμούς

$$\begin{aligned} x_1^3 - x_2^3 + 1 &= 0 \\ -2.3 &\leq x_i \leq 2.3, \quad i = 1, 2 \\ -3.2 &\leq x_i \leq 3.2, \quad i = 3, 4, 5 \end{aligned}$$

Το Πρόβλημα 80 είναι ένα πρόβλημα βελτιστοποίησης μη γραμμικής συνάρτησης υπό μη-γραμμικούς περιορισμούς ισότητας και γραμμικούς περιορισμούς ισότητας. Στο πρόβλημα αυτό η επαναληπτική διαδικασία θα εκκινήσει από το σημείο

$$\vec{x}^0 = [-2., 1., 1., -1., -0.9]$$

για το οποίο η αρχική τιμή της αντικειμενική συνάρτησης είναι $f_2 = 0.1653$. Στο αρχικό σημείο κανένας από τους περιορισμούς ισότητας δεν ικανοποιείται.

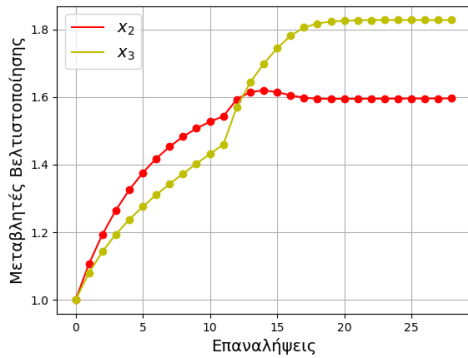


Σχήμα 5.4: Πρόβλημα 80 -Σύγκλιση της αντικειμενικής συνάρτησης f_2 .

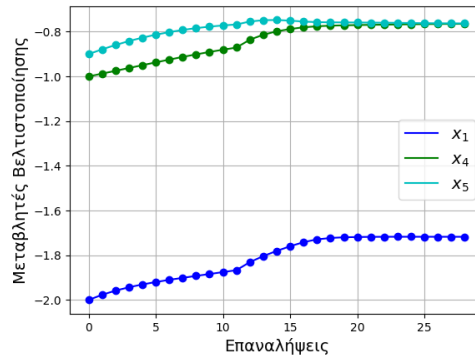
Στο Σχήμα 5.4 φαίνεται η σύγκλιση της αντικειμενικής συνάρτησης f_2 , η οποία συγκλίνει στην τελική βέλτιστη τιμή της $f_3 = 0.0539$ μετά από 28 εξωτερικές και 44 εσωτερικές επαναλήψεις, η οποία είναι και η τιμή η οποία ταυτίζεται με τη βιβλιογραφία. Στο Σχήμα 5.5 φαίνεται η μεταβολή των μεταβλητών βελτιστοποίησης κατά τη διάρκεια της βελτιστοποίησης. Το τελικό διάνυσμα των μεταβλητών βελτιστοποίησης είναι

$$\vec{x}^{opt} = [-1.717, 1.595, 1.827, -0.764, -0.762]$$

όπως αναφέρεται και στη βιβλιογραφία.



(α') Μεταβολή x_2, x_3 .



(β') Μεταβολή x_1, x_4, x_5 .

Σχήμα 5.5: Πρόβλημα 80 - Μεταβολή μεταβλητών βελτιστοποίησης.

Πρόβλημα 74

$$\min f_3 = 3x_1 + 1.e^{-6}x_1^3 + 2x_2 + \frac{2}{3}e^{-6}x_2^3$$

$$1000\sin(-x_3 - 0.25) + 1000\sin(-x_4 - 0.25) + 894.8 - x_1 = 0$$

$$1000\sin(x_3 - 0.25) + 1000\sin(x_3 - x_4 - 0.25) + 894.8 - x_2 = 0$$

$$1000\sin(x_4 - 0.25) + 1000\sin(x_4 - x_3 - 0.25) + 1294.8 = 0 \quad (5.3)$$

υ.τ.π

$$x_4 - x_3 + 0.55 \geq 0$$

$$x_3 - x_4 + 0.55 \geq 0$$

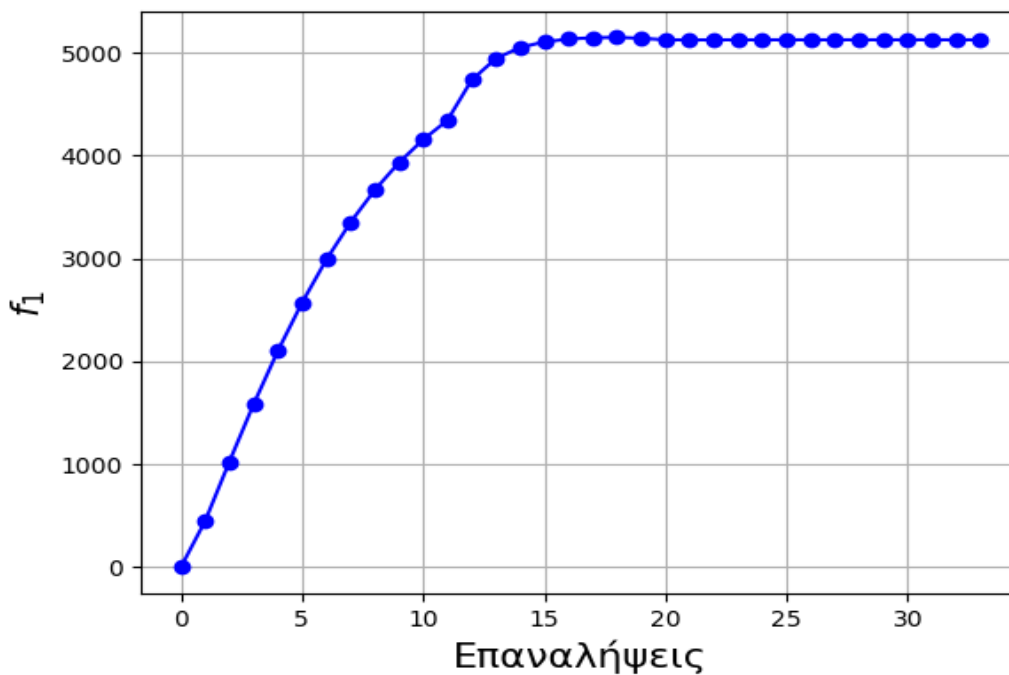
$$0 \leq x_i \leq 1200, \quad i = 1, 2$$

$$-0.55 \leq x_i \leq 0.55, \quad i = 3, 4$$

Στο πρόβλημα 74 στόχος ο εντοπισμός του ελαχίστου σημείου μίας συνάρτησης που ικανοποιεί συγχρόνως τους περιορισμούς, εκκινώντας από ένα σημείο στο οποίο δεν ικανοποιούνται οι περιορισμοί και η αντικειμενική συνάρτηση έχει τιμή μικρότερη από την τιμή που θα έχει η συνάρτηση στο βέλτιστο σημείο. Στο πρόβλημα αυτό λοιπόν η επαναληπτική διαδικασία θα εκκινήσει από το σημείο

$$\vec{x}^0 = [0, 0, -1, -1]$$

για το οποίο η αρχική τιμή της αντικειμενική συνάρτησης είναι 0 και προφανώς κανένας από τους περιορισμούς ισότητας, καθώς και δύο από τους περιορισμούς ανισο-ισότητας δεν ικανοποιούνται.



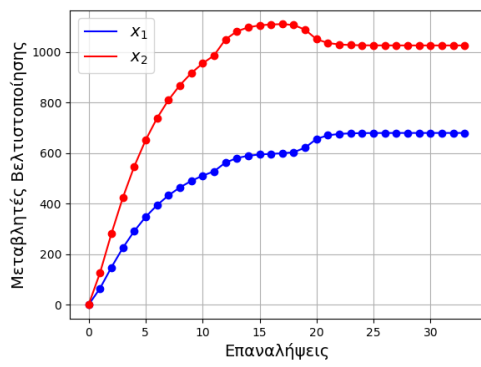
Σχήμα 5.6: Πρόβλημα 74 - Σύγκλιση της αντικειμενικής συνάρτησης f_3 .

Στο Σχήμα 5.6 φαίνεται η σύγκλιση της αντικειμενικής συνάρτησης f_3 , η οποία συγκλίνει στη βέλτιστη τιμή της $f_3 = 5126.5$ μετά από 33 εξωτερικές και 72 εσωτερικές επαναλήψεις, η οποία τιμή επιβεβαιώνεται και στη βιβλιογραφία. Στο Σχήμα 5.7 φαίνεται η μεταβολή των μεταβλητών βελτιστοποίησης κατά τη διάρκεια της βελτιστοποίησης. Το τελικό διάνυσμα των μεταβλητών βελτιστοποίησης είναι

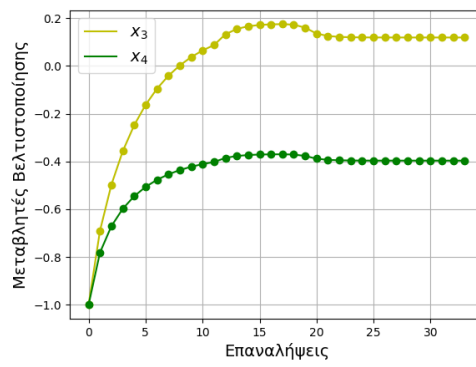
$$\vec{x}^{opt} = [679.94, 1026.06, 0.1188, -0.3962]$$

όπως αναφέρεται και στη βιβλιογραφία.

Από την επιτυχή επίλυση του Προβλήματος 74 φαίνεται η δυνατότητα της μεθόδου του Διαδοχικού Τετραγωνικού Προγραμματισμού να επιλύσει προβλήματα με μη γραμμικούς περιορισμούς, εκκινώντας από σημεία τα οποία είναι μακριά από τη λύση, αλλά είναι και παράλληλα μη αποδεκτά ως προς τους περιορισμούς του προβλήματος.



(α') Μεταβολή x_1, x_2 .



(β') Μεταβολή x_3, x_4 .

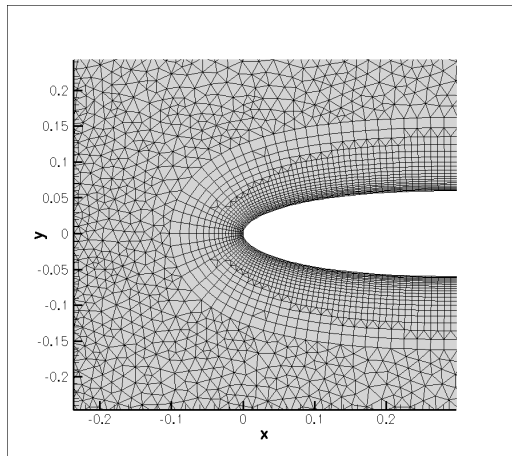
Σχήμα 5.7: Πρόβλημα 74 - Μεταβολή μεταβλητών βελτιστοποίησης.

Κεφάλαιο 6

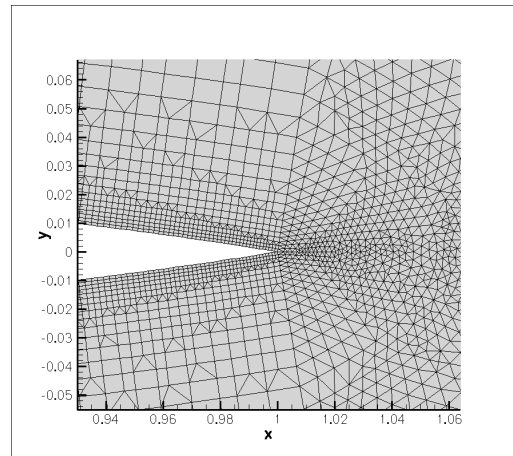
Εφαρμογές Εξωτερικής Αεροδυναμικής με Χρήση της Μεθόδου SQP

Στο παρόν Κεφάλαιο παρουσιάζονται εφαρμογές εξωτερικής αεροδυναμικής με στόχο τον έλεγχο της αποτελεσματικότητας του λογισμικού που αναπτύχθηκε σε προβλήματα Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής. Στο σημείο αυτό πρέπει να τονιστεί ότι οι εφαρμογές που παρουσιάζονται αποτελούν εφαρμογές ελέγχου της μεθόδου και οι αντικειμενικ συναρτήσεις ή οι περιορισμοί τίθενται σχόπιμα, έστω και αν κάποιοι από αυτούς στερούνται ρεαλισμού.

Επίσης, κρίνεται απαραίτητο να αναφερθεί ότι στα αποτελέσματα βελτιστοποίησης που παρουσιάζονται στο Κεφάλαιο αυτό, στη συζήτηση για τον αριθμό των επαναλήψεων σε κάθε Εφαρμογή, γίνεται αναφορά μόνο στον αριθμό των εξωτερικών επαναλήψεων, καθώς αυτές μόνο έχουν πραγματική σημασία στις εφαρμογές αυτές. Αυτό συμβαίνει, διότι κάθε εξωτερική επανάληψη περιλαμβάνει τη διαδικασία επίλυσης ροής γύρω από αεροτομή και την επίλυση του συζυγούς προβλήματος με τη Συνεχή Συζυγή Μέθοδο δύο φορές για τον υπολογισμό της 1ης παραγώγου των συντελεστών άνωσης και αντίστασης ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού. Συνολικά, δηλαδή, το υπολογιστικό κόστος κάθε εξωτερικής επανάληψης ισούται με την επίλυση των εξισώσεων ροής τρεις φορές, υπολογιστικό κόστος τεράστιο σε σχέση με το υπολογιστικό κόστος επίλυσης δύο συστημάτων μη-γραμμικών εξισώσεων μικρού μεγέθους που απαιτείται σε κάθε εσωτερική επανάληψη. Το άθροισμα υπολογιστικού κόστους της εξωτερικής επανάληψης και των εσωτερικών επαναλήψεων που της αντιστοιχούν είναι στην πράξη, λοιπόν, ίσο με το κόστος της εξωτερικής επανάληψης. Για το λόγο αυτό, θα γίνεται αναφορά μόνο στις εξωτερικές επαναλήψεις, καθώς αυτό είναι άλλωστε και



(α') Λεπτομέρεια πλέγματος στην ακμή προσβολής της αεροτομής.



(β') Πύκνωση πλέγματος στην ακμή εκφυγής της αεροτομής.

Σχήμα 6.1: Υβριδικό Πλέγμα γύρω από αεροτομή.

το βασικό πλεονέκτημα της μεθόδου. Ο υπολογισμός αξιόπιστων μετατοπίσεων με μικρό υπολογιστικό κόστος.

Για την υλοποίηση της διαδικασίας βελτιστοποίησης απαιτείται η συνεργασία του εξής λογισμικού:

- **Λογισμικό Γένεσης Πλέγματος.** Για την προσαρμογή κατάλληλου υπολογιστικού πλέγματος στις αεροτομές που υπόκεινται σε βελτιστοποίηση χρησιμοποιείται λογισμικό που έχει αναπτυχθεί στη ΜΠΥΡ& Β του Εργαστηρίου Θερμικών Στροβιλομηχανών του ΕΜΠ. Το πλέγμα που χρησιμοποιείται στις εφαρμογές είναι υβριδικό (τρίγωνα - τετράπλευρα) με πύκνωση στα στερεά τοιχώματα της αεροτομής. Στις εφαρμογές που ακολουθούν γίνεται επαναπλεγματοποίηση γύρω από την αεροτομή μετά από κάθε εξωτερική επανάληψη. Τα πλέγματα που παράγονται είναι της τάξης των 45000 κόμβων. Στο Σχήμα 6.1 φαίνεται η μορφή που έχει το υβριδικό πλέγμα κοντά στην αεροτομή, μακριά από αυτή, καθώς και στην ακμή εκφυγής της.
- **Επιλύτης Ροής.** Για την επίλυση της ροής γύρω από τις αεροτομές χρησιμοποιείται λογισμικό-επιλύτης των εξισώσεων ροής σε επεξεργαστές καρτών γραφικών, το οποίο έχει και αυτό αναπτυχθεί στη ΜΠΥΡ& Β. Το λογισμικό αυτό παράγει, επίσης, τις πρώτες παραγώγους των ροϊκών μεγεθών ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού, που είναι απαραίτητες για την πραγματοποίηση της διαδικασίας βελτιστοποίησης, κάνοντας χρήση τις Συνεχούς Συζυγούς Μεθόδου (Continuous Adjoint Method)
- **Λογισμικό Βελτιστοποίησης.** Το λογισμικό που χρησιμοποιείται για την πραγματοποίηση της βελτιστοποίησης βασίζεται στη μέθοδο SQP και είναι αυτό που προγραμματίστηκε κατά τη διάρκεια αυτής της Διπλωματικής Εργασίας.

Παραμετροποίηση

Οι μεμονωμένες αεροτομές στο Κεφάλαιο αυτό παραμετροποιούνται με καμπύλες Bezier. Κάθε πλευρά της αεροτομής παραμετροποιείται με 8 σημεία ελέγχου, εκ των οποίων το πρώτο και το τελευταίο είναι σταθερά, ενώ τα εσωτερικά αυτών μπορούν να κινούνται ελεύθερα κατά τον κάθετο άξονα. Συνεπώς, οι μεταβλητές σχεδιασμού των προβλημάτων βελτιστοποίησης είναι οι τεταγμένες των σημείων ελέγχου της καμπύλης Bezier στην πλευρά υπερπίεσης (pressure side) και στην πλευρά υποπίεσης (suction side).

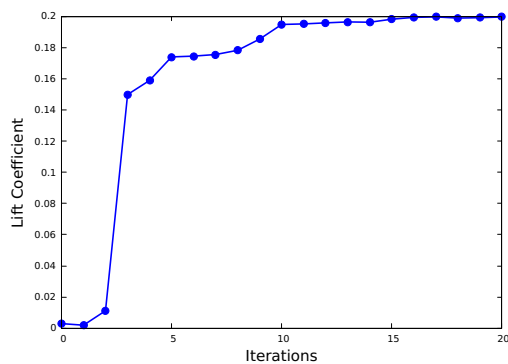
6.1 Εφαρμογή 1 - NACA 4510 - Περιορισμός Ισότητας

Στην 1η Εφαρμογή βελτιστοποίησης επιχειρείται η μεγιστοποίηση του συντελεστή άνωσης της μη-συμμετρικής αεροτομής NACA 4510 (Σχήμα ;;) επιβάλλοντας ένα μόνο περιορισμό ισότητας, έτσι ώστε η τελική τιμή του συντελεστή αντίστασης της τελικής αεροτομής να ισούται με το συντελεστή αντίστασης της αρχικής γεωμετρίας. Πρέπει να ισχύει δηλαδή για τη βέλτιστη αεροτομή $c_d = c_{d_0} = 0.1275$.

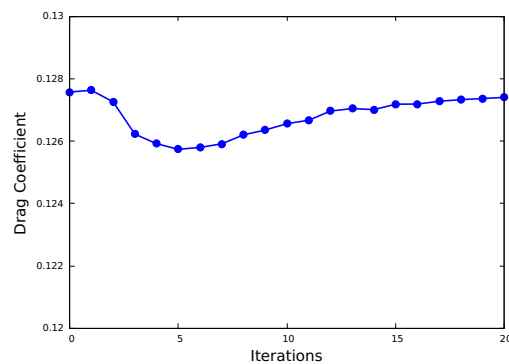
Η αεροτομή αυτή είναι μεμονωμένη και ακίνητη στο χώρο, ενώ η ροή γύρω από αυτή είναι στρωτή με συνθήκες ροής

$$\begin{aligned}M_\infty &= 0.7 \\Re_c &= 1000 \\a_\infty &= 0^\circ\end{aligned}$$

Στο Σχήμα 6.2 δίνονται τα αποτελέσματα της βελτιστοποίησης ως προς τη σύγκλιση της αντικειμενικής συνάρτησης μέχρι την τελική βέλτιστη τιμή της, καθώς και η πορεία του συντελεστή αντίστασης κατά την εξέλιξη της διαδικασίας. Όπως φαίνεται και στο Σχήμα 6.2α' ο συντελεστής άνωσης εκκινεί από πρακτικά μηδενική τιμή (συζήτηση για την τιμή αυτή της αρχικής αεροτομής θα γίνει στη συνέχεια, εκεί που θα συζητηθεί η κατανομή του συντελεστή πίεσης) και συγκλίνει έπειτα από 20 εξωτερικές επαναλήψεις στην τελική τιμή $c_l = 0.2$ ($c_l = 0.19958$ η ακριβής τελική τιμή). Στο Σχήμα 6.2α' φαίνεται η πορεία που ακολουθεί ο συντελεστής αντίστασης, που στην Εφαρμογή αυτή είναι ο περιορισμός ισότητας του προβλήματος Παρατηρείται μια μικρή απόκλιση από την αρχική τιμή κατά τη διάρκεια των πρώτων επαναλήψεων, η οποία όμως δικαιολογείται



(α') Σύγκλιση της αντικειμενικής συνάρτησης - Συντελεστής άνωσης.

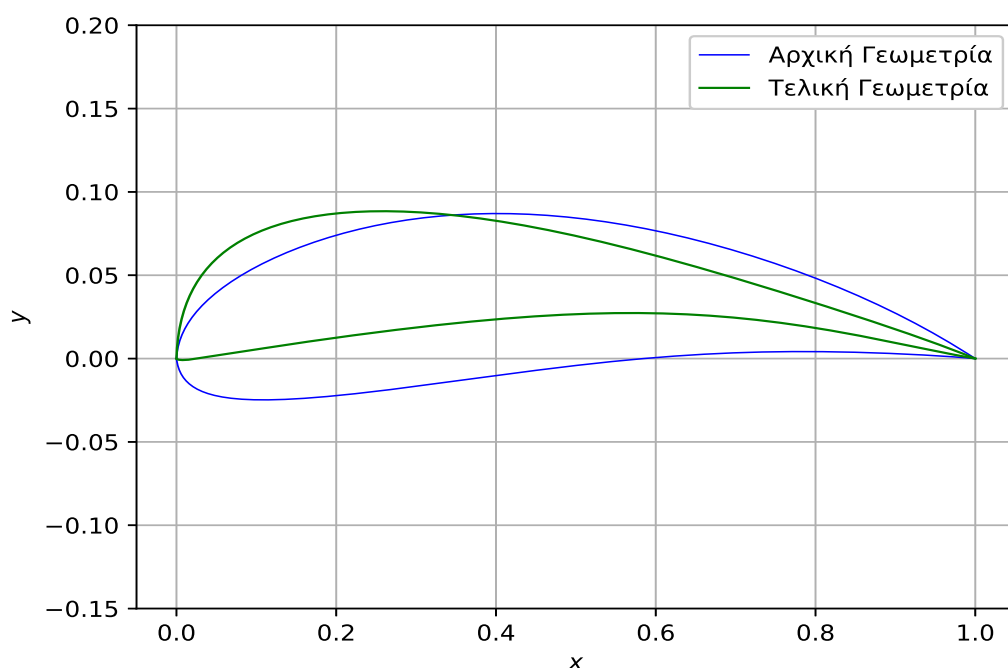


(β') Μεταβολή του συντελεστή αντίστασης κατά τη βελτιστοποίηση.

Σχήμα 6.2: Εφαρμογή 1 - Αποτελέσματα βελτιστοποίησης.

από τη μεγάλη μεταβολή της γεωμετρίας της αεροτομής στις επαναλήψεις αυτές. Αυτή μαρτυρά και η μεταβολή του συντελεστή άνωσης στις ίδιες επαναλήψεις στο Σχήμα 6.2β'. Τελικά, ο συντελεστής αντίστασης συγκλίνει στις τελευταίες επαναλήψεις σε τιμή ίδια με την αρχική, επαληθεύοντας τον περιορισμό και τερματίζοντας, παράλληλα, επιτυχώς τη διαδικασία.

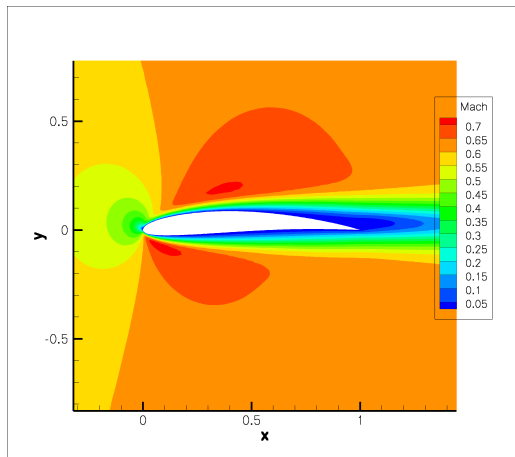
Η αρχική και η βέλτιστη γεωμετρία της αεροτομής αντιπαραβάλλονται στο Σχήμα 6.3, όπου φαίνονται η μετατόπιση προς τα θετικά του κάθετου άξονα της πλευράς υπερπίεσης, ώστε να επιτευχθεί μεγαλύτερη άνωση, και παράλληλα η αύξηση του πάχους στο εμπρός μέρος της αεροτομής, με στόχο τη διατήρηση σταθερού συντελεστή αντίστασης. Οι δύο παραπάνω 'κινήσεις' της γεωμετρίας της αεροτομής έχουν ως αποτέλεσμα τη μείωση του πάχους της αεροτομής κοντά στην ακμή εκφυγής, συμβάν που θα αποτελέσει εφελτήριο, στη συνέχεια, για την εισαγωγή γεωμετρικών περιορισμών σε επόμενη εφαρμογή.



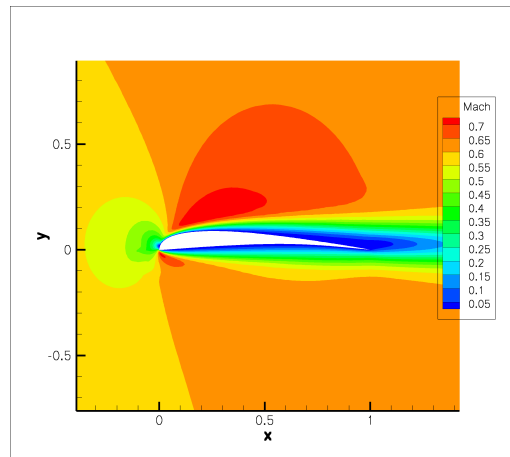
Σχήμα 6.3: Εφαρμογή 1 - Αρχική και βέλτιστη γεωμετρία της αεροτομής. $c_l^0 = 0.00291$, $c_l^{opt} = 0.1995$. $c_d^0 = 0.1275$. $c_d^{opt} = 0.1274$

Στα Σχήματα 6.4 και 6.5 φαίνονται οι κατανομές των ροϊκών μεγεθών γύρω από την αεροτομή, οι οποίες δικαιολογούν και τις μεταβολές των συντελεστών της. Οι τιμές της πίεσης στην πλευρά υποπίεσης της βέλτιστης αεροτομής, όπως φαίνεται στο Σχήμα 6.5β', είναι αισθητά μικρότερες από αυτές στην ίδια πλευρά στην αρχική αεροτομή, Σχήμα 6.5α', σε συνδυασμό με την αύξηση της πίεσης καθ' όλο το μήκος της πλευράς υπερπίεσης (πολύ μικρότερη περιοχή μπλε χρώματος χαμηλών πιέσεων) έχει σαν αποτέλεσμα την αυξημένη τιμή του συντελεστή άνωσης. Στο Σχήμα 6.5, στην υπόψη γωνία της επ' άπειρον ροής (υπενθυμίζεται ότι είναι μηδενική), καθώς και στην αρχική, αλλά και στη βέλτιστη αεροτομή, εμφανίζεται στην αρχή της πλευράς υπερπίεσης, μία περιοχή πολύ χαμηλής πίεσης, η οποία αντιστρέφει στην πράξη τις πλευρές υπερπίεσης και υποπίεσης, δημιουργώντας περιοχή "αρνητικής άνωσης". Το φαινόμενο αυτό τείνει να μειωθεί στη βέλτιστη αεροτομή, με κόστος όμως την πολύ αιχμηρή ακμή προσβολής.

Η διαφορά του τελικού συντελεστή άνωσης σε σχέση με αυτόν της αρχικής αεροτομής δικαιολογείται πολύ εύκολα και από το διάγραμμα του συντελεστή πίεσης c_p κατά το αδιάστατο μήκος της αεροτομής. Η συνολική άνωση μίας αεροτομής είναι συνάρτηση του συνολικού θετικού εμβαδού που ορίζει η καμπύλη του συντελεστή πίεσης. Όπως φαίνεται καθαρά και από το Σχήμα 6.6, το συνολικό θετικό εμβαδόν που ορίζει η καμπύλη στην τελική αεροτομή είναι συνολικά μεγαλύτερο του αρχικού, όπως αναμενόταν. Η αρνητική επίδραση που έχει η γωνία επ' άπειρον ροής στην άνωση

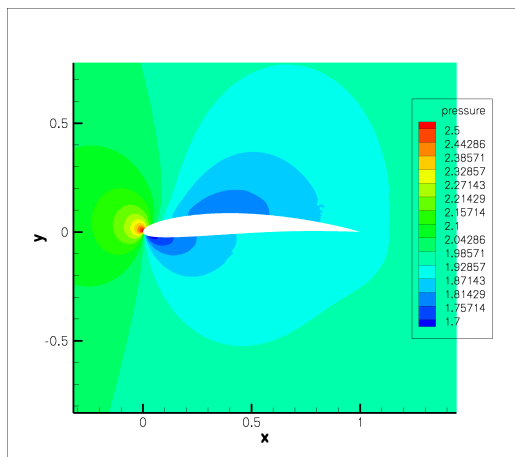


(α') Αρχική αεροτομή.

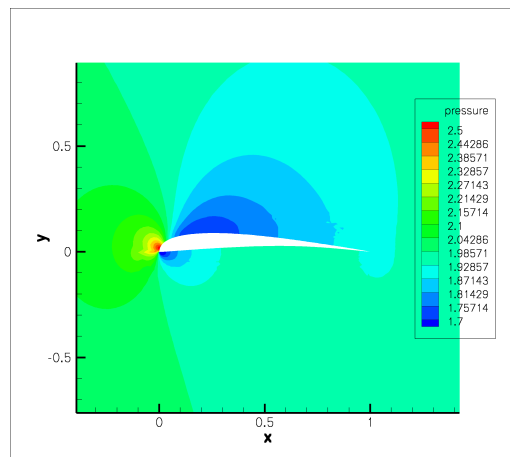


(β') Βέλτιστη αεροτομή.

Σχήμα 6.4: Εφαρμογή 1 - Κατανομή πεδίου αριθμού Mach γύρω από την αρχική και τη βέλτιστη αεροτομή.

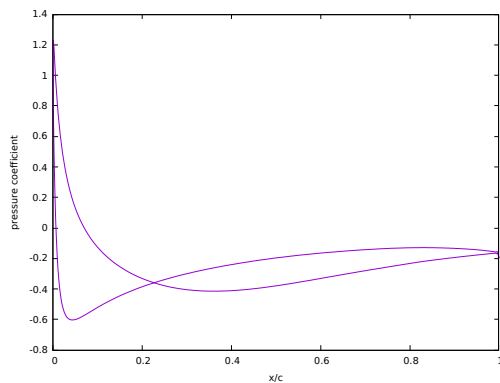


(α') Αρχική αεροτομή.

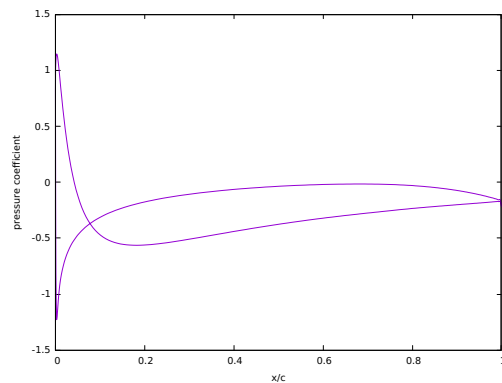


(β') Βέλτιστη αεροτομή.

Σχήμα 6.5: Εφαρμογή 1 - Κατανομή πεδίου πίεσης γύρω από την αρχική και τη βέλτιστη αεροτομή.



(α') Αρχική αεροτομή.



(β') Βέλτιστη αεροτομή.

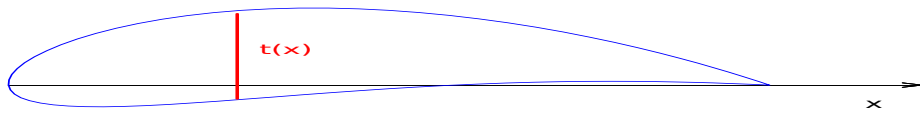
Σχήμα 6.6: Εφαρμογή 1 - Διάγραμμα συντελεστή πίεσης κατά το αδιάστατο μήκος της αρχικής και της βέλτιστης αεροτομής.

της αεροτομής φαίνεται εντονότερα στο 6.6. Στο αρχικό μήκος της αεροτομής ο συντελεστής πίεσης c_p της κατά μήκος της πλευράς υπερπίεσης είναι μικρότερος της πλευράς υποπίεσης συμβάλλοντας με αρνητικό πρόσημο στο συνολικό εμβαδόν της καμπύλης. Αυτό που έχει επιτευχθεί με τη βελτιστοποίηση είναι ο περιορισμός της περιοχής αυτής σε μικρότερο μήκος της αεροτομής, επιτυγχάνοντας κατά τον τρόπο αυτό μεγαλύτερη άνωση.

6.2 Εφαρμογή 2 - NACA 4510 - Γεωμετρικοί περιορισμοί

Στην Εφαρμογή 1 πραγματοποιήθηκε η βελτιστοποίηση μίας αεροτομής NACA 4510 ως προς το συντελεστή άνωσης με περιορισμό ισότητας μόνο ως προς την οπισθέλκουσα. Το αποτέλεσμα της βελτιστοποίησης αυτής δόθηκε στο Σχήμα 6.3, όπου προέκυψε μία νέα αεροτομή, η οποία έχει πολύ μικρό πάχος κοντά στην ακμή εκφυγής. Πολλές φορές το αποτέλεσμα μίας βελτιστοποίησης αεροτομής δίνει μία τελική γεωμετρία που κρίνεται δύσκολα κατασκευάσιμη. Η τελική αεροτομή στην Εφαρμογή 1 θα μπορούσε να κριθεί μη επιθυμητή λόγω του πολύ μικρού της πάχους και με αφορμή αυτό στην Εφαρμογή 2 επιχειρείται ξανά η βελτιστοποίηση της αεροτομής NACA 4510 για ίδια αντικειμενική συνάρτηση, ίδιο περιορισμό ισότητας για την οπισθέλκουσα και ίδιες συνθήκες ροής, αυτήν τη φορά όμως προστίθενται γεωμετρικοί περιορισμοί ανισο-ισότητας ώστε η τελική γεωμετρία της αεροτομής να είναι κατασκευαστικά περισσότερο αποδεκτή, αποφεύγοντας το υπερβολικά λεπτό της πάχος που παρατηρείται στην Εφαρμογή 1.

Οι γεωμετρικοί περιορισμοί που χρησιμοποιούνται αφορούν το πάχος t της αεροτομής σε διάφορα σημεία κατά μήκος της χορδής της αεροτομής.



Σχήμα 6.7: Σχηματική απεικόνιση της συνάρτησης πάχους της αεροτομής.

Συγκεκριμένα, επιλέγεται η τοποθέτηση περιορισμών πάχους σε σημεία της αεροτομής που εικάζεται, με βάση και τα αποτελέσματα της πρώτης βελτιστοποίησης, ότι υπόκεινται χρονικά πρώτα σε έντονη μείωση του πάχους τους. Οι περιορισμοί ανισο-ισότητας λοιπόν αφορούν το πάχος της αεροτομής στο 60%, στο 70% και στο 80% του μήκους της. Οι περιορισμοί ανισο-ισότητας γράφονται

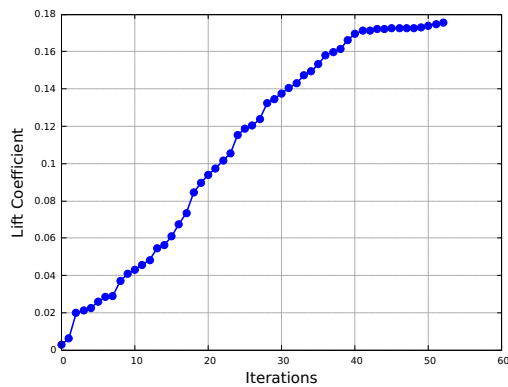
$$c_{in}^k = t_i^k - 0.5 t_0^k \geq 0 \quad \text{για } k = 60, 70, 80 \quad (6.1)$$

όπου με k συμβολίζεται το επί τοις εκατό μήκος της αεροτομής, με t το πάχος αυτής στο αντίστοιχο σημείο k και με i ο αριθμός της επανάληψης.

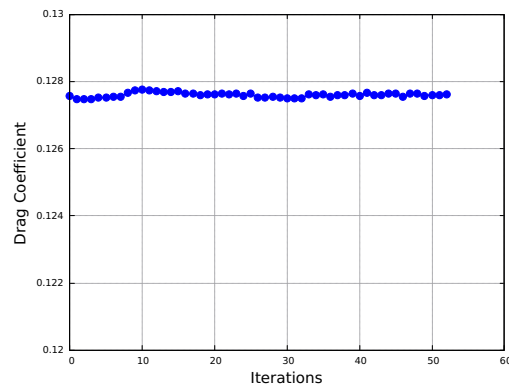
Ο περιορισμός ισότητας παραμένει ο ίδιος, να είναι δηλαδή η τιμή του τελικού συντελεστή αντίστασης ίδια με την αρχική του ($c_d = c_{d0} = 0.1275$), η αρχική γεωμετρία της αεροτομής φαίνεται στο Σχήμα ;;

$$\begin{aligned} M_\infty &= 0.7 \\ Re_c &= 1000 \\ a_\infty &= 0^\circ \end{aligned}$$

Στο Σχήμα 6.8 δίνονται γραφικά τα αποτελέσματα της βελτιστοποίησης της αεροτομής NACA 4510 υπό γεωμετρικούς περιορισμούς ανισο-ισότητας. Στο Σχήμα 6.8α' φαίνεται η σύγκλιση της αντικειμενικής συνάρτησης c_i , ενώ στο Σχήμα 6.8β' η πορεία του περιορισμού ισότητας ($c_d = c_{d0}$) κατά την εξέλιξη της βελτιστοποίησης. Η αντικειμενική συνάρτηση συγκλίνει επιτυχώς κατόπιν 52 επαναλήψεων στην τελική τιμή $c_i = 0.75445$, η οποία πλησιάζει την τελική τιμή του συντελεστή άνωσης στην 1η Εφαρμογή ($c_l^{opt1} = 0.19958$), είναι όμως μικρότερη αυτής, καθότι κάποιος από τους περιορισμούς ανισο-ισότητας έχει καταστεί ενεργός εμποδίζοντας την περαιτέρω μεταβολή της γεωμετρίας. Ο περιορισμός ανισο-ισότητας που καθίσταται ενεργός



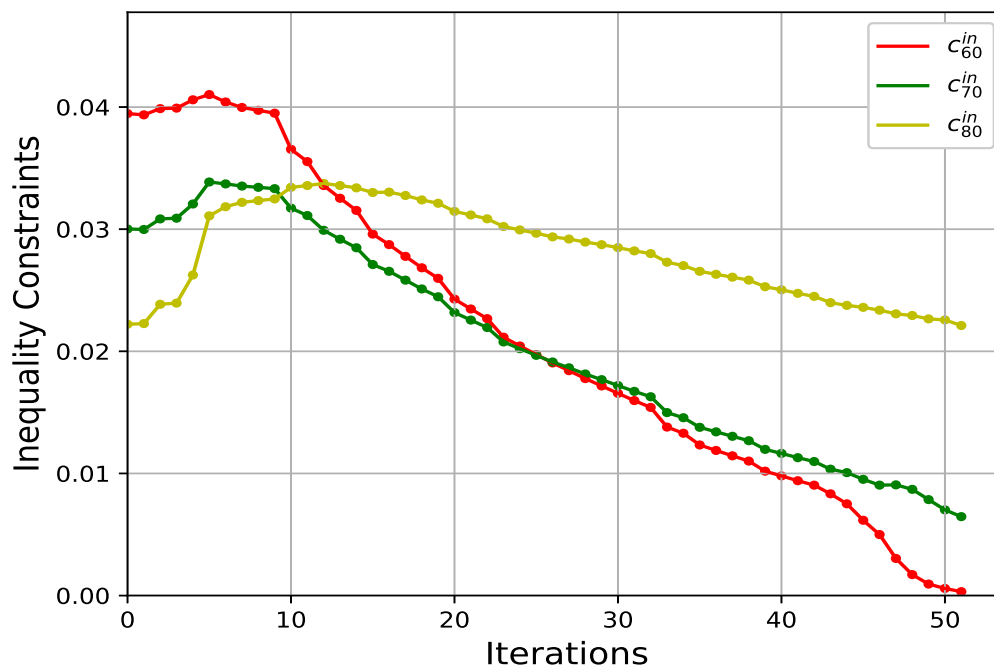
(α') Σύγκλιση της αντικειμενικής συνάρτησης - Συντελεστής άνωσης.



(β') Μεταβολή του συντελεστή αντίστασης κατά τη βελτιστοποίηση.

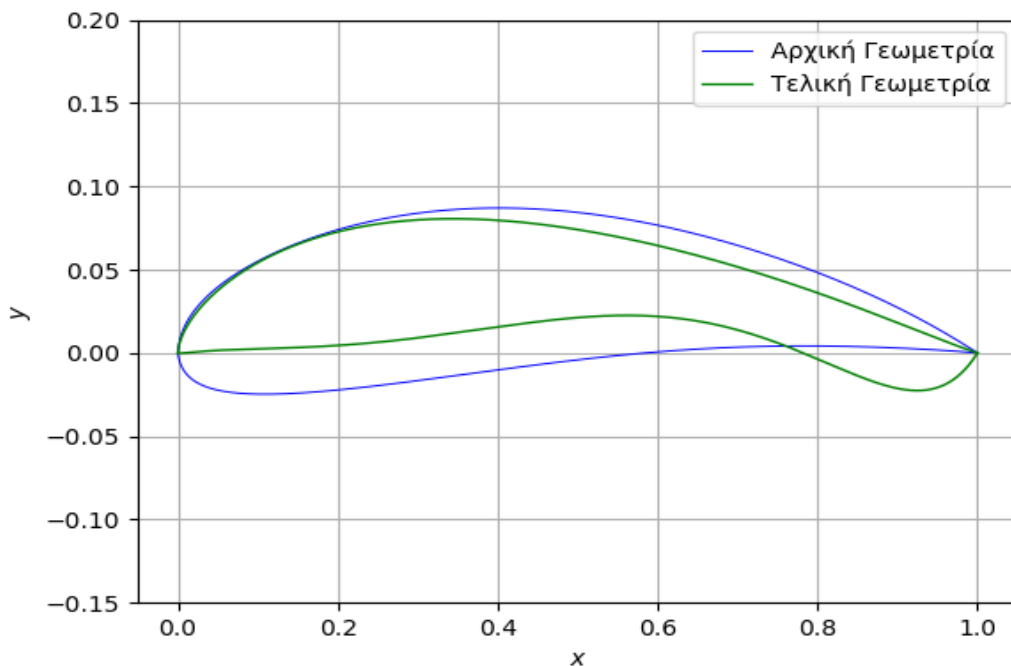
Σχήμα 6.8: Εφαρμογή 2 - Αποτελέσματα βελτιστοποίησης.

φαίνεται στο Σχήμα 6.9, το οποίο παρουσιάζει τη μεταβολή των 3 ανισο-ισοτήτων κατά την εξέλιξη της βελτιστοποίησης. Από τη μεταβολή αυτή συμπεραίνεται ότι το πάχος της αεροτομής στο 60% του μήκους της έχει γίνει ίσο με το μισό του αρχικού πάχους αυτής στην αρχική αεροτομή, καθιστώντας τον ενεργό. Οι άλλοι δύο περιορισμοί ανισο-ισότητας ακολουθούν αρχικά αυξητική τάση ως προς το πάχος στα σημεία ελέγχου, στη συνέχεια όμως φτάνουν σε τιμή πάχους, η οποία για το 70% του μήκους της αεροτομής είναι σημαντικά μικρότερη από την αρχική, ενώ για το 80% του μήκους, το πάχος μοιάζει να έχει παραμείνει σταθερό. Το γεγονός αυτό θα εξεταστεί στη συνέχεια, όπου θα δοθεί και το συγκριτικό διάγραμμα της αρχικής και της τελικής γεωμετρίας της αεροτομής. Σε ότι αφορά τον περιορισμό ισότητας, η πορεία αυτού δίνεται στο Σχήμα 6.8β', στο οποίο φαίνεται ότι ακολουθεί την αναμενόμενη σταθερή πορεία στην αρχική του τιμή, έως και την τελική σύγκλιση της βελτιστοποίησης.



Σχήμα 6.9: Εφαρμογή 2 - Μεταβολή περιορισμών ανισο-ισότητας. Με κόκκινο χρωματίζεται η καμπύλη μεταβολής της ανισο-ισότητας που καθίσταται ενεργή στο βέλτιστο σημείο.

Στο Σχήμα 6.10 δίνεται σε συγκριτικό διάγραμμα η αρχική και η βέλτιστη γεωμετρία της αεροτομής. Παρατηρείται ότι κατά το μεγαλύτερο μήκος της, η πλευρά υπερπίεσης της αεροτομής έχει μετατοπιστεί προς τα θετικά του κάθετου άξονα, συνεισφέροντας στην αύξηση του συντελεστή άνωσης. Παράλληλα, όμως, η αεροτομή κατά το ίδιο μήκος της έχει υποστεί έντονη μείωση του πάχους της. Επιβεβαιώνεται και από το Σχήμα αυτό, λοιπόν, αυτό που φάνηκε στο Σχήμα 6.9, ότι το πάχος στο 60% και στο 70% του μήκους της αεροτομής έχει μειωθεί τόσο ώστε έχει φτάσει και έχει προσεγγίσει αντίστοιχα το κατώτερο επιτρεπτό του όριο. Στο 80% του μήκους της αεροτομής, επιβεβαιώνεται αυτό που έδειχνε και το διάγραμμα μεταβολής των ανισο-ισοτήτων ότι το πάχος στο σημείο αυτό πρακτικά δεν έχει μεταβληθεί. η αεροτομή έχει λάβει αυτή τη μορφή κοντά στην ακμή εκφυγής, έτσι ώστε να διατηρηθεί σταθερός ο συντελεστής αντίστασης, όπως επιβάλλει το πρόβλημα. Συγκρίνοντας το Σχήμα 6.10 με το Σχήμα 6.3, παρατηρείται ότι η αεροτομή στην 1η Εφαρμογή επιτυγχάνει τη διατήρηση σταθερού συντελεστή αντίστασης αυξάνοντας κατά πολύ το πάχος της στην πλευρά υποπίεσης κοντά στην ακμή πρόσπτωσης, με αποτέλεσμα τη μείωση του πάχους στο πίσω μέρος αυτής (αφού κάθε σημείο ελέγχου της καμπύλης Bezier επηρεάζει ολόκληρη την καμπύλη), ενώ στη 2η Εφαρμογή, όπου το πάχος δεν μπορεί να μεταβληθεί το ίδιο στο αρχικό μήκος, η αεροτομή διατηρεί σταθερό το συντελεστή αντίστασης 'δημιουργώντας' την καμπυλότητα κοντά στην ακμή εκφυγής, όπως φαίνεται στο Σχήμα 6.10.



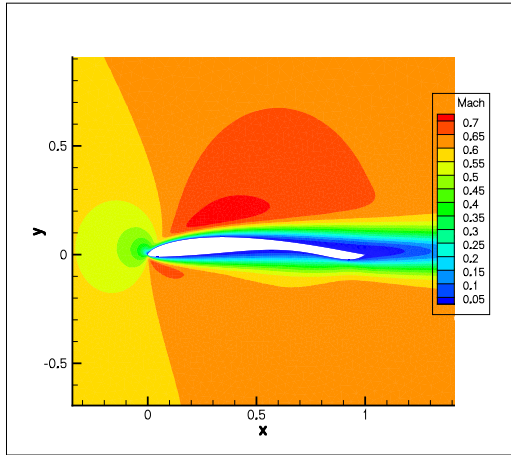
Σχήμα 6.10: Εφαρμογή 2 - Αρχική και βέλτιστη γεωμετρία της αεροτομής.

Η καμπυλότητα που αναφέρθηκε κοντά στην ακμή εκφυγής, δημιουργεί μία περιοχή χαμηλής πίεσης στην πλευρά υπερίεσης στην ακμή εκφυγής, όπως φαίνεται και στο Σχήμα 6.11β', η οποία αποφέρει μείωση του συντελεστή άνωσης της αεροτομής, μη επιτρέποντάς του να επιτύχει τιμή ίδια με αυτή που πέτυχε η βελτιστοποίηση στην Εφαρμογή 1.

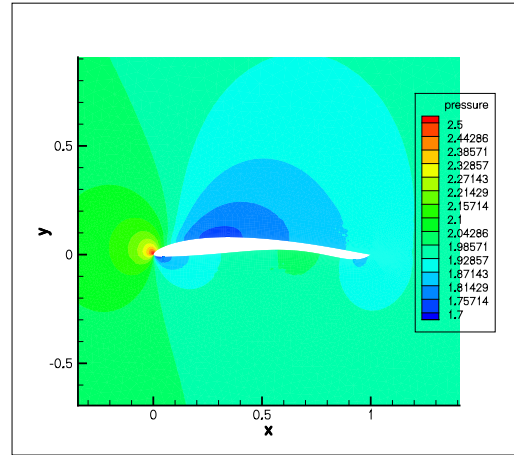
Το διάγραμμα του συντελεστή πίεσης κατά μήκος του αδιάστατου μήκους της αεροτομής στο Σχήμα 6.12 επιβεβαιώνει όσα συζητήθηκαν σχετικά με τη μεταβολή της άνωσης από τη αρχική στη βέλτιστη αεροτομή, ενώ σε αυτό φαίνεται επίσης καθαρά η περιοχή χαμηλής πίεσης στην πλευρά υπερίεσης κοντά στην ακμή εκφυγής, η οποία συνεισφέρει αρνητικά στην αύξηση του συντελεστή άνωσης. Τα μη-ρεαλιστικά χαρακτηριστικά που προδίδει το διάγραμμα του συντελεστή πίεσης παραμένουν ίδια με αυτά της Εφαρμογής 1, αφού οι συνθήκες ροής παρέμειναν ίδιες, και δεν αναφέρονται ξανά.

6.3 Εφαρμογή 3 - NACA0012

Στην τρίτη εφαρμογή επιχειρείται η βελτιστοποίηση μία συμμετρικής αεροτομής NACA0012. Στην εφαρμογή αυτή, βασικός στόχος είναι ο έλεγχος της συμπεριφοράς του

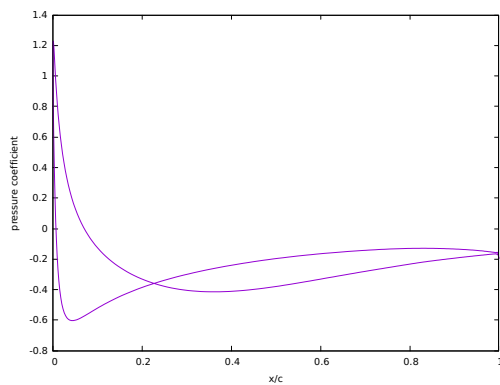


(α') Κατανομή πεδίου ταχύτητας (Mach) γύρω από τη βέλτιστη αεροτομή.

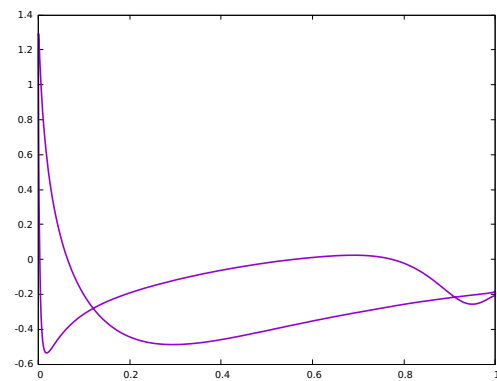


(β') Κατανομή πεδίου πίεσης γύρω από την βέλτιστη αεροτομή.

Σχήμα 6.11: Εφαρμογή 2 - Ροϊκά μεγέθη γύρω από τη βέλτιστη αεροτομή.



(α') Αρχική αεροτομή.



(β') Βέλτιστη αεροτομή.

Σχήμα 6.12: Εφαρμογή 2 - Διάγραμμα συντελεστή πίεσης κατά το αδιάστατο μήκος της αρχικής (NACA 4510) και της βέλτιστης αεροτομής.

αλγορίθμου βελτιστοποίησης στην περίπτωση που όλοι οι περιορισμοί ανισότητας είναι στο αρχικό σημείο ενεργοί, παρουσία φυσικά και μη-γραμμικού περιορισμού ισότητας.

Για το λόγο αυτό επιχειρήθηκε αρχικά η επίλυση ενός προβλήματος βελτιστοποίησης το οποίο στόχο είχε την ελαχιστοποίηση του συντελεστή αντίστασης της αεροτομής NACA0012, με σταθερό το συντελεστή αντίστασης, θέτοντας γεωμετρικούς περιορισμούς ανισο-ισότητας καθ' όλο το μήκος της αεροτομής. Οι περιορισμοί αυτοί συγκεκριμένα ήταν περιορισμοί πάχους, που κατανέμονταν σε όλο το μήκος της αεροτομής ανά 5% αυτού και γράφονται στη μορφή

$$c_{in}^k = t_i^k - t_0^k \geq 0 \quad \text{για } k = 10, 20, 30, 40, 50, 60, 70, 80, 90 \quad (6.2)$$

όπου με k συμβολίζεται το επί τοις εκατό μήκος της αεροτομής, άρα υπάρχουν 9 περιορισμοί ανισο-ισότητας, με t το πάχος αυτής στο αντίστοιχο σημείο k και με i ο αριθμός της επανάληψης.

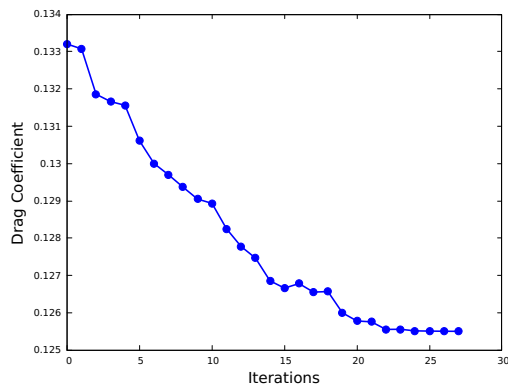
Οι συνθήκες της ροής επιλέχτηκαν οι ίδιες με αυτές των δύο πρώτων εφαρμογών.

Εφόσον η γωνία της επ' άπειρον ροής είναι μηδενική, προφανώς ο συντελεστής άνωσης για συμμετρική αεροτομή θα είναι μηδενικός. Ο περιορισμός ισότητας, λοιπόν, ($c_{l_0} = c_l$) πρακτικά σημαίνει ότι η αεροτομή πρέπει να παραμείνει συμμετρική. Επιχειρώντας τη βελτιστοποίηση του συντελεστή αντίστασης σε μία συμμετρική αεροτομή, η φυσική εξέλιξη της διαδικασίας είναι η προσπάθεια μείωσης του πάχους της ώστε να επιτευχθεί μειωμένη αντίσταση. Περιορίζοντας, όμως, το πάχος της αεροτομής επιτρέποντας μηδενική μείωση του σε όλο το μήκος της, η προσπάθεια εύρεσης συμμετρικής γεωμετρίας με μικρότερο συντελεστή αντίστασης και μεγαλύτερο περίγραμμα ετίθετο εξ αρχής εν αμφιβόλω. Πράγματι κατά την εκκίνηση της διαδικασίας βελτιστοποίησης, από την πρώτη κιόλας επανάληψη, η διαδικασία τερματιζόταν, ικανοποιώντας όλα τα κριτήρια σύγκλισης και δίνοντας μηδενική μετατόπιση ως προς τη μείωση της αντικειμενικής συνάρτησης.

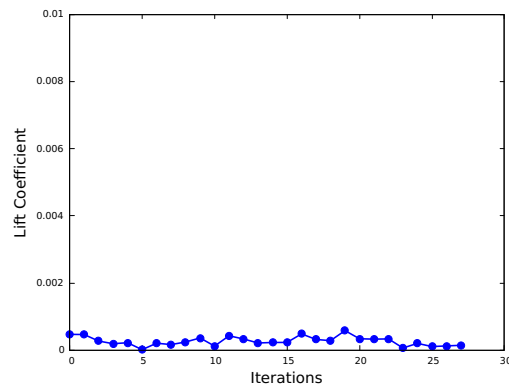
Αφού το αρχικό πρόβλημα που τέθηκε προς βελτιστοποίηση δεν έδωσε αποτελέσματα ως προς τη μείωση του συντελεστή άνωσης, επιχειρήθηκε η υποχαλάρωση των περιορισμών ανισο-ισότητας έτσι ώστε να δοθεί ελευθερία μεταβολής της γεωμετρίας της αεροτομής. Αυτή είναι και η εφαρμογή σε αεροτομή NACA0012 που παρουσιάζεται στη συνέχεια. Οι νέοι περιορισμοί ανισο-ισότητας έχουν τοποθετηθεί με διπλάσια πυκνότητα κατά μήκος της αεροτομής, όπως έγινε αρχικά, αυτή τη φορά όμως δεν αφορούν όλο το μήκος της αεροτομής, αλλά μόνο το δεύτερο μισό αυτού, άρα ο αριθμός των περιορισμών παραμένει ίδιος. Έτσι οι νέοι περιορισμοί ανισο-ισότητας γράφονται

$$c_{in}^k = t_i^k - t_0^k \geq 0 \quad \text{για } k = 50, 55, 60, 65, 70, 75, 80, 85, 90 \quad (6.3)$$

Στο Σχήμα 6.13 φαίνονται τα αποτελέσματα της βελτιστοποίησης, όπου η αντικειμενική συνάρτηση του συντελεστή αντίστασης έχει συγκλίνει από την αρχική τιμή της $c_d^0 =$



(α') Σύγκλιση της αντικειμενικής συνάρτησης - Ελαχιστοποίηση συντελεστή αντίστασης.

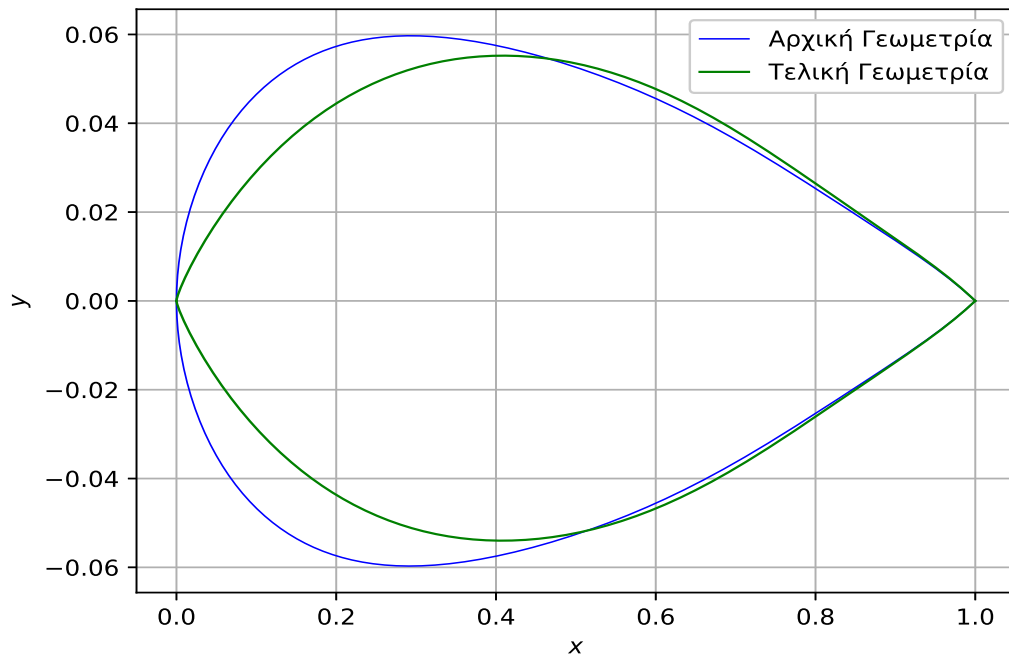


(β') Μεταβολή του περιορισμού ισότητας (συντελεστής άνωσης ίσος με αρχικό) κατά τη βελτιστοποίηση.

Σχήμα 6.13: Εφαρμογή 3 - Αποτελέσματα βελτιστοποίησης.

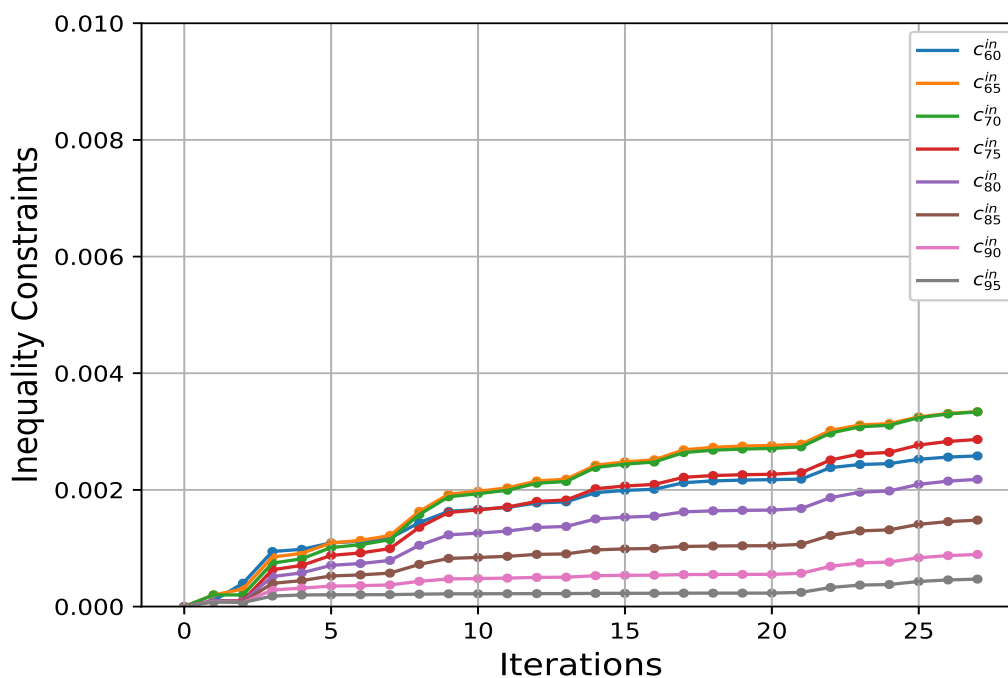
0.1332 στην τελική τιμή $c_d^{opt} = 0.1255$ μετά από 27 επαναλήψεις επιτυγχάνοντας μείωση 5.78% (Σχήμα 6.13α'), διατηρώντας παράλληλα το συντελεστή άνωσης της αεροτομής σταθερά μηδενικό, όπως αποδεικνύει και η μεταβολή του κατά τη βελτιστοποίηση στο Σχήμα 6.13β'.

Η αρχική γεωμετρία της αεροτομής έχει μεταβληθεί αρκετά στο πρώτο μισό του μήκους της, ακολουθώντας την αναμενόμενη μεταβολή μείωσης του πάχους, η γεωμετρία όμως στο δεύτερο μισό αυτής, όπου έχουν επιβληθεί και οι περιορισμοί ανισο-ισότητας έχει παραμείνει πρακτικά αμετάβλητη, όπως φαίνεται και στο Σχήμα 6.14. Το εύρος τιμών του άξονα y στο Σχήμα 6.14 είναι μικρότερο από αυτό στις προηγούμενες εφαρμογές για να φανεί καλύτερα η λεπτομέρεια στην αρχική και τελική γεωμετρία, καθώς αυτές στο δεύτερο μισό του μήκους της αεροτομής σχεδόν ταυτίζονται.



Σχήμα 6.14: Εφαρμογή 3 - Αρχική και βέλτιστη γεωμετρία της αεροτομής.

Στο Σχήμα 6.15 δίνεται η μεταβολή των περιορισμών ανισο-ισότητας κατά τη διάρκεια της βελτιστοποίησης, η οποία επιβεβαιώνει τη διατήρηση της αρχικής γεωμετρίας στο δεύτερο μισό του μήκους της αεροτομής. Οι μεταβολές που φαίνονται στο Σχήμα 6.15 είναι πρακτική μηδενικές, απλά δίνονται σε πολύ μικρή κλίμακα για την ευκρινέστερη παρουσίαση τους.

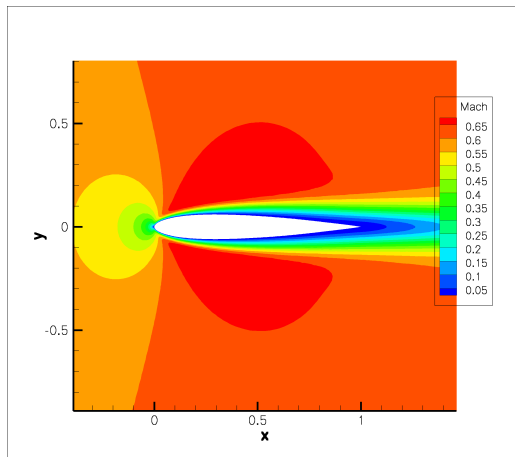


Σχήμα 6.15: Εφαρμογή 3 - Μεταβολή γεωμετρικών περιορισμών ανισο-ισότητας.

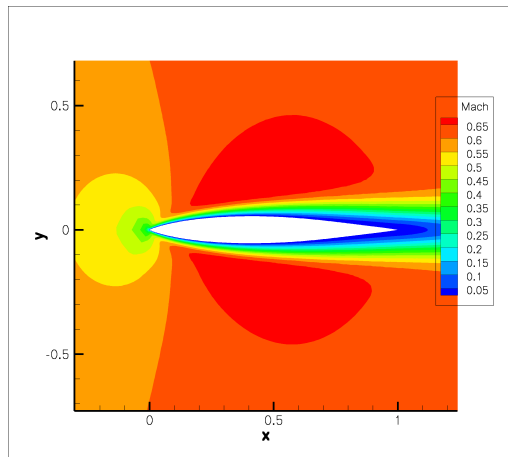
Παρατηρώντας το πεδίο ταχύτητας γύρω από την αεροτομή στο Σχήμα 6.16, δεν υπάρχει καμία εμφανής μεταβολή του πεδίου μεταξύ της αρχικής (Σχήμα 6.17α') και τελικής αεροτομής (Σχήμα 6.17β'). Εάν γίνει εστίαση, όμως, στο πεδίο ταχύτητας κοντά στην ακμή προσβολής της αεροτομής, όπως γίνεται στο Σχήμα 6.17, φαίνεται ότι η περιοχή μείωσης της ταχύτητας του ρευστού πριν και ακριβώς μετά την ακμή προσβολής είναι λίγο μικρότερη, γεγονός που δικαιολογεί τη μείωση του συντελεστή αντίστασης της τάξης του 5.5%.

6.4 Εφαρμογή 4 - NACA8410

Στην εφαρμογή αυτή επιχειρείται η βελτιστοποίηση μίας αεροτομής NACA8410 ως προς το συντελεστή αντίστασης. Η διαφορά της εφαρμογής αυτής σε σχέση με τις εφαρμογές που ήδη παρουσιάστηκαν είναι η διαφοροποίηση του περιορισμού ισότητας, ο οποίος στην εφαρμογή αυτή δεν επιλέγεται τέτοιος ώστε να διατηρείται ίδιο με τον αρχικό, αλλά έχει αυτή τη φορά τη μορφή συνάρτησης-στόχου. Επιλέγεται, δηλαδή, να πραγματοποιηθεί ελαχιστοποίηση του συντελεστή αντίστασης, στοχεύοντας παράλληλα στην επίτευξη συντελεστή άνωσης που θα είναι 20% μεγαλύτερος από το συντελεστή

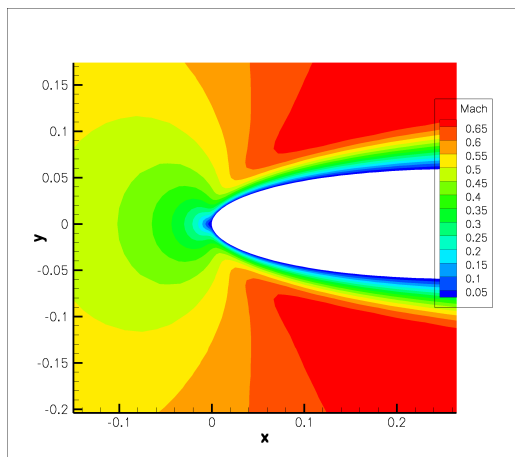


(α') Αρχική αεροτομή.

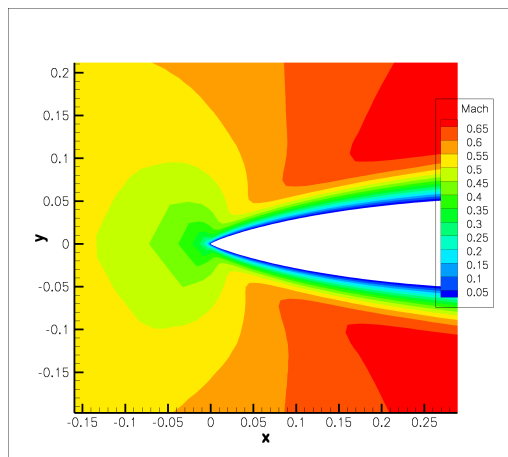


(β') Βέλτιστη αεροτομή.

Σχήμα 6.16: Εφαρμογή 3 - Κατανομή πεδίου αριθμού Mach γύρω από την αρχική (NACA 0012) και τη βέλτιστη αεροτομή.



(α') Αρχική αεροτομή.

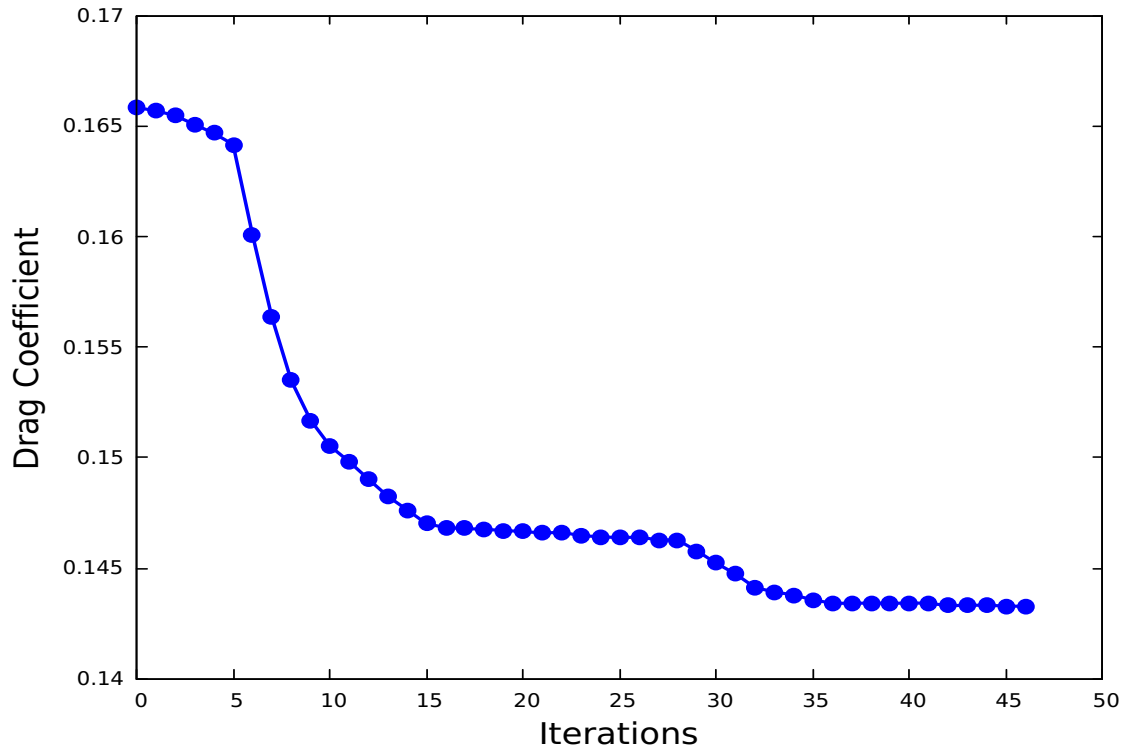


(β') Βέλτιστη αεροτομή.

Σχήμα 6.17: Εφαρμογή 3 - Κατανομή πεδίου αριθμού Mach γύρω από την αρχική (NACA 0012) και τη βέλτιστη αεροτομή - Εστίαση στην ακμή προσβολής.

άνωσης της αρχικής γεωμετρίας. Για τη βέλτιστη γεωμετρία θα πρέπει δηλαδή να ισχύει

$$c_l^{opt} = 1.2 c_{l_0}$$



Σχήμα 6.18: Εφαρμογή 4 - Σύγκλιση της αντικειμενικής συνάρτησης - Συντελεστής αντίστασης.

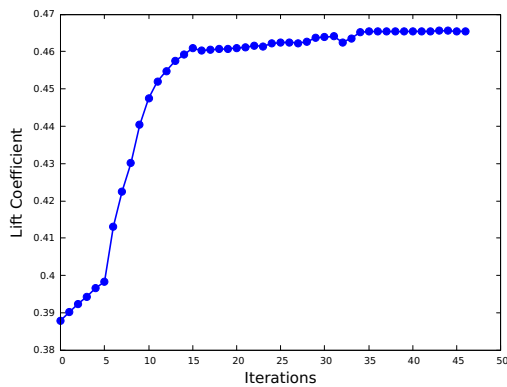
Η εφαρμογή, αυτή, διαφοροποιείται ακόμα και ως προς τις συνθήκες ροής, καθώς ενώ η ταχύτητα και ο αριθμός Reynolds παραμένουν ίδια με τις τιμές στις προηγούμενες εφαρμογές, επιλέγεται τώρα διαφορετική επί άπειρον γωνία ροής ίσης με 5° . Οι συνθήκες ροής για της εφαρμογή αυτή είναι, δηλαδή,

$$M = 0.7$$

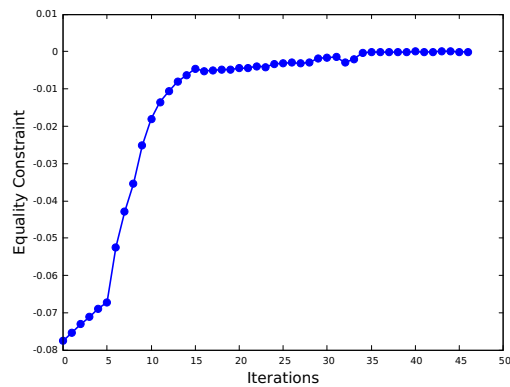
$$Re_c = 1000$$

$$a_\infty = 5^\circ$$

Παράλληλα με τον περιορισμό ισότητας, τοποθετούνται ακόμα 9 γεωμετρικοί περιορισμοί ανισο-ισότητας, οι οποίοι αφορούν το πάχος της αεροτομής και



(α') Μεταβολή του συντελεστή άνωσης κατά τη βελτιστοποίηση.



(β') Μεταβολή του περιορισμού ισότητας ($c_1^{opt} = 1.2 c_{10}$) κατά τη βελτιστοποίηση.

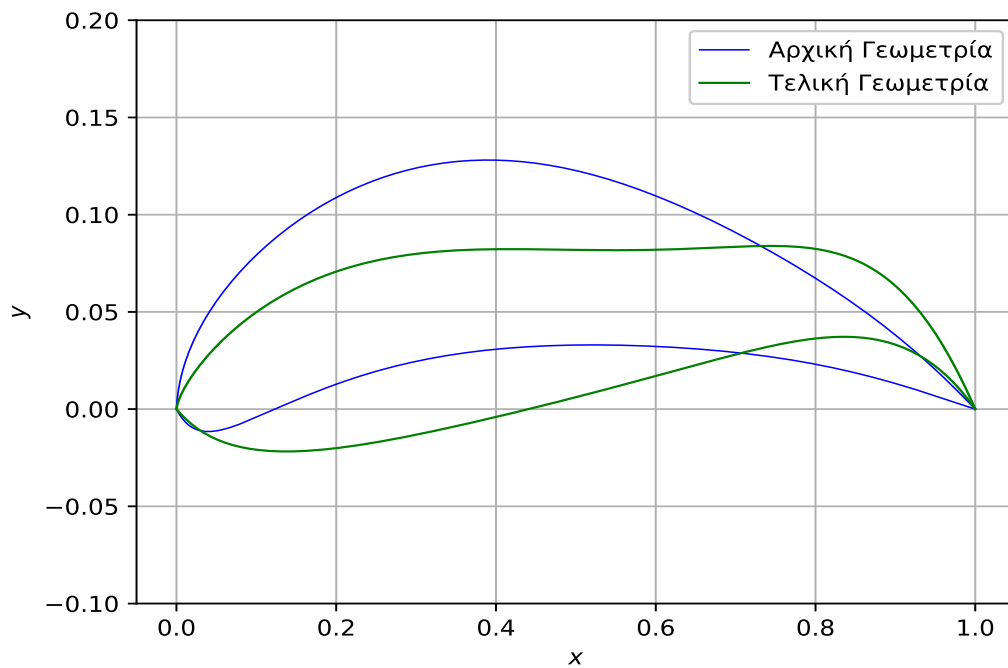
Σχήμα 6.19: Εφαρμογή 4 - Αποτελέσματα βελτιστοποίησης.

κατανέμονται σε όλο το μήκος αυτής ανά 10% αυτού. Οι περιορισμοί ανισο-ισότητας γράφονται, λοιπόν, ως

$$c_{in}^k = t_i^k - t_0^k \geq 0 \quad \text{για } k = 10, 20, 30, 40, 50, 60, 70, 80, 90 \quad (6.4)$$

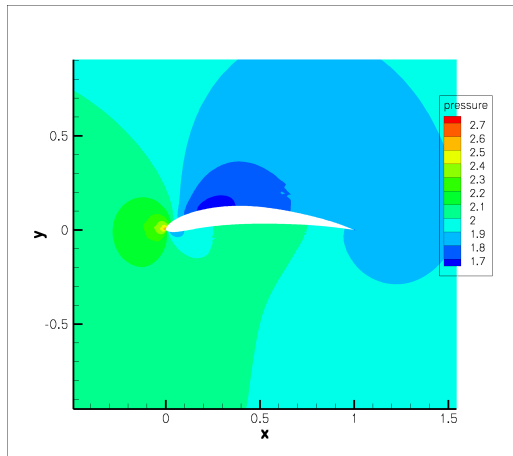
Στο Σχήμα 6.18 δίνεται η σύγκλιση της αντικειμενικής συνάρτησης κατά τη διαδικασία της βελτιστοποίησης, όπου προκύπτει η επιτυχία της διαδικασίας και η σύγκλιση του συντελεστή αντίστασης στην τιμή $c_d^{opt} = 0.14327$ μετά από 46 επαναλήψεις, επιτυγχάνοντας μείωση 13.6% εκκινώντας από την τιμή $c_d^0 = 0.1658$.

Στο Σχήμα 6.19 φαίνεται η πορεία σύγκλισης του συντελεστή άνωσης (Σχήμα 6.19α' και του περιορισμού ισότητας (Σχήμα 6.19β', ο οποίος όπως φαίνεται επιτυγχάνει τη σύγκλιση στην τιμή μηδέν, ικανοποιώντας έτσι τη συνάρτηση-στόχο που επιδιώκει την κατά 20% αύξηση του αρχικού συντελεστή άνωσης.

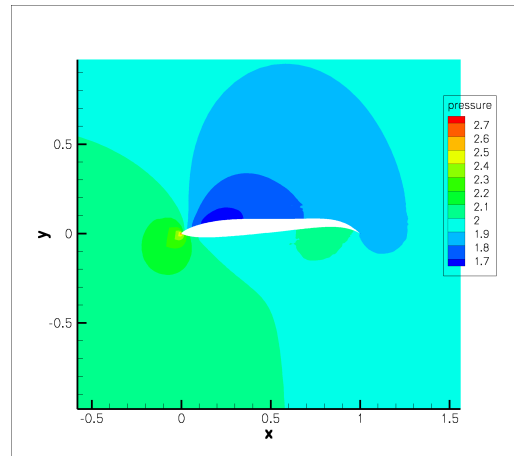


Σχήμα 6.20: Εφαρμογή 4 - Αρχική και βέλτιστη γεωμετρία της αεροτομής.

Στο Σχήμα 6.20 συγκρίνονται οι γεωμετρίες της αρχικής και της βέλτιστης αεροτομής, δίνοντας αρχικά την εντύπωση ότι οι περιορισμοί ανισο-ισότητας στα σημεία ελέγχου ικανοποιούνται, επιβεβαιώνεται όμως η εντύπωση αυτή χάρη στο Σχήμα 6.21 που επαληθεύει τη θετική τιμή των περιορισμών αυτών καθ' όλη τη διάρκεια της βελτιστοποίησης.

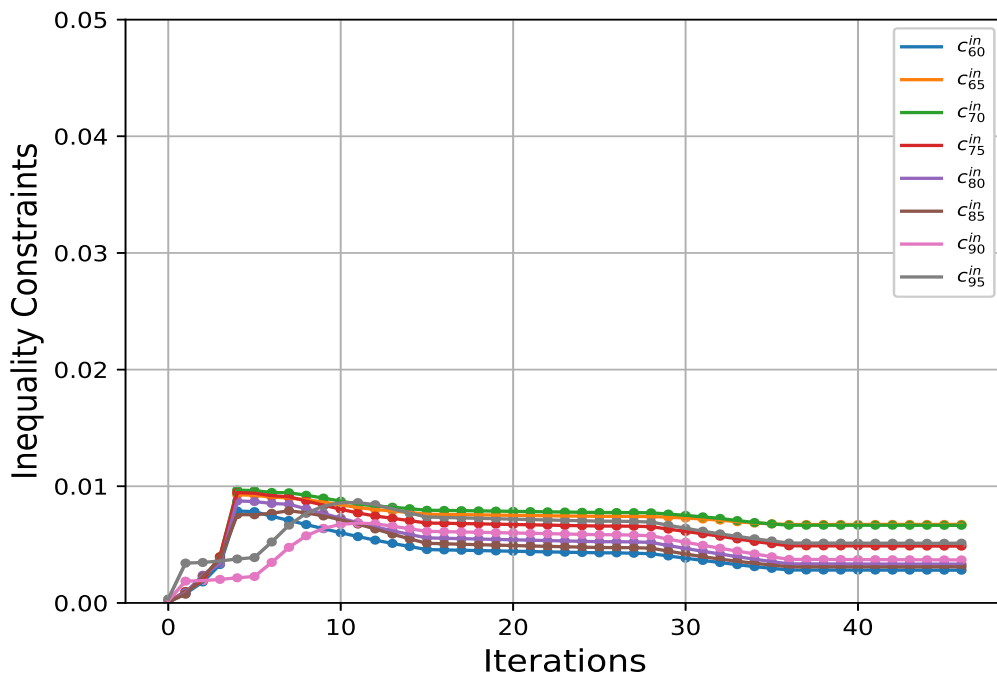


(α') Αρχική αεροτομή.



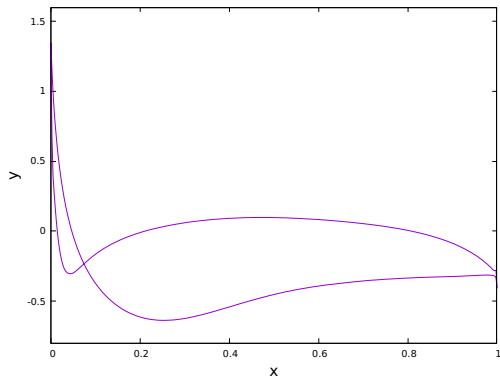
(β') Βέλτιστη αεροτομή.

Σχήμα 6.22: Εφαρμογή 4 - Κατανομή πεδίου πίεσης γύρω από την αρχική (NACA 8410) και τη βέλτιστη αεροτομή.

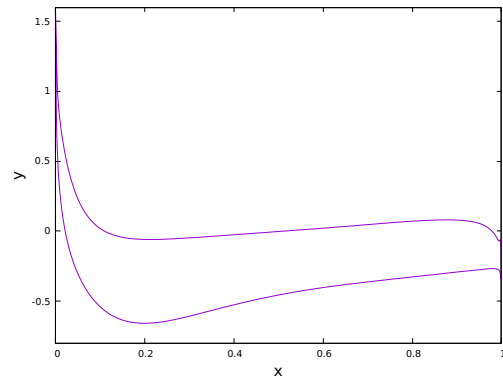


Σχήμα 6.21: Εφαρμογή 4 - Μεταβολή γεωμετρικών περιορισμών ανισο-ισότητας.

Παρατηρώντας την κατανομή του πεδίου πίεσης γύρω από τη βέλτιστη αεροτομή 6.22β' διακρίνεται η διαφοροποίηση αυτού από το πεδίο πίεσης της αρχικής αεροτομής στο Σχήμα 6.22α', δεν φαίνεται ξεκάθαρα όμως εάν η δημιουργία της περιοχής υψηλής πίεσης κοντά στην ακμή εκφυγής της αεροτομής και η εξάλειψη της περιοχής χαμηλής πίεσης



(α') Αρχική αεροτομή.



(β') Βέλτιστη αεροτομή.

Σχήμα 6.23: Εφαρμογή 4 - Διάγραμμα συντελεστή πίεσης κατά το αδιάστατο μήκος της αρχικής (NACA 8410) και της βέλτιστης αεροτομής.

στην πλευρά υπερπίεσης στην ακμή προσβολής που υπήρχε αρχικά στο Σχήμα 6.22α' είναι ικανές μεταβολές για να δικαιολογήσουν την αύξηση του συντελεστή άνωσης στη βέλτιστη αεροτομή. Η μεταβολή, όμως, του συντελεστή άνωσης δικαιολογείται σίγουρα από το Σχήμα 6.23, όπου φαίνεται η κατανομή του συντελεστή πίεσης κατά μήκος της αεροτομής και παρατηρείται η μη ύπαρξη περιοχής 'αρνητικής' άνωσης στη βέλτιστη αεροτομή, αυξάνοντας κατά συνέπεια το συντελεστή άνωσης.

Κεφάλαιο 7

Σύνοψη - Συμπεράσματα -

Προτάσεις για μελλοντική μελέτη

Συνοψίζοντας, στην εργασία αυτή παρουσιάστηκε η μέθοδος του Διαδοχικού Τετραγωνικού Προγραμματισμού (SQP) και η εφαρμογή της σε δύο ειδών προβλήματα, μαθηματικά και αεροδυναμικής. Συγκεκριμένα, αναπτύχθηκαν τα μαθηματικά εργαλεία ελέγχου σύγκλισης, επίλυσης συστημάτων εξισώσεων και υπολογισμού δευτέρων παραγώγων, αναπτύχθηκε η θεωρία επίλυσης προβλημάτων με περιορισμούς ισότητας και επεκτάθηκε η θεωρία στην επίλυση προβλημάτων με περιορισμούς ανισό-ισότητας (είτε σε συνδυασμό με περιορισμούς ισότητας είτε χωρίς) χρησιμοποιώντας τη μέθοδο βελτιστοποίησης Ενεργού Συνόλου (Active Set), η οποία είναι μέθοδος βελτιστοποίησης προβλημάτων Τετραγωνικού Προγραμματισμού (Quadratic Programming). Όλα τα παραπάνω υλοποιήθηκαν σε μορφή αλγορίθμου βελτιστοποίησης, που προγραμματίστηκε σε γλώσσα προγραμματισμού Python. Ο αλγόριθμος βελτιστοποίησης ελέγχθηκε, αρχικά, ως προς την απόδοσή του σε μαθηματικά προβλήματα με οποιοδήποτε είδος περιορισμού και προγραμματίστηκε ώστε να επιτευχθεί η συνεργασία του με λογισμικό γένεσης πλέγματος και επιλύτη ροής, ώστε να χρησιμοποιηθεί σε προβλήματα αεροδυναμικής βελτιστοποίησης.

Τα βασικότερα συμπεράσματα που εξήχθησαν κατά την εκπόνηση της εργασίας είναι τα ακόλουθα:

- Ο Διαδοχικός Τετραγωνικός Προγραμματισμός αποτελεί μία μέθοδο βελτιστοποίησης, η οποία κρίνεται εξαιρετικά αποτελεσματική για οποιοδήποτε πρόβλημα βελτιστοποίησης, ανεξάρτητα από τη μορφή της αντικειμενικής συνάρτησης, τις εξισώσεις των περιορισμών και τον τύπο αυτών (ισότητας, ανισότητας, ανισο-ισότητας και συνδυασμός τους). Η μέθοδος λειτούργησε αποτελεσματικά για απλές πολυωνυμικές αντικειμενικές συναρτήσεις, για

σύνθετες τριγωνομετρικές ή εκθετικές, καθώς και για μερικές διαφορικές. Επιπρόσθετα, όσον αφορά τους περιορισμούς είτε αυτοί ήταν ισότητας είτε ανισο-ισότητας η μέθοδος πέτυχε σύγκλιση για οποιαδήποτε μορφή τους.

- Η χρήση της προσεγγιστικής μεθόδου BFGS λειτούργησε αποτελεσματικά στην προσέγγιση δευτέρων παραγώγων σε κάθε εξωτερική αξιολόγηση, αποφεύγοντας τον υπολογισμό των ακριβών δευτέρων παραγώγων για να λειτουργήσει η μέθοδος βελτιστοποίησης μειώνοντας το υπολογιστικό κόστος.
- Η χρήση της μεθόδου του Ενεργού Συνόλου (Active Set) υπολογίζει αξιόπιστες μετατοπίσεις για το εξωτερικό πρόβλημα επιλύοντας ένα τετραγωνικό μοντέλο αυτού με μικρό υπολογιστικό κόστος, σε αριθμό επαναλήψεων που συνήθως βγαίνει μειούμενο με την πρόοδο της διαδικασίας.
- Η διαδικασία βελτιστοποίησης φαίνεται να οδηγείται σε σύγκλιση μετά από μικρό αριθμό επαναλήψεων (σε όλες τις περιπτώσεις αυτός ήταν μικρότερος από 50), καθιστώντας τη μέθοδο SQP σίγουρα ανταγωνιστική ως προς τις άλλες μεθόδους βελτιστοποίησης με περιορισμούς. Η κατάταξη αυτή, βέβαια, όπως και για κάθε μέθοδο βελτιστοποίησης, είναι άμεσα εξαρτώμενη από τη μορφή του προβλήματος και μπορεί να πραγματοποιηθεί αξιόπιστα μόνο με απευθείας σύγκριση μεθόδων στο ίδιο πρόβλημα.

Με βάση τα παραπάνω συμπεράσματα, εγείρονται διάφορα θέματα τα οποία θα μπορούσαν να προταθούν για μελλοντική μελέτη και ανάπτυξη. Κάποια από αυτά παρουσιάζονται παρακάτω:

- Στην εργασία αυτή, πραγματοποιήθηκαν εφαρμογές βελτιστοποίησης μόνο για τον έλεγχο αξιοπιστίας της μεθόδου SQP χωρίς να μπορούν να εξαχθούν συμπεράσματα σχετικά με την απόδοσή του. Όπως αναφέρθηκε και στο τελευταίο συμπέρασμα, η απόδοση μίας μεθόδου βελτιστοποίησης μπορεί να χαρακτηριστεί μόνο κατόπιν σύγκρισης με την απόδοση άλλης μεθόδου βελτιστοποίησης σε ίδια προβλήματα. Θα μπορούσε, λοιπόν, να πραγματοποιηθεί βελτιστοποίηση στα ίδια ή σε διαφορετικά προβλήματα αεροδυναμικής με άλλες μεθόδους βελτιστοποίησης, αιτιοκρατικές και στοχαστικές, και να γίνει σύγκριση της απόδοσής τους.
- Οι εφαρμογές βελτιστοποίησης που πραγματοποιήθηκαν σε 2Δ προβλήματα αεροδυναμικής, θα μπορούσαν να επεκταθούν σε 3Δ προβλήματα αεροδυναμικής και σε πολυπλοκότερες γεωμετρίες για να εξεταστεί περαιτέρω η αξιοπιστία της μεθόδου και σε προβλήματα πραγματικών βιομηχανικών εφαρμογών.

Βιβλιογραφία

- [1] Γιαννάκογλου Κ.Χ. *Μέθοδοι Βελτιστοποίησης στην Αεροδυναμική*. Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο, 2006.
- [2] Nocedal J. and Wright S. *Numerical Optimization*. 2000.
- [3] Ζερβογιάννης Θ. *Μέθοδοι Βελτιστοποίησης στην αεροδυναμική και τις στροβιλομηχανές με χρήση συζυγών τεχνικών, υβριδικών πλεγμάτων και του ακριβούς εσσιανού μητρώου*. Διδακτορική Διατριβή, Εργαστήριο Θερμικών Στροβιλομηχανών, ΕΜΠ, 2011.
- [4] Gill P. and Wong E. *Sequential Quadratic Programming Methods*. UCSD Department of Mathematics, Technical Report NA1003, 2010.
- [5] Wong E. *Active Set Methods for Quadratic Programming*. UCSD Department of Mathematics, 2011.
- [6] Hock W. and Schittkowski K. *Test Examples for Nonlinear Programming Codes*. Lecture Notes in Economics and Mathematical Systems, Vol. 183, Springer, 1981.
- [7] Γιαννάκογλου Κ.Χ, Αναγνωστόπουλος Ι. και Μπεργελές Γ. *Αριθμητική Ανάλυση για Μηχανικούς*. Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο, 2003.
- [8] Farkas J. *Über die Theorie der Einfachen Ungleichungen*. Journal für die Reine und Angewandte Mathematik, 1902.
- [9] Fletcher R. *Practical Methods of Optimization*. John Wiley and Sons, 1987.
- [10] Williams H.P. *Logic and integer programming*. *International Series in Operations Research & Management Science*, 2009.
- [11] Beckers M. *Topology optimization approaches. A comparative review*. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 2013.
- [12] Snyman J. *Practical Mathematical Optimization: An Introduction to Basic Optimization Theory and Classical and New Gradient-Based Algorithms*, 2005.
- [13] Goldberg D.E. *Genetic Algorithms in Search, Optimization, and Machine Learning*, 1989.

- [14] Spall J.C. *Introduction to Stochastic Search and Optimization*, 2003.
 - [15] Back T. *Evolutionary Algorithms in Theory and Practice: Evolution Strategies, Evolutionary Programming, Genetic Algorithms*, 1996.
 - [16] Hazewinkel M. *Newton Method*, *Encyclopedia of Mathematics*, 1994
 - [17] Hazewinkel M. *Kernel of a matrix*, *Encyclopedia of Mathematics*, 1994.
 - [18] Conn A., Gould M.N., Toint L.P. *Trust-Region Methods*, *SIAM Series on Optimization*, 2001.
 - [19] Gould M.N, Toint L.P. *A Quadratic Programming Bibliography*, 2000.
 - [20] Wright S. *Primal-Dual Interior-Point Methods*, 1997.
-