

Problemas de Programación Cuadrática



Paula Ascaso Pérez

Trabajo de fin de grado en Matemáticas
Universidad de Zaragoza

Director del trabajo: Pedro M. Mateo Collazos
28 de junio de 2021

Abstract

In this memory, Quadratic Programming Problems (QPP) has been studied, which is included in the Operations Research field. My interest in this subject was introduced by means of the Operations Research and Stochastic Optimization courses hold in the Mathematics degree. Particularly, the present work is related to the Linear Programming Problem and the Non-linear Programming Problem both were studied in the Operations Research course. The first one was studied in deep but the second one, Non-linear programming, was studied in a shorter way. As the Quadratic Programming Problem is a particular case of Non-linear Problem this work has helped me to delve into the field of Non-linear Programming. However, this is a broad topic that still needs to be addressed and it could be interesting to continue studying it.

The principal applications of Quadratic Programming appear mainly in the areas financial portfolio models, production/demand curve models and constrained least squares regression.

In the memory, the theory of QPP is divided in three parts, which have a similar structure. The first is the QPP with no constraints, then the second one considers the QPP with linear equality constraints and finally the more general model with linear equality an inequality constraints is developed. This has allowed to develop and explain the main problem more conveniently. The algorithm to solve the problem with equality constraints will basically need to modify the initialization phase presented for the algorithm of the problem without constraints, and the algorithm for the problem with equality and inequality restrictions will use successive applications of the algorithm for the problem with equality constraints.

The structure of the three chapters is similar:

- The problem is set up.
- Necessary and sufficient conditions for optimality are obtained.
- The existence and uniqueness theorems are given.
- The algorithm to solve the problem is developed together with the proof of convergence.
- Some examples are provided at the end of each chapter.

Regarding to the optimality conditions under convexity we get for the no constrained problem the usual necessary and sufficient condition, zero gradient. When the problem includes equality or equality and inequality constraints, then the optimality conditions become the Karush Kuhn Tucker optimality conditions. The general idea of the algorithms consists on given a current solution determining a feasible direction along which the objective function decreases and then it moves along this direction as much as possible, the way to create these directions is by guaranteeing that a base of conjugate directions is formed, that is a key aspect in the functioning of the algorithm.

The studied, synthesized and post-developed results are mainly obtained from the Chapters 3, 4 and 5 of the book [1]. The tools used in the demonstrations of the theoretical results are local techniques of Taylor series and methods of bases of subspaces, both studied in the subjects of the degree Linear Algebra and Mathematical Analysis. The algebraic properties of convex quadratic functions are also used. Furthermore, the algorithms use inverse matrix update methods when a single row is changed in

the original matrix. These methods are presented in the Appendix B, but can be consulted in the article [2]. To guarantee the convergence of the studied algorithms, bases of conjugate directions are used, defined in the Appendix A.

In order to address the great number of studied results and taking into account the limitation of space we have only presented the more significant proofs of results postponing the similar proofs or more technical ones to the appendixes. The Appendix A presents several preliminary results which will be used throughout the work. The Appendix B includes two systematic methods for updating inverse matrix used by the algorithms, and two application examples of the algorithm presented in the Chapter 1, which have a different termination than the example presented in this Chapter. Appendix C y D contain those proofs of results from Chapters 2 and 3 which are similar or use similar tools to those previously used.

Lastly, in the Chapter 4 we will talk about how these types of Programming Problems can be solved using different Computer Programs. The use of this type of programs will be mandatory for real problems which involve a large number of variables and can be made impossible to solve by hand. Particularly, we have considered four programs, the first given by the author of de book [1] is coded in Matlab language and could be uses with Octave software [8]. The others are the R library quadprog and the two commercial software Lingo and Cplex. For all of them it is shown how to code the problem, how to solve it and how to understand the results by means of the investment portfolio problem proposed in the Chapter 3.

In this work I have applied the skills acquired in the degree to study, understand and reformulate the theory on a specific topic, and it has obligated me to learn to synthesize and organize the information used for this work. Due to its computer application I have learned about some modeling languages and I have seen new programmas that I did not know, in addition to seeing the quick and easy resolution of the problem after the correct study and application of the algorithms.

Índice general

Abstract	III
1. PPC sin Restricciones	1
1.1. Condiciones de optimalidad y existencia y unicidad de la solución	1
1.2. Algoritmo 1	2
1.2.1. Cálculo de σ_i	2
1.2.2. Cálculo de s_j	3
1.2.3. Actualización de D_j^t y D_j^{-1}	4
1.2.4. Elección de s_j	5
1.2.5. Formulación del algoritmo, teorema de convergencia y ejemplos	6
2. PPC con Restricciones de Igualdad	9
2.1. Condiciones de optimalidad y existencia y unicidad de la solución	9
2.2. Algoritmo 2	10
2.2.1. Dirección de búsqueda s_j y matrices D_j^t y D_j^{-1}	10
2.2.2. Formulación del algoritmo, teorema de convergencia y ejemplos	11
3. PPC con Restricciones de Desigualdad	13
3.1. Condiciones de optimalidad y existencia de la solución	13
3.2. Algoritmo 3	16
3.2.1. Búsqueda de un punto cuasiestacionario	17
3.2.2. Cálculo del tamaño de paso σ_j	17
3.2.3. Actualización de D_j^{-1} y de J_j	18
3.2.4. Test de optimalidad	18
3.2.5. Formulación del algoritmo, teorema de convergencia y ejemplos	19
4. Resolución con Programas de Ordenador	23
4.1. Lingo	23
4.2. Cplex	24
4.3. R	25
Bibliografía	27
Anexos	1
A. Conceptos básicos	3
A.1. Funciones cuadráticas y funciones convexas	3
A.2. Direcciones conjugadas	5
A.3. Teorema de la Descomposición Ortogonal	6
A.4. Propiedades de las matrices	6

B. Ejemplos para el Algoritmo 1	7
B.1. Métodos de actualización de matrices inversas	7
B.1.1. Método Φ	7
B.1.2. Método Φ_1	7
B.2. Ejemplos	8
C. Demostraciones del Capítulo 2	11
C.1. Existencia y unicidad de la solución	11
C.2. Teorema de convergencia del Algoritmo 2	12
D. Demostraciones del Capítulo 3	15
D.1. Existencia de la solución	15
D.2. Condiciones necesarias y suficientes para la unicidad	17
D.3. Teorema de convergencia del Algoritmo 3	20

Capítulo 1

Problemas de Programación Cuadrática sin Restricciones

1.1. Condiciones de optimalidad y existencia y unicidad de la solución

Consideramos el problema de minimización cuadrática sin restricciones

$$\begin{aligned} \min f(\mathbf{x}) &= \mathbf{c}'\mathbf{x} + \frac{1}{2}\mathbf{x}'C\mathbf{x} \\ \text{sujeto a: } \mathbf{x} &\in \mathbb{R}^n, \end{aligned} \quad (1.1)$$

donde $\mathbf{c} \in \mathbb{R}^n$ y $C_{n \times n}$ es una matriz simétrica.

Definición 1. Un punto \mathbf{x}_0 se dice *mínimo global* o *solución óptima* para el problema (1.1) si $f(\mathbf{x}_0) \leq f(\mathbf{x}) \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$.

Definición 2. La función objetivo para el problema (1.1) es *no acotada inferiormente* (o el problema es *no acotado inferiormente*) si $\exists \mathbf{x}_0, \mathbf{s}_0 \in \mathbb{R}^n$ tales que $f(\mathbf{x}_0 - \sigma \mathbf{s}_0) \xrightarrow{\sigma \rightarrow +\infty} -\infty$.

Teorema 1.1 (Condición necesaria de optimalidad). Si \mathbf{x}_0 es una solución óptima para el problema (1.1) $\implies g(\mathbf{x}_0) = \mathbf{0}$.

Dem. Dada \mathbf{x}_0 la solución óptima. Sean $\mathbf{0} \neq \mathbf{s} \in \mathbb{R}^n$ y $\sigma \in \mathbb{R}$. Dejamos \mathbf{s} fijo y hacemos variar σ alrededor de 0, de manera que $\mathbf{x}_0 - \sigma \mathbf{s}$ es el punto obtenido de \mathbf{x}_0 desplazando una distancia σ en la dirección $-\mathbf{s}$.

Como \mathbf{x}_0 es mínimo global, el valor más pequeño de $f(\mathbf{x}_0 - \sigma \mathbf{s})$ se obtiene cuando $\sigma = 0$, y tendremos que¹ $f_\sigma(\mathbf{x}_0 - \sigma \mathbf{s}) = 0$ para $\sigma = 0$. La serie de Taylor de f entorno a \mathbf{x}_0 es

$$f(\mathbf{x}_0 - \sigma \mathbf{s}) = f(\mathbf{x}_0) - \sigma g(\mathbf{x}_0)' \mathbf{s} + \frac{1}{2} \sigma^2 \mathbf{s}' C \mathbf{s},$$

que queda expresada como función cuadrática de σ .

Así, $f_\sigma(\mathbf{x}_0 - \sigma \mathbf{s}) = -g(\mathbf{x}_0)' \mathbf{s} + \mathbf{s}' C \mathbf{s} \sigma$, y por ser \mathbf{x}_0 mínimo global ($\sigma = 0$) se tiene $-g(\mathbf{x}_0)' \mathbf{s} = 0 \implies g(\mathbf{x}_0)' \mathbf{s} = 0 \forall \mathbf{s} \in \mathbb{R}^n$. En particular, se cumple para todos los vectores unitarios \mathbf{e}_i (vector con todo ceros excepto en la componente i -ésima que tiene un 1), luego $g(\mathbf{x}_0)' \mathbf{e}_i = \frac{\partial f(\mathbf{x}_0)}{\partial x_i} = 0 \quad \forall i = 1, \dots, n \implies g(\mathbf{x}_0) = \mathbf{0}$. □

Teorema 1.2 (Condiciones necesarias y suficientes de optimalidad). Sea $f(\mathbf{x}) = \mathbf{c}'\mathbf{x} + \frac{1}{2}\mathbf{x}'C\mathbf{x}$ una función convexa. Entonces, \mathbf{x}_0 es una solución óptima para el problema (1.1) $\iff g(\mathbf{x}_0) = \mathbf{0}$.

Dem. Sólo falta probar la suficiencia ya que la necesidad acabamos de probarla con el teorema anterior.

Sea $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^n$ tal que $g(\mathbf{x}_0) = \mathbf{0}$, y sea $\mathbf{s} \in \mathbb{R}^n$, entonces la serie de Taylor de f entorno a \mathbf{x}_0 es $f(\mathbf{x}_0 - \mathbf{s}) = f(\mathbf{x}_0) + \frac{1}{2} \mathbf{s}' C \mathbf{s}$, es decir, $f(\mathbf{x}_0 - \mathbf{s}) - f(\mathbf{x}_0) = \frac{1}{2} \mathbf{s}' C \mathbf{s}$, y por ser f convexa, $\mathbf{s}' C \mathbf{s} \geq 0 \forall \mathbf{s} \in \mathbb{R}^n$, luego $f(\mathbf{x}_0 - \mathbf{s}) \geq f(\mathbf{x}_0) \forall \mathbf{s} \in \mathbb{R}^n$, y por tanto \mathbf{x}_0 es la solución óptima. □

¹Denotamos con f_σ a la derivada de f respecto de σ .

Teorema 1.3 (Unicidad de la solución). *Sea \mathbf{x}_0 una solución óptima para el problema (1.1). Si f es estrictamente convexa $\implies \mathbf{x}_0$ es la única solución óptima.*

Dem. Supongamos que \mathbf{x}_1 es otra solución óptima y que $\mathbf{x}_1 \neq \mathbf{x}_0$. Por el teorema 1.2 tenemos que $g(\mathbf{x}_0) = \mathbf{c} + C\mathbf{x}_0 = \mathbf{0}$ y $g(\mathbf{x}_1) = \mathbf{c} + C\mathbf{x}_1 = \mathbf{0}$. Así, restando estas tenemos $C(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0) = \mathbf{0}$ y multiplicando por $(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0)^t$ llegamos a $(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0)^t C(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0) = 0$ que, como f es estrictamente convexa, por la caracterización del teorema A.1 implica que $(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0) = \mathbf{0}$, luego $\mathbf{x}_1 = \mathbf{x}_0$ y por tanto \mathbf{x}_0 es la única solución óptima. \square

Teorema 1.4 (Existencia de la solución). *Si $\exists \gamma \in \mathbb{R}$ tal que $f(\mathbf{x}) = \mathbf{c}^t \mathbf{x} + \frac{1}{2} \mathbf{x}^t C \mathbf{x} \geq \gamma \quad \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \implies$ existe una solución óptima para el problema (1.1).*

Dem. Por el teorema A.5 podemos escribir $\mathbf{c} \in \mathbb{R}^n$ como $\mathbf{c} = \mathbf{c}_1 + \mathbf{c}_2$, donde \mathbf{c}_1 pertenece al espacio generado por las columnas de C y \mathbf{c}_2 es ortogonal a este espacio, es decir, $\mathbf{c}_1 = C\mathbf{w}$, para algún $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^n$, y $\mathbf{c}_2^t C = \mathbf{0}$. Entonces $\mathbf{c}_2^t \mathbf{c}_1 = \mathbf{c}_2^t C\mathbf{w} = 0$, y por tanto $\mathbf{c}_2^t \mathbf{c} = \mathbf{c}_2^t (\mathbf{c}_1 + \mathbf{c}_2) = \mathbf{c}_2^t \mathbf{c}_2$.

Sea $\sigma \in \mathbb{R}$, $f(-\sigma \mathbf{c}_2) = -\sigma \mathbf{c}_2^t \mathbf{c}_2 + \frac{1}{2} \sigma^2 \mathbf{c}_2^t C \mathbf{c}_2 = -\sigma \mathbf{c}_2^t \mathbf{c}_2$, como $\mathbf{c}_2^t \mathbf{c}_2$ es la suma de cuadrados de las componentes de \mathbf{c}_2 , $\mathbf{c}_2^t \mathbf{c}_2 \geq 0$. Además, $\mathbf{c}_2^t \mathbf{c}_2 = 0 \iff \mathbf{c}_2 = \mathbf{0}$. Ahora, si $\mathbf{c}_2 \neq \mathbf{0}$, entonces $\mathbf{c}_2^t \mathbf{c}_2 > 0$ y tomando σ arbitrariamente grande, $f(-\sigma \mathbf{c}_2)$ es no acotada inferiormente, lo que contradice la hipótesis del teorema.

En consecuencia, $\mathbf{c}_2 = \mathbf{0}$ y así $\mathbf{c} = \mathbf{c}_1 = C\mathbf{w}$. Tomando $\mathbf{x}_0 = -\mathbf{w}$ tenemos que $-\mathbf{c} = C\mathbf{x}_0$, y por tanto $g(\mathbf{x}_0) = \mathbf{c} + C\mathbf{x}_0 = \mathbf{0}$.

Si existiera algún $\mathbf{s} \in \mathbb{R}^n$ tal que $\mathbf{s}^t C \mathbf{s} < 0$, entonces, con lo anterior, la serie de Taylor de f entorno a \mathbf{x}_0 es $f(\mathbf{x}_0 - \sigma \mathbf{s}) = f(\mathbf{x}_0) + \frac{1}{2} \sigma^2 \mathbf{s}^t C \mathbf{s}$ y, de nuevo, tomando σ suficientemente grande, $f(\mathbf{x}_0 - \sigma \mathbf{s})$ puede disminuir sin cota contradiciendo la hipótesis del teorema.

En consecuencia, $\mathbf{s}^t C \mathbf{s} \geq 0 \quad \forall \mathbf{s} \in \mathbb{R}^n$ y, por la caracterización del teorema A.1, f es convexa, y como $g(\mathbf{x}_0) = \mathbf{0}$, por el teorema 1.2, \mathbf{x}_0 es una solución óptima. \square

1.2. Algoritmo 1

Presentamos un algoritmo para la solución del problema (1.1). Asumimos que la función objetivo es convexa. El algoritmo funciona de la siguiente manera:

- Dado un punto \mathbf{x}_i se construye un punto \mathbf{x}_{i+1} moviéndose en una cierta dirección \mathbf{s}_i ; una cantidad σ_i , $\mathbf{s}_i \in \mathbb{R}^n$ se denomina dirección de búsqueda y σ_i es el tamaño de paso.
- El algoritmo va determinando sucesivos \mathbf{x}_{i+1} , σ_i , \mathbf{s}_i hasta detectar que el problema es no acotado ó encontrar la solución óptima.

El algoritmo requiere por tanto determinar \mathbf{s}_i y σ_i , en las siguientes subsecciones veremos el proceso para obtener dichos valores.

1.2.1. Cálculo de σ_i

Comenzaremos determinando, dada una cierta dirección \mathbf{s}_i previamente establecida, cuál es el tamaño de paso óptimo σ_i que minimiza la función objetivo si parto de \mathbf{x}_i y me muevo en la dirección \mathbf{s}_i .

Para el cálculo del tamaño de paso óptimo supongamos que estamos en la primera iteración del algoritmo (con $j = 0$), en la que tenemos una estimación inicial \mathbf{x}_0 de la solución óptima y una dirección de búsqueda $\mathbf{s}_0 \neq \mathbf{0}$.

Observar que \mathbf{s}_0 debe ser una dirección de aumento y por tanto $-\mathbf{s}_0$ de disminución, es decir, debe ser una dirección de mejora, para ello debe cumplirse que² $\mathbf{g}_0^t \mathbf{s}_0 > 0$.

Construimos un nuevo punto de la forma $\mathbf{x}_1 = \mathbf{x}_0 - \sigma_0 \mathbf{s}_0$. Queremos que este nuevo punto \mathbf{x}_1 mejore a la solución anterior $f(\mathbf{x}_0)$, luego elegimos el σ_0 que minimice $f(\mathbf{x}_0 - \sigma \mathbf{s}_0)$, es decir, elegimos σ_0 tal que $f'_\sigma(\mathbf{x}_0 - \sigma \mathbf{s}_0) = 0$ en $\sigma = \sigma_0$.

²Vamos a denotar $\mathbf{g}_i = g(\mathbf{x}_i) \in \mathbb{R}^n$ al gradiente de f en \mathbf{x}_i .

La serie de Taylor de f entorno a \mathbf{x}_0 es $f(\mathbf{x}_0 - \sigma \mathbf{s}_0) = f(\mathbf{x}_0) - \sigma \mathbf{g}_0^t \mathbf{s}_0 + \frac{1}{2} \sigma^2 \mathbf{s}_0^t C \mathbf{s}_0$. Como f es convexa, $\mathbf{s}_0^t C \mathbf{s}_0 \geq 0$.

- Si $\mathbf{s}_0^t C \mathbf{s}_0 = 0$, entonces como $\mathbf{g}_0^t \mathbf{s}_0 > 0$, se tiene que $f(\mathbf{x}_0 - \sigma \mathbf{s}_0) = f(\mathbf{x}_0) - \sigma \mathbf{g}_0^t \mathbf{s}_0 \xrightarrow{\sigma \rightarrow +\infty} -\infty \implies$ el problema es no acotado inferiormente.
- Si $\mathbf{s}_0^t C \mathbf{s}_0 > 0$, como σ_0 minimiza $f(\mathbf{x}_0 - \sigma \mathbf{s}_0)$, y $[f_\sigma(\mathbf{x}_0 - \sigma \mathbf{s}_0)]_{\sigma=\sigma_0} = -\mathbf{g}_0^t \mathbf{s}_0 + \sigma_0 \mathbf{s}_0^t C \mathbf{s}_0 = 0$, obtenemos que el tamaño de paso óptimo es

$$\sigma_0 = \frac{\mathbf{g}_0^t \mathbf{s}_0}{\mathbf{s}_0^t C \mathbf{s}_0} > 0.$$

Así, hemos construido la siguiente aproximación a la solución óptima, $\mathbf{x}_1 = \mathbf{x}_0 - \sigma_0 \mathbf{s}_0$.

Calculando el gradiente de f a partir de la serie de Taylor entorno a \mathbf{x}_0 , (A.1), y evaluando en el nuevo punto obtenemos, $g(\mathbf{x}_1) = g(\mathbf{x}_0) + C(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0) = \mathbf{g}_0 + C(-\sigma_0 \mathbf{s}_0) \implies \mathbf{g}_1 = \mathbf{g}_0 - \sigma_0 C \mathbf{s}_0 \implies \mathbf{g}_1^t \mathbf{s}_0 = (\mathbf{g}_0^t - \sigma_0 \mathbf{s}_0^t C) \mathbf{s}_0 = \mathbf{g}_0^t \mathbf{s}_0 - \sigma_0 \mathbf{s}_0^t C \mathbf{s}_0 = 0$, por tanto, $\mathbf{g}_1^t \mathbf{s}_0 = 0$ el nuevo gradiente es ortogonal a la dirección de búsqueda actual.

Si continuamos construyendo puntos de esta manera, entonces en una iteración j general tendremos:

$$\sigma_j = \frac{\mathbf{g}_j^t \mathbf{s}_j}{\mathbf{s}_j^t C \mathbf{s}_j}, \quad \mathbf{x}_{j+1} = \mathbf{x}_j - \sigma_j \mathbf{s}_j, \quad \mathbf{g}_{j+1}^t \mathbf{s}_j = 0. \quad (1.2)$$

1.2.2. Cálculo de \mathbf{s}_i

Tras determinar el tamaño de paso óptimo veamos cómo determinar la dirección de mejora. Vemos primero un resultado que muestra que, usando direcciones de búsqueda conjugadas, se localiza el mínimo de una función cuadrática convexa en n pasos.

Teorema 1.5. *Supongamos que f es cuadrática convexa y sean $\mathbf{s}_0, \mathbf{s}_1, \dots, \mathbf{s}_{n-1}$ direcciones conjugadas. Sea un $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^n$ cualquiera y sean $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n$ construidos con el método explicado antes. Entonces:*

a) $\mathbf{g}_{j+1}^t \mathbf{s}_i = 0$ para $j = 0, 1, \dots, n-1$, $i = 0, 1, \dots, j$.

b) \mathbf{x}_n es la solución óptima para el problema (1.1).

Dem. a) Sea $0 \leq j \leq n-1$ y sea $i < j$. Calculando el gradiente de f a partir de la serie de Taylor entorno a \mathbf{x}_{i+1} , (A.1), y evaluando en $\mathbf{x} = \mathbf{x}_{j+1}$ obtenemos, $\mathbf{g}_{j+1} = \mathbf{g}_{i+1} + C(\mathbf{x}_{j+1} - \mathbf{x}_{i+1})$.

De (1.2), $\mathbf{g}_{i+1}^t \mathbf{s}_i = 0$, luego $\mathbf{g}_{j+1}^t \mathbf{s}_i = \mathbf{g}_{i+1}^t \mathbf{s}_i + (\mathbf{x}_{j+1}^t - \mathbf{x}_{i+1}^t) C \mathbf{s}_i = (\mathbf{x}_{j+1}^t - \mathbf{x}_{i+1}^t) C \mathbf{s}_i$.

Ahora, $\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i - \sigma_i \mathbf{s}_i = \mathbf{x}_{i-1} - \sigma_{i-1} \mathbf{s}_{i-1} - \sigma_i \mathbf{s}_i = \dots = \mathbf{x}_0 - \sigma_0 \mathbf{s}_0 - \sigma_1 \mathbf{s}_1 - \dots - \sigma_i \mathbf{s}_i$, y como, $i < j$, $\mathbf{x}_{j+1} = \mathbf{x}_j - \sigma_j \mathbf{s}_j = \dots = \mathbf{x}_0 - \sigma_0 \mathbf{s}_0 - \sigma_1 \mathbf{s}_1 - \dots - \sigma_i \mathbf{s}_i - \sigma_{i+1} \mathbf{s}_{i+1} - \dots - \sigma_j \mathbf{s}_j$.

Luego $\mathbf{x}_{j+1} - \mathbf{x}_{i+1} = -\sigma_{i+1} \mathbf{s}_{i+1} - \dots - \sigma_j \mathbf{s}_j$. Con esto tenemos que $\mathbf{g}_{j+1}^t \mathbf{s}_i = -\sigma_{i+1} \mathbf{s}_{i+1}^t C \mathbf{s}_i - \dots - \sigma_j \mathbf{s}_j^t C \mathbf{s}_i$, y como $\mathbf{s}_i, \dots, \mathbf{s}_j$ son direcciones conjugadas, todos los términos se anulan.

Por lo tanto, $\mathbf{g}_{j+1}^t \mathbf{s}_i = 0$ para $i = 0, 1, \dots, j-1$, y además, (1.2) afirma que $\mathbf{g}_{j+1}^t \mathbf{s}_j = 0$, lo que completa la demostración del apartado a).

b) Aplicando a) con $j = n-1$ se tiene $\mathbf{g}_n^t \mathbf{s}_i = 0$ para $i = 0, 1, \dots, n-1$. Por el lema A.4, \mathbf{g}_n es ortogonal a n vectores linealmente independientes $\implies \mathbf{g}_n = 0$ y, por el teorema 1.2, \mathbf{x}_n es solución óptima. \square

Supongamos ahora que estamos en una iteración j general del algoritmo, en la que tenemos j direcciones conjugadas, $\mathbf{s}_0, \dots, \mathbf{s}_{j-1}$, de las iteraciones previas.

Para organizar los cálculos durante el algoritmo definimos las matrices D_j y D_j^{-1} factorizadas de la siguiente manera, el vector \mathbf{d}_{ij}^t denota a la fila i -ésima de la matriz D_j y el vector \mathbf{c}_{ij} corresponde a la

columna i -ésima de la matriz D_j^{-1} , donde algunas \mathbf{c}_{ij} , $i = 1, \dots, n$, son paralelas a las \mathbf{s}_i , $i = 0, \dots, j-1$. Para identificarlas definimos el conjunto de índices ordenados $J_j = \{\alpha_{1j}, \dots, \alpha_{nj}\}$ donde $\alpha_{ij} = -1$ si \mathbf{c}_{ij} es paralela a alguna \mathbf{s}_i y $\alpha_{ij} = 0$ en caso contrario. De esta manera, para cada i con $\alpha_{ij} = -1$, \mathbf{c}_{ij} se define como $\mathbf{c}_{ij} = \frac{1}{\sqrt{\mathbf{s}_i^t \mathbf{C} \mathbf{s}_i}} \mathbf{s}_i$, para $l = 0, \dots, j-1$, y las columnas asociadas en D_j como $\mathbf{d}_{ij} = \mathbf{C} \mathbf{c}_{ij}$.

Por (A.2), para cada $i, k = 1, \dots, n$ se cumple

$$\begin{cases} \mathbf{d}_{ij}^t \mathbf{c}_{ij} = 1, \text{ y} \\ \mathbf{d}_{ij}^t \mathbf{c}_{kj} = 0 \quad \forall k \neq i. \end{cases} \quad (1.3)$$

En particular, para cada i con $\alpha_{ij} = -1$, se tiene

$$\begin{cases} \mathbf{d}_{ij}^t \mathbf{c}_{ij} = \mathbf{c}_{ij}^t \mathbf{C} \mathbf{c}_{ij} = 1, \text{ y} \\ \mathbf{d}_{ij}^t \mathbf{c}_{kj} = \mathbf{c}_{ij}^t \mathbf{C} \mathbf{c}_{kj} = 0 \quad \forall k \neq i, \end{cases}$$

y por tanto, definidas así, las \mathbf{c}_{ij} con $\alpha_{ij} = -1$ forman un conjunto de j direcciones conjugadas normalizadas, y todas las \mathbf{c}_{ij} para las que $\alpha_{ij} = 0$ serán candidatas para construir la siguiente dirección de búsqueda.

Por el teorema 1.5 a), se tiene que $\mathbf{g}_j^t \mathbf{s}_l = 0 \quad \forall l = 0, \dots, j-1$, y por la definición de las \mathbf{c}_{ij} se cumple

$$\mathbf{g}_j^t \mathbf{c}_{ij} = 0 \quad \forall i \text{ con } \alpha_{ij} = -1. \quad (1.4)$$

En otras palabras, el gradiente de la función objetivo en la iteración actual es ortogonal a todas las columnas de D_j^{-1} que son direcciones conjugadas normalizadas.

Tras establecer la notación que utilizaremos para los cálculos del algoritmo pasamos a determinar la siguiente dirección de búsqueda \mathbf{s}_j de manera que $\mathbf{s}_0, \dots, \mathbf{s}_j$ sea un conjunto de direcciones conjugadas.

Como $\mathbf{s}_0, \dots, \mathbf{s}_{j-1}$ son direcciones conjugadas, \mathbf{s}_j solo tiene que cumplir

$$\begin{aligned} \mathbf{s}_j^t \mathbf{C} \mathbf{s}_l &= 0 \quad \forall l = 0, \dots, j-1, \text{ y} \\ \mathbf{s}_j^t \mathbf{C} \mathbf{s}_j &> 0. \end{aligned}$$

Eligiendo \mathbf{s}_j paralela a alguna de las \mathbf{c}_{ij} con $\alpha_{ij} = 0$, por (1.3), cumplirá la primera condición necesaria. Sea \mathbf{c}_{kj} la columna elegida, tomamos \mathbf{s}_j paralela a esta de forma que se cumpla que $\mathbf{g}_j^t \mathbf{s}_j > 0$. Ahora, por ser f convexa, $\mathbf{s}_j^t \mathbf{C} \mathbf{s}_j \geq 0$.

■ Si $\mathbf{s}_j^t \mathbf{C} \mathbf{s}_j = 0$, entonces $f(\mathbf{x}_j - \sigma \mathbf{s}_j) = f(\mathbf{x}_j) - \sigma \mathbf{g}_j^t \mathbf{s}_j \xrightarrow{\sigma \rightarrow +\infty} -\infty$ y el problema es no acotado inferiormente.

■ Si $\mathbf{s}_j^t \mathbf{C} \mathbf{s}_j > 0$, entonces \mathbf{s}_j satisface las 2 condiciones necesarias para que $\mathbf{s}_0, \dots, \mathbf{s}_j$ siga siendo un conjunto de direcciones conjugadas, y por el teorema 1.5 a), $\mathbf{g}_{j+1}^t \mathbf{s}_l = 0 \quad \forall l = 0, \dots, j$ que, como antes, implica $\mathbf{g}_{j+1}^t \mathbf{c}_{ij} = 0 \quad \forall i \text{ con } \alpha_{ij} = -1$.

Además, como \mathbf{s}_j es paralelo a \mathbf{c}_{kj} , por (1.2) se cumple $\mathbf{g}_{j+1}^t \mathbf{c}_{kj} = 0$, y con esto hemos probado que (1.4) se sigue cumpliendo cuando reemplazamos j por $j+1$.

Una vez construida la nueva dirección de búsqueda continuaremos el proceso con la siguiente iteración incluyendo este nuevo índice en el conjunto de índices, asignando $\alpha_{k,j+1} = -1$.

1.2.3. Actualización de las matrices D_j^t y D_j^{-1}

Nos encontramos en la iteración j con las matrices D_j y D_j^{-1} descritas antes, donde las columnas \mathbf{c}_{ij} de D_j^{-1} con $\alpha_{ij} = -1$ son direcciones conjugadas normalizadas, y para estas se cumple que $\mathbf{d}_{ij} = \mathbf{C} \mathbf{c}_{ij}$.

Además, hemos construido una dirección conjugada adicional paralela a \mathbf{c}_{kj} . Si normalizamos esta última, tendremos que las \mathbf{c}_{ij} anteriores junto con $\hat{\mathbf{c}}_{kj} = \frac{1}{\sqrt{\mathbf{c}_{kj}^t \mathbf{C} \mathbf{c}_{kj}}} \mathbf{c}_{kj}$ forman un conjunto de $j+1$ direcciones conjugadas normalizadas.

Para la siguiente iteración del algoritmo reemplazaremos la columna \mathbf{c}_{kj} por la nueva dirección conjugada normalizada, $\hat{\mathbf{c}}_{kj}$, y para que se siga cumpliendo que $\mathbf{d}_{ij} = \mathbf{C}\mathbf{c}_{ij}$ para todas las columnas correspondientes a las direcciones conjugadas normalizadas, reemplazamos \mathbf{d}_{kj} por $\hat{\mathbf{d}}_{kj} = \frac{1}{\sqrt{\mathbf{c}_{kj}^t \mathbf{C} \mathbf{c}_{kj}}} \mathbf{C} \mathbf{c}_{kj}$.

Llamamos $\hat{D}_j^t = [\mathbf{d}_{1j} \mid \cdots \mid \mathbf{d}_{k-1,j} \mid \hat{\mathbf{d}}_{kj} \mid \mathbf{d}_{k+1,j} \mid \cdots \mid \mathbf{d}_{nj}]$ a esta nueva matriz.

Aplicamos el Método Φ (descrito en el Anexo B.1.1) para calcular $\hat{D}_j^{-1} = [\hat{\mathbf{c}}_{1j} \mid \cdots \mid \hat{\mathbf{c}}_{nj}]$ como $\Phi(D_j^{-1}, \hat{\mathbf{d}}_{kj}, k) \equiv \hat{D}_j^{-1}$.

En primer lugar, $\hat{\mathbf{d}}_{kj}^t \mathbf{c}_{kj} = \frac{1}{\sqrt{\mathbf{c}_{kj}^t \mathbf{C} \mathbf{c}_{kj}}} \mathbf{c}_{kj}^t \mathbf{C} \mathbf{c}_{kj} = \sqrt{\mathbf{c}_{kj}^t \mathbf{C} \mathbf{c}_{kj}} \neq 0$.

Ahora, por ser direcciones conjugadas, $\hat{\mathbf{d}}_{kj}^t \mathbf{c}_{ij} = \frac{1}{\sqrt{\mathbf{c}_{kj}^t \mathbf{C} \mathbf{c}_{kj}}} \mathbf{c}_{kj}^t \mathbf{C} \mathbf{c}_{ij} = 0 \quad \forall i \text{ con } \alpha_{ij} = -1$.

Con esto, se tiene la actualización de la matriz \hat{D}_j^{-1} de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{c}}_{ij} &= \mathbf{c}_{ij} - \frac{\hat{\mathbf{d}}_{kj}^t \mathbf{c}_{ij}}{\hat{\mathbf{d}}_{kj}^t \mathbf{c}_{kj}} \mathbf{c}_{kj} \quad \forall i \text{ con } i \neq k \text{ y } \alpha_{ij} \neq -1, \\ \hat{\mathbf{c}}_{kj} &= \frac{1}{\hat{\mathbf{d}}_{kj}^t \mathbf{c}_{kj}} \mathbf{c}_{kj}, \text{ y} \\ \hat{\mathbf{c}}_{ij} &= \mathbf{c}_{ij} \quad \forall i \text{ con } \alpha_{ij} = -1. \end{aligned}$$

Nota. Como consecuencia de utilizar direcciones conjugadas tenemos que las columnas de la matriz D_j^{-1} que son direcciones conjugadas normalizadas no cambian con la actualización. Sabiendo esto, podemos utilizar el Método Φ_1 (Anexo B.1.2) que implementa esto y resulta un ahorro computacional significativo.

Con esto ya tenemos definidas las matrices D_{j+1}^t y D_{j+1}^{-1} para la siguiente iteración con la misma estructura que las que teníamos en la iteración anterior con j reemplazado por $j+1$. Y así, con los desarrollos anteriores podemos establecer el siguiente lema que describe las dos propiedades fundamentales del algoritmo.

Lema 1.6. Sean \mathbf{x}_j , \mathbf{g}_j , $D_j^{-1} = [\mathbf{c}_{1j} \mid \cdots \mid \mathbf{c}_{nj}]$ y $J_j = \{ \alpha_{1j}, \dots, \alpha_{nj} \}$ obtenidos de la j -ésima iteración del Algoritmo 1. Sea $D_j^t = [\mathbf{d}_{1j} \mid \cdots \mid \mathbf{d}_{nj}]$, entonces:

a) $\mathbf{g}_j^t \mathbf{c}_{ij} = 0 \quad \forall i \text{ con } \alpha_{ij} = -1$.

b) $\mathbf{d}_{ij} = \mathbf{C} \mathbf{c}_{ij} \quad \forall i \text{ con } \alpha_{ij} = -1$.

1.2.4. Criterio de selección de la nueva dirección de búsqueda

A la hora de seleccionar la columna con $\alpha_{ij} = 0$ para generar la nueva dirección de búsqueda la mejor opción sería elegir \mathbf{s}_j paralela a \mathbf{c}_{ij} para la cual la reducción en f sea la mayor posible. Pero identificar el \mathbf{c}_{ij} que da la mayor reducción en f requeriría el cálculo del tamaño de paso óptimo y el nuevo punto correspondiente para cada posible dirección de búsqueda y esto puede ser muy caro computacionalmente.

Un criterio menos costoso es elegir el \mathbf{c}_{ij} que de la mejor tasa de disminución por unidad de variable.

De la serie de Taylor, $f(\mathbf{x}_j - \sigma \mathbf{s}_j) = f(\mathbf{x}_j) - \sigma \mathbf{g}_j^t \mathbf{s}_j + \frac{1}{2} \sigma^2 \mathbf{s}_j^t \mathbf{C} \mathbf{s}_j$, la tasa de disminución de f en $\sigma = 0$ es $[f_\sigma(\mathbf{x}_j - \sigma \mathbf{s}_j)]_{\sigma=0} = -\mathbf{g}_j^t \mathbf{s}_j$.

Por consiguiente, la regla de selección de la nueva dirección de búsqueda es calcular el k para el que

$$|\mathbf{g}_j^t \mathbf{c}_{kj}| = \max \{ |\mathbf{g}_j^t \mathbf{c}_{ij}| : \forall i \text{ con } \alpha_{ij} = 0 \}.$$

Y con el fin de satisfacer nuestro requisito de $\mathbf{g}_j^t \mathbf{s}_j > 0$, establecemos $\mathbf{s}_j = \begin{cases} \mathbf{c}_{kj} & \text{si } \mathbf{g}_j^t \mathbf{c}_{kj} > 0 \\ -\mathbf{c}_{kj} & \text{si } \mathbf{g}_j^t \mathbf{c}_{kj} < 0 \end{cases}$.

En adelante esta será la regla para construir la nueva dirección de búsqueda.

1.2.5. Formulación del algoritmo, teorema de convergencia y ejemplos

Comenzamos la sección reuniendo todos los elementos presentados en las secciones anteriores para formalizar el algoritmo de resolución.

ALGORITMO 1. Modelo de problema:

$$\begin{aligned} &\text{minimizar: } \mathbf{c}^t \mathbf{x} + \frac{1}{2} \mathbf{x}^t \mathbf{C} \mathbf{x} \\ &\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n. \end{aligned}$$

Inicialización:

Empezar con cualquier \mathbf{x}_0 , fijar $J_0 = \{0, \dots, 0\}$ y $D_0^{-1} = I_n$.

Calcular $f(\mathbf{x}_0) = \mathbf{c}^t \mathbf{x}_0 + \frac{1}{2} \mathbf{x}_0^t \mathbf{C} \mathbf{x}_0$, $\mathbf{g}_0 = \mathbf{c} + \mathbf{C} \mathbf{x}_0$ y fijar $j = 0$.

Paso 1: Cálculo de la dirección de búsqueda \mathbf{s}_j .

Sean $D_j^{-1} = [\mathbf{c}_{1j} \mid \dots \mid \mathbf{c}_{nj}]$ y $J_j = \{\alpha_{1j}, \dots, \alpha_{nj}\}$.

- Si $\alpha_{ij} \neq 0 \forall i = 1, \dots, n \implies$ STOP con solución óptima \mathbf{x}_j .
- Si $\exists i$ con $\alpha_{ij} = 0 \implies$ calcular el menor índice k tal que $|\mathbf{g}_j^t \mathbf{c}_{kj}| = \max \{ |\mathbf{g}_j^t \mathbf{c}_{ij}| : \forall i \text{ con } \alpha_{ij} = 0 \}$.
 - Si $\mathbf{g}_j^t \mathbf{c}_{kj} = 0 \implies$ STOP con solución óptima \mathbf{x}_j .
 - En otro caso, fijar $\mathbf{s}_j = \begin{cases} \mathbf{c}_{kj} & \text{si } \mathbf{g}_j^t \mathbf{c}_{kj} > 0 \\ -\mathbf{c}_{kj} & \text{si } \mathbf{g}_j^t \mathbf{c}_{kj} < 0 \end{cases}$ e ir al Paso 2.

Paso 2: Cálculo del tamaño de paso σ_j .

Calcular $\mathbf{s}_j^t \mathbf{C} \mathbf{s}_j$.

- Si $\mathbf{s}_j^t \mathbf{C} \mathbf{s}_j = 0 \implies$ STOP el problema es no acotado inferiormente.
- Si $\mathbf{s}_j^t \mathbf{C} \mathbf{s}_j > 0$, fijar $\sigma_j = \frac{\mathbf{g}_j^t \mathbf{s}_j}{\mathbf{s}_j^t \mathbf{C} \mathbf{s}_j}$ e ir al Paso 3.

Paso 3: Actualización.

Fijar $\mathbf{x}_{j+1} = \mathbf{x}_j - \sigma_j \mathbf{s}_j$.

Calcular $f(\mathbf{x}_{j+1}) = \mathbf{c}^t \mathbf{x}_{j+1} + \frac{1}{2} \mathbf{x}_{j+1}^t \mathbf{C} \mathbf{x}_{j+1}$ y $\mathbf{g}_{j+1} = \mathbf{c} + \mathbf{C} \mathbf{x}_{j+1}$.

- Si $\mathbf{g}_{j+1} = \mathbf{0} \implies$ STOP con solución óptima \mathbf{x}_{j+1} .³
- En otro caso, fijar $\mathbf{d}_j = \frac{1}{\sqrt{\mathbf{s}_j^t \mathbf{C} \mathbf{s}_j}} \mathbf{C} \mathbf{s}_j$, $D_{j+1}^{-1} = \Phi_1(D_j^{-1}, \mathbf{d}_j, k, J_j)$ y $J_{j+1} = \{\alpha_{1,j+1}, \dots, \alpha_{n,j+1}\}$, donde

$$\alpha_{i,j+1} = \begin{cases} \alpha_{ij} & \text{si } i = 1, \dots, n, i \neq k, \\ -1 & \text{si } i = k. \end{cases}$$

Reemplazar j por $j+1$ e ir al Paso 1.

Veamos que el algoritmo converge en $j \leq n$ iteraciones.

Teorema 1.7 (Convergencia del Algoritmo 1). *La finalización del algoritmo ocurre antes de $j \leq n$ iteraciones con una de las dos situaciones:*

a) \mathbf{x}_j es la solución óptima para el problema (1.1).

³Podemos añadir este nuevo criterio de parada, por ser condición suficiente de optimalidad, con el que nos ahorramos una iteración y la actualización de la matriz inversa correspondiente.

b) El problema es no acotado inferiormente. En este caso, el algoritmo termina con \mathbf{x}_j y \mathbf{s}_j tales que $f(\mathbf{x}_j - \sigma \mathbf{s}_j) \xrightarrow{\sigma \rightarrow +\infty} -\infty$.

Dem. a) Hay 3 puntos en el algoritmo en los cuales la finalización puede ocurrir con el mensaje " \mathbf{x}_j solución óptima obtenida". Probemos la optimalidad de \mathbf{x}_j en estos tres casos.

I) Si la finalización ocurre en la iteración n , tendremos $\alpha_{1n} = \dots = \alpha_{nn} = -1$ y, por el apartado a) del lema 1.6, $\mathbf{g}_n^t \mathbf{c}_{1n} = \dots = \mathbf{g}_n^t \mathbf{c}_{nn} = 0$, luego $\mathbf{g}_n^t D_n^{-1} = 0$. Como $D_n^{-1} = [\mathbf{c}_{1n} \mid \dots \mid \mathbf{c}_{nn}] \neq 0$, se tiene que $\mathbf{g}_n = \mathbf{0}$, que por el teorema 1.2 implica que \mathbf{x}_n es la solución óptima.

II) Supongamos ahora que la finalización ocurre con una solución óptima en alguna iteración $j < n$. Hay 2 puntos en los que puede ocurrir esto.

1) Si la finalización ocurre en el Paso 1, esto significa que $\mathbf{g}_j^t \mathbf{c}_{kj} = 0$, y la definición de k implica que $\mathbf{g}_j^t \mathbf{c}_{ij} = 0 \forall i$ con $\alpha_{ij} = 0$. Aplicando el lema A.6 a las matrices $D_j^t = [\mathbf{d}_{1j} \mid \dots \mid \mathbf{d}_{nj}]$, $D_j^{-1} = [\mathbf{c}_{1j} \mid \dots \mid \mathbf{c}_{nj}]$ y al vector \mathbf{g}_j , tenemos que

$$\mathbf{g}_j = \sum_{\alpha_{ij}=-1} (\mathbf{g}_j^t \mathbf{c}_{ij}) \mathbf{d}_{ij} + \sum_{\alpha_{ij}=0} (\mathbf{g}_j^t \mathbf{c}_{ij}) \mathbf{d}_{ij},$$

donde, por lo anterior, y por el apartado a) del lema 1.6, todos los coeficientes son 0, luego $\mathbf{g}_j = \mathbf{0}$, y, de nuevo, por el teorema 1.2, \mathbf{x}_j es la solución óptima.

2) Si la finalización ocurre en el Paso 3, en este caso el algoritmo acaba porque $\mathbf{g}_{j+1} = \mathbf{0}$, y por el teorema 1.2, es inmediato que \mathbf{x}_{j+1} es la solución óptima.

b) Por último, si la finalización ocurre con el mensaje de que el problema es no acotado inferiormente, entonces por el Paso 2, $\mathbf{s}_j^t \mathbf{C} \mathbf{s}_j = 0$, y como hemos probado en 1.2.2, el problema es no acotado. \square

Ilustramos el Algoritmo 1 aplicándolo en el ejemplo. Mostramos dos ejemplos más en el Anexo B.2.

Ejemplo 1.

$$\text{minimizar: } -3x_1 - x_2 + \frac{1}{2}(2x_1^2 + x_2^2 + 2x_1x_2)$$

$$\mathbf{c} = \begin{pmatrix} -3 \\ -1 \end{pmatrix} \text{ y } C = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

Inicialización: $\mathbf{x}_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$, $J_0 = \{0,0\}$, $D_0^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$, $f(\mathbf{x}_0) = 0$, $\mathbf{g}_0 = \begin{pmatrix} -3 \\ -1 \end{pmatrix}$, $j = 0$.

Iteración 0

Paso 1: $|\mathbf{g}_0^t \mathbf{c}_{k0}| = \max\{|-3|, |-1|\} = 3 \implies k = 1$.

Como $\mathbf{g}_0^t \mathbf{c}_{10} = -3 < 0 \implies \mathbf{s}_0 = -\mathbf{c}_{10} = (-1 \ 0)^t$.

Paso 2: $\mathbf{s}_0^t \mathbf{C} \mathbf{s}_0 = 2 > 0 \implies \sigma_0 = \frac{3}{2}$.

Paso 3: $\mathbf{x}_1 = \begin{pmatrix} 3/2 \\ 0 \end{pmatrix}$, $f(\mathbf{x}_1) = -\frac{9}{4}$, $\mathbf{g}_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1/2 \end{pmatrix}$, $\mathbf{d}_0 = \begin{pmatrix} -\sqrt{2} \\ -\sqrt{2}/2 \end{pmatrix}$, $D_1^{-1} = \begin{pmatrix} -\sqrt{2}/2 & -1/2 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$,

$J_1 = \{-1, 0\}$, $j = 1$.

Iteración 1

Paso 1: $|\mathbf{g}_1^t \mathbf{c}_{k1}| = \max\{|\frac{1}{2}|\} = \frac{1}{2} \implies k = 2$. Como $\mathbf{g}_1^t \mathbf{c}_{21} = \frac{1}{2} > 0 \implies \mathbf{s}_1 = \mathbf{c}_{21} = (-1/2 \ 1)^t$.

Paso 2: $\mathbf{s}_1^t \mathbf{C} \mathbf{s}_1 = \frac{1}{2} > 0 \implies \sigma_1 = 1$.

Paso 3: $\mathbf{x}_2 = (2 \ -1)^t$, $f(\mathbf{x}_2) = -\frac{5}{2}$, $\mathbf{g}_2 = \mathbf{0} \implies$ STOP con solución óptima \mathbf{x}_2 .

Si no hubiéramos añadido el STOP en el Paso 3 el algoritmo hubiera continuado de la siguiente manera:

Paso 3: $\mathbf{d}_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ \sqrt{2}/2 \end{pmatrix}$, $D_2^{-1} = \begin{pmatrix} -\sqrt{2}/2 & -\sqrt{2}/2 \\ 0 & \sqrt{2} \end{pmatrix}$, $J_2 = \{-1, -1\}$, $j = 2$.

Iteración 2

Paso 1: $\alpha_{i2} \neq 0 \forall i = 1, 2 \implies$ STOP con solución óptima \mathbf{x}_2 .

Capítulo 2

Problemas de Programación Cuadrática con Restricciones Lineales de Igualdad

2.1. Condiciones de optimalidad y existencia y unicidad de la solución

Consideramos el problema de minimización cuadrática sujeto a restricciones lineales de igualdad

$$\begin{aligned} \min f(\mathbf{x}) &= \mathbf{c}'\mathbf{x} + \frac{1}{2}\mathbf{x}'\mathbf{C}\mathbf{x} \\ \text{sujeto a: } \mathbf{A}\mathbf{x} &= \mathbf{b} \\ \mathbf{x} &\in \mathbb{R}^n, \end{aligned} \quad (2.1)$$

donde $A'_{n \times r} = [\mathbf{a}_1 \mid \cdots \mid \mathbf{a}_r]$ y $\mathbf{b} = (b_1 \ \cdots \ b_r)' \in \mathbb{R}^r$.

Definición 3. La *región factible* para el problema (2.1) es $R = \{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b} \}$.

Un punto \mathbf{x}_0 es *factible* para el problema (2.1) si $\mathbf{x}_0 \in R$ y es *no factible* en otro caso.

Definición 4. Un punto \mathbf{x}_0 es un *mínimo global* o una *solución óptima* (o, simplemente, *óptimo*) para el problema (2.1) si $\mathbf{x}_0 \in R$ y $f(\mathbf{x}_0) \leq f(\mathbf{x}) \ \forall \mathbf{x} \in R$.

Definición 5. La función objetivo para el problema (2.1) es *no acotada inferiormente* sobre su región factible (o el problema es *no acotado inferiormente*) si $\exists \mathbf{x}_0, \mathbf{s}_0 \in \mathbb{R}^n$ tales que $\mathbf{A}\mathbf{x}_0 = \mathbf{b}$, $\mathbf{A}\mathbf{s}_0 = \mathbf{0}$ y $f(\mathbf{x}_0 - \sigma\mathbf{s}_0) \xrightarrow{\sigma \rightarrow +\infty} -\infty$.

Teorema 2.1 (Condiciones necesarias y suficientes de optimalidad). *Sea $f(\mathbf{x}) = \mathbf{c}'\mathbf{x} + \frac{1}{2}\mathbf{x}'\mathbf{C}\mathbf{x}$ una función convexa. Entonces, \mathbf{x}_0 es una solución óptima para el problema (2.1) $\iff \mathbf{A}\mathbf{x}_0 = \mathbf{b}$ y existe un $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^r$ con $-g(\mathbf{x}_0) = A'\mathbf{u}$.*

Dem. Sea \mathbf{x}_0 una solución óptima. Del teorema A.5, $g(\mathbf{x}_0) = \mathbf{c} + \mathbf{C}\mathbf{x}_0$ puede escribirse como $g(\mathbf{x}_0) = \mathbf{h}_1 + \mathbf{h}_2$, donde $\mathbf{h}_1 \in \langle \mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_r \rangle$ y \mathbf{h}_2 es ortogonal a $\langle \mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_r \rangle$, es decir, $\mathbf{A}\mathbf{h}_2 = \mathbf{0}$ y podemos escribir \mathbf{h}_1 como $\mathbf{h}_1 = -A'\mathbf{u}$ para algún $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^r$. Entonces $g(\mathbf{x}_0)' \mathbf{h}_2 = \mathbf{h}_1' \mathbf{h}_2 + \mathbf{h}_2' \mathbf{h}_2 = -\mathbf{u}' \mathbf{A}\mathbf{h}_2 + \mathbf{h}_2' \mathbf{h}_2 = \mathbf{h}_2' \mathbf{h}_2$.

Notar que, para cualquier $\sigma \in \mathbb{R}$, se cumple que $\mathbf{A}(\mathbf{x}_0 - \sigma\mathbf{h}_2) = \mathbf{A}\mathbf{x}_0 = \mathbf{b}$, luego $\mathbf{x}_0 - \sigma\mathbf{h}_2 \in R \ \forall \sigma \in \mathbb{R}$.

Como \mathbf{x}_0 es óptimo, $f(\mathbf{x}_0 - \sigma\mathbf{h}_2)$ debe ser mínima cuando $\sigma = 0$, es decir, $f_\sigma(\mathbf{x}_0 - \sigma\mathbf{h}_2) = 0$ para $\sigma = 0$. La serie de Taylor de f entorno a \mathbf{x}_0 es $f(\mathbf{x}_0 - \sigma\mathbf{h}_2) = f(\mathbf{x}_0) - \sigma g(\mathbf{x}_0)' \mathbf{h}_2 + \frac{1}{2} \sigma^2 \mathbf{h}_2' \mathbf{C} \mathbf{h}_2$.

Así, $f_\sigma(\mathbf{x}_0 - \sigma\mathbf{h}_2) = -g(\mathbf{x}_0)' \mathbf{h}_2 + \mathbf{h}_2' \mathbf{C} \mathbf{h}_2 \sigma$, y por ser \mathbf{x}_0 mínimo global ($\sigma = 0$) se tiene $-g(\mathbf{x}_0)' \mathbf{h}_2 = 0 \implies g(\mathbf{x}_0)' \mathbf{h}_2 = 0$. Pero como $g(\mathbf{x}_0)' \mathbf{h}_2 = \mathbf{h}_2' \mathbf{h}_2$ es la suma de cuadrados de las componentes de \mathbf{h}_2 , se tiene que $\mathbf{h}_2 = \mathbf{0}$, y así, $g(\mathbf{x}_0) = \mathbf{h}_1 = -A'\mathbf{u}$, o equivalentemente, $-g(\mathbf{x}_0) = A'\mathbf{u}$.

Recíprocamente, sea $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^n$ tal que $\mathbf{A}\mathbf{x}_0 = \mathbf{b}$ y $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^r$ cumpliendo $-g(\mathbf{x}_0) = A'\mathbf{u}$. Sea $\mathbf{x} \in R$ cualquiera. Como $\mathbf{A}\mathbf{x}_0 = \mathbf{b}$ y $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$, restando obtenemos $\mathbf{A}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) = \mathbf{0}$.

La serie de Taylor de f entorno a \mathbf{x}_0 es $f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}_0) + g(\mathbf{x}_0)'(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) + \frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)' \mathbf{C}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)$. Como $-g(\mathbf{x}_0) = A'\mathbf{u}$, se tiene $g(\mathbf{x}_0)'(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) = -\mathbf{u}' \mathbf{A}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) = \mathbf{0}$. Sustituyendo en el desarrollo de Taylor, $f(\mathbf{x}) - f(\mathbf{x}_0) = \frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)' \mathbf{C}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)$, y por ser f convexa, $(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)' \mathbf{C}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \geq 0 \ \forall \mathbf{x} \in R$, luego $f(\mathbf{x}) \geq f(\mathbf{x}_0) \ \forall \mathbf{x} \in R$, y por tanto \mathbf{x}_0 es la solución óptima. \square

Definición 6. Cada u_i de $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^r$ se llama *multiplicador asociado a la restricción i* , $i = 1, \dots, r$.

Teorema 2.2 (Unicidad de la solución). *Sea \mathbf{x}_0 una solución óptima para el problema (2.1). Si f es estrictamente convexa $\implies \mathbf{x}_0$ es la única solución óptima.*

Teorema 2.3 (Existencia de la solución). *Si $\exists \gamma \in \mathbb{R}$ tal que $f(\mathbf{x}) = \mathbf{c}^t \mathbf{x} + \frac{1}{2} \mathbf{x}^t \mathbf{C} \mathbf{x} \geq \gamma \quad \forall \mathbf{x} \in R$ y $R \neq \emptyset \implies$ existe una solución óptima para el problema (2.1).*

Las demostraciones de estos dos últimos teoremas siguen ideas similares a las de sus homólogos para el problema sin restricciones y están desarrolladas en el Anexo C.1.

2.2. Algoritmo 2

Vamos a adaptar el Algoritmo 1 para la solución del problema (2.1) con restricciones lineales de igualdad. Como antes, asumimos que la función objetivo es convexa. Asumimos también que $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_r$ son linealmente independientes y que conocemos un punto factible para (2.1).

Sea \mathbf{x}_0 un punto factible para (2.1). De manera análoga al Algoritmo 1 queremos construir una secuencia finita de puntos $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots$ de la forma $\mathbf{x}_{j+1} = \mathbf{x}_j - \sigma \mathbf{s}_j$.

Supongamos que $\mathbf{x}_j \in R$, entonces para cualquier restricción i , $\mathbf{a}_i^t \mathbf{x}_j = b_i$. De esta forma, $\mathbf{a}_i^t \mathbf{x}_{j+1} = \mathbf{a}_i^t \mathbf{x}_j - \sigma \mathbf{a}_i^t \mathbf{s}_j = b_i \iff \mathbf{a}_i^t \mathbf{s}_j = 0$, es decir, \mathbf{x}_{j+1} cumplirá la restricción i -ésima siempre que $\mathbf{a}_i^t \mathbf{s}_j = 0$.

Por lo tanto, cada uno de los $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots$ será un punto factible siempre que

$$\mathbf{a}_i^t \mathbf{s}_j = 0, \quad \forall i = 1, \dots, r, \quad (2.2)$$

para $j = 0, 1, \dots$. Notemos que esta es la condición equivalente a (1.2) dada en el Algoritmo 1.

2.2.1. Cálculo de la dirección de búsqueda \mathbf{s}_j y definición de las matrices D_j^t y D_j^{-1}

Definimos primero las matrices D_0^t y D_0^{-1} , correspondientes a la inicialización del algoritmo, de manera análoga a las definidas para el Algoritmo 1 incorporando las restricciones de igualdad en estas, y veamos qué modificaciones tenemos que hacer en el Algoritmo 1 para poder aplicarlo al problema (2.1).

Así pues, sea la matriz D_0^t una matriz no singular cuyas r primeras columnas son $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_r$ y sean $\mathbf{d}_{r+1}, \dots, \mathbf{d}_n$ las columnas restantes. Denotamos con $\mathbf{c}_1, \dots, \mathbf{c}_n$ a las columnas de D_0^{-1} .

Como $D_0 D_0^{-1} = I_n$, se cumple que $\mathbf{a}_i^t \mathbf{c}_j = 0 \quad \forall i = 1, \dots, r$ y $\forall j = r+1, \dots, n$. Así que, si elegimos \mathbf{s}_0 paralela a cualquiera de las $\mathbf{c}_{r+1}, \dots, \mathbf{c}_n$ cumplirá que $\mathbf{a}_i^t \mathbf{s}_0 = 0, \quad \forall i = 1, \dots, r$, es decir, se cumple (2.2) para $j = 0$, y por tanto, \mathbf{x}_1 será un punto factible. De este modo, todas las $\mathbf{c}_{r+1}, \dots, \mathbf{c}_n$ serán las candidatas para construir la siguiente dirección de búsqueda y podemos eliminar las r primeras columnas de D_0^{-1} para la elección de esta.

Supongamos ahora que estamos en una iteración j general del algoritmo, en la que tenemos j direcciones conjugadas, $\mathbf{s}_0, \dots, \mathbf{s}_{j-1}$, de las iteraciones previas.

Podemos definir las matrices D_j^t y D_j^{-1} del mismo modo que las definidas para el Algoritmo 1 con la diferencia de que las primeras r filas de D_j^t corresponden a los gradientes de las r restricciones de igualdad, e incorporamos esta información en el conjunto de índices de la siguiente manera; definimos $J_j = \{\alpha_{1j}, \dots, \alpha_{nj}\}$ con $\alpha_{ij} = k$ si la fila i de D_j^t es \mathbf{a}_k , y el resto, como antes, para $i = r+1, \dots, n$, $\alpha_{ij} = -1$ si \mathbf{c}_{ij} es paralela a alguna de las direcciones conjugadas $\mathbf{s}_0, \dots, \mathbf{s}_{j-1}$ y $\alpha_{ij} = 0$ en caso contrario, siendo \mathbf{c}_{ij} las columnas de D_j^{-1} . De esta manera, si denotamos con \mathbf{d}_{ij}^t la fila i -ésima de la matriz D_j , para cada i con $\alpha_{ij} = -1$, \mathbf{c}_{ij} se define como $\mathbf{c}_{ij} = \frac{1}{\sqrt{\mathbf{s}_i^t \mathbf{C} \mathbf{s}_i}} \mathbf{s}_i$, para $l = 0, \dots, j-1$, y las columnas asociadas en D_j como $\mathbf{d}_{ij} = \mathbf{C} \mathbf{c}_{ij}$.

Definidas así, si elegimos \mathbf{s}_j paralela a alguna \mathbf{c}_{kj} con $\alpha_{kj} = 0$, se sigue que (2.2) se satisface en cada iteración. En consecuencia, cada uno de los \mathbf{x}_j es factible, para $j = 1, 2, \dots$, y podemos tomar la siguiente adaptación del Algoritmo 1 para resolver el problema con restricciones de igualdad.

2.2.2. Formulación del algoritmo, teorema de convergencia y ejemplos

ALGORITMO 2. Modelo de problema:

$$\begin{aligned} &\text{minimizar: } \mathbf{c}^t \mathbf{x} + \frac{1}{2} \mathbf{x}^t \mathbf{C} \mathbf{x} \\ &\text{sujeto a: } \mathbf{a}_i^t \mathbf{x} = b_i, \quad i = 1, \dots, r \\ &\quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n. \end{aligned}$$

Inicialización:

Empezar con cualquier \mathbf{x}_0 factible.

Fijar D_0^{-1} , donde $D_0^t = [\mathbf{d}_1 \mid \dots \mid \mathbf{d}_n]$ no singular y $\mathbf{d}_i = \mathbf{a}_k \forall k = 1, \dots, r$ y cualesquiera $i = 1, \dots, n$.

Fijar $J_0 = \{\alpha_{10}, \dots, \alpha_{n0}\}$ con $\alpha_{i0} = k$ si $\mathbf{d}_i = \mathbf{a}_k$ y $\alpha_{i0} = 0$ en caso contrario.

Calcular $f(\mathbf{x}_0) = \mathbf{c}^t \mathbf{x}_0 + \frac{1}{2} \mathbf{x}_0^t \mathbf{C} \mathbf{x}_0$, $\mathbf{g}_0 = \mathbf{c} + \mathbf{C} \mathbf{x}_0$ y fijar $j = 0$.

Paso 1: Cálculo de la dirección de búsqueda \mathbf{s}_j .

Igual que el Paso 1 del Algoritmo 1.

Paso 2: Cálculo del tamaño de paso σ_j .

Igual que el Paso 2 del Algoritmo 1.

Paso 3: Actualización.¹

Fijar $\mathbf{x}_{j+1} = \mathbf{x}_j - \sigma_j \mathbf{s}_j$.

Calcular $f(\mathbf{x}_{j+1}) = \mathbf{c}^t \mathbf{x}_{j+1} + \frac{1}{2} \mathbf{x}_{j+1}^t \mathbf{C} \mathbf{x}_{j+1}$ y $\mathbf{g}_{j+1} = \mathbf{c} + \mathbf{C} \mathbf{x}_{j+1}$.

Fijar $\mathbf{d}_j = \frac{1}{\sqrt{\mathbf{s}_j^t \mathbf{C} \mathbf{s}_j}} \mathbf{C} \mathbf{s}_j$, $D_{j+1}^{-1} = \Phi_1(D_j^{-1}, \mathbf{d}_j, k, J_j)$ y $J_{j+1} = \{\alpha_{1,j+1}, \dots, \alpha_{n,j+1}\}$, donde

$$\alpha_{i,j+1} = \begin{cases} \alpha_{ij} & \text{si } i = 1, \dots, n, i \neq k, \\ -1 & \text{si } i = k. \end{cases}$$

Reemplazar j por $j + 1$ e ir al Paso 1.

Teorema 2.4 (Convergencia del Algoritmo 2). *La finalización del algoritmo ocurre antes de $j \leq n - r$ iteraciones con una de las dos situaciones:*

- \mathbf{x}_j es la solución óptima para el problema (2.1). En este caso, los multiplicadores de las restricciones están dados por $u_{\alpha_{ij}} = -\mathbf{g}_j^t \mathbf{c}_{ij} \forall i$ con $1 \leq \alpha_{ij} \leq r$.
- El problema es no acotado inferiormente. En este caso, el algoritmo termina con \mathbf{x}_j y \mathbf{s}_j tales que $A(\mathbf{x}_j - \sigma \mathbf{s}_j) = \mathbf{b} \forall \sigma \geq 0$ y $f(\mathbf{x}_j - \sigma \mathbf{s}_j) \xrightarrow{\sigma \rightarrow +\infty} -\infty$.

Dem. La demostración comparte ideas con la del teorema 1.7 por tanto se ha enviado al Anexo C.2. \square

Al igual que en el capítulo anterior a continuación se muestra la resolución de un Problema de Programación Cuadrática con restricciones de igualdad. En este caso sólo se muestra la resolución de un problema ya que el funcionamiento del Algoritmo 2 es análogo al del Algoritmo 1 excepto por la fase de inicialización.

Ejemplo 2.

$$\begin{aligned} &\text{minimizar: } x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + x_4^2 \\ &\text{sujeto a: } x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 1 \\ &\quad x_1 - x_2 - x_3 - x_4 = 0 \end{aligned}$$

$$\mathbf{c} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad \mathbf{C} = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

¹Igual que el Paso 3 del Algoritmo 1 pero eliminando el STOP que habíamos añadido por condición suficiente.

$$\text{Inicialización: } \mathbf{x}_0 = \begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, D_0 = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, D_0^{-1} = \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 & 0 & 0 \\ 1/2 & -1/2 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$J_0 = \{1, 2, 0, 0\}, f(\mathbf{x}_0) = \frac{1}{2}, \mathbf{g}_0 = (1 \ 1 \ 0 \ 0)^t, j = 0.$$

Iteración 0

$$\text{Paso 1: } |\mathbf{g}_0^t \mathbf{c}_{k0}| = \max \{|\mathbf{g}_0^t \mathbf{c}_{30}|, |\mathbf{g}_0^t \mathbf{c}_{40}|\} = \max \{|-1|, |-1|\} = 1 \implies k = 3.$$

$$\text{Como } \mathbf{g}_0^t \mathbf{c}_{30} = -1 < 0 \implies \mathbf{s}_0 = -\mathbf{c}_{30} = (0 \ 1 \ -1 \ 0)^t.$$

$$\text{Paso 2: } \mathbf{s}_0^t \mathbf{C} \mathbf{s}_0 = 4 > 0 \implies \sigma_0 = \frac{1}{4}.$$

$$\text{Paso 3: } \mathbf{x}_1 = \begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/4 \\ 1/4 \\ 0 \end{pmatrix}, f(\mathbf{x}_1) = \frac{3}{8}, \mathbf{g}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1/2 \\ 1/2 \\ 0 \end{pmatrix}, \mathbf{d}_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$D_1^{-1} = \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 & 0 & 0 \\ 1/4 & -1/4 & 1/2 & -1/2 \\ 1/4 & -1/4 & -1/2 & -1/2 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, J_1 = \{1, 2, -1, 0\}, j = 1.$$

Iteración 1

$$\text{Paso 1: } |\mathbf{g}_1^t \mathbf{c}_{k1}| = \max \{|\mathbf{g}_1^t \mathbf{c}_{41}|\} = \max \{|-\frac{1}{2}|\} = \frac{1}{2} \implies k = 4.$$

$$\text{Como } \mathbf{g}_1^t \mathbf{c}_{41} = -\frac{1}{2} < 0 \implies \mathbf{s}_1 = -\mathbf{c}_{41} = (0 \ 1/2 \ 1/2 \ -1)^t.$$

$$\text{Paso 2: } \mathbf{s}_1^t \mathbf{C} \mathbf{s}_1 = 3 > 0 \implies \sigma_1 = \frac{1}{6}.$$

$$\text{Paso 3: } \mathbf{x}_2 = \begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/6 \\ 1/6 \\ 1/6 \end{pmatrix}, f(\mathbf{x}_2) = \frac{1}{3}, \mathbf{g}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1/3 \\ 1/3 \\ 1/3 \end{pmatrix}, \mathbf{d}_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ \sqrt{3}/3 \\ \sqrt{3}/3 \\ -2\sqrt{3}/3 \end{pmatrix},$$

$$D_2^{-1} = \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 & 0 & 0 \\ 1/6 & -1/6 & 1/2 & \sqrt{3}/6 \\ 1/6 & -1/6 & -1/2 & \sqrt{3}/6 \\ 1/6 & -1/6 & 0 & -\sqrt{3}/3 \end{pmatrix}, J_2 = \{1, 2, -1, -1\}, j = 2.$$

Iteración 2

$$\text{Paso 1: } \alpha_{i2} \neq 0 \ \forall i = 1, 2, 3, 4 \implies \text{STOP con solución óptima } \mathbf{x}_2 = (1/2 \ 1/6 \ 1/6 \ 1/6)^t.$$

Nota. El teorema 2.4 da una fórmula explícita para obtener los multiplicadores de las restricciones para los datos finales del Algoritmo 2. El ejemplo anterior termina con solución óptima en $j = 2$. De los datos finales y el teorema 2.4 obtenemos los multiplicadores asociados a las dos restricciones:

$$u_1 = -\mathbf{g}_2^t \mathbf{c}_{12} = -\frac{2}{3},$$

$$u_2 = -\mathbf{g}_2^t \mathbf{c}_{22} = \frac{1}{3}.$$

Capítulo 3

Problemas de Programación Cuadrática con Restricciones Lineales de Igualdad y Desigualdad

En este Capítulo consideraremos Problemas de Programación Cuadrática en los que aparecen restricciones modeladas mediante desigualdades lineales. Además, asumiremos a lo largo del Capítulo que la función objetivo de cada problema de minimización cuadrática es convexa, a menos que se indique lo contrario. Notemos que esto es equivalente a asumir que la matriz Hessiana de la función objetivo es semidefinida positiva.

El desarrollo del Capítulo es similar a los dos anteriores, en primer lugar daremos el teorema de existencia de la solución, seguidamente demostramos las condiciones de optimalidad para el problema con restricciones de desigualdad para deducir después las condiciones de optimalidad para el problema con restricciones de igualdad y desigualdad, y por último presentamos un algoritmo de resolución con un ejemplo de aplicación de este.

En este caso, los resultados correspondientes a la unicidad de soluciones, como no afectan al funcionamiento del algoritmo, se encuentran desarrollados en el Anexo D.2.

3.1. Condiciones de optimalidad y existencia de la solución

Consideramos el modelo de problema

$$\begin{aligned} \min f(\mathbf{x}) &= \mathbf{c}^t \mathbf{x} + \frac{1}{2} \mathbf{x}^t \mathbf{C} \mathbf{x} \\ \text{sueto a: } \mathbf{a}_i^t \mathbf{x} &\leq b_i, \quad i = 1, \dots, m \\ \mathbf{x} &\in \mathbb{R}^n, \end{aligned} \tag{3.1}$$

donde $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_m \in \mathbb{R}^n$ y $b_1, \dots, b_m \in \mathbb{R}$. Así, nuestro problema tiene n variables y m restricciones de desigualdad.

Definición 7. La *región factible* para el problema (3.1) es $R = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{A}\mathbf{x} \leq \mathbf{b}\}$.

Definición 8. La restricción i -ésima es *inactiva*, *activa* ó *violada* en \mathbf{x}_0 si $\mathbf{a}_i^t \mathbf{x}_0 < b_i$, $\mathbf{a}_i^t \mathbf{x}_0 = b_i$ ó $\mathbf{a}_i^t \mathbf{x}_0 > b_i$ respectivamente.

Definición 9. El problema (3.1) es *no acotado inferiormente* si $\exists \mathbf{x}_0, \mathbf{s}_0 \in \mathbb{R}^n$ tales que $\mathbf{x}_0 - \sigma \mathbf{s}_0 \in R \forall \sigma \geq 0$ y $f(\mathbf{x}_0 - \sigma \mathbf{s}_0) \xrightarrow{\sigma \rightarrow +\infty} -\infty$.

Definición 10. Sea $\mathbf{x}_0 \in R$, definimos el conjunto de índices de las restricciones activas en \mathbf{x}_0 ,

$$I(\mathbf{x}_0) = \{i \mid \mathbf{a}_i^t \mathbf{x}_0 = b_i, 1 \leq i \leq m\}.$$

Un punto \mathbf{x}_0 es un *punto cuasiestacionario* para el problema (3.1) si $\mathbf{x}_0 \in R$ y \mathbf{x}_0 es la solución óptima para el problema

$$\begin{aligned} \min f(\mathbf{x}) &= \mathbf{c}^t \mathbf{x} + \frac{1}{2} \mathbf{x}^t \mathbf{C} \mathbf{x} \\ \text{sujeto a: } \mathbf{a}_i^t \mathbf{x} &= b_i, \quad i \in I(\mathbf{x}_0) \\ \mathbf{x} &\in \mathbb{R}^n. \end{aligned} \quad (3.2)$$

Observación. Un punto extremo de R es un punto cuasiestacionario para el problema (3.1), ya que la región factible para el problema (3.2) es precisamente el punto \mathbf{x}_0 , que entonces es necesariamente el óptimo de este problema. Una solución óptima para el problema (3.1) es también un punto cuasiestacionario.

Definición 11. Sean $\mathbf{x}_0 \in R$ y $\mathbf{0} \neq \mathbf{s}_0 \in \mathbb{R}^n$, el mayor valor de $\sigma \in \mathbb{R}$ para el que $\mathbf{x}_0 - \sigma \mathbf{s}_0 \in R$ se llama *tamaño de paso factible máximo* y se denota por σ_0 .

Veamos cómo se calcula, para que $\mathbf{x}_0 - \sigma \mathbf{s}_0 \in R$ se tiene que cumplir que $\mathbf{a}_i^t(\mathbf{x}_0 - \sigma \mathbf{s}_0) \leq b_i \quad \forall i = 1, \dots, m$, que es equivalente a $\mathbf{a}_i^t \mathbf{x}_0 - \sigma \mathbf{a}_i^t \mathbf{s}_0 \leq b_i \quad \forall i = 1, \dots, m$.

- Si $\mathbf{a}_i^t \mathbf{s}_0 \geq 0$, entonces $\mathbf{x}_0 - \sigma \mathbf{s}_0 \in R \quad \forall \sigma \geq 0$ y podemos tomar $\sigma_0 = +\infty$ con lo que el problema es no acotado.
- Si $\mathbf{a}_i^t \mathbf{s}_0 < 0$, dividiendo por esta cantidad en la última desigualdad obtenemos $\frac{\mathbf{a}_i^t \mathbf{x}_0}{\mathbf{a}_i^t \mathbf{s}_0} - \sigma \geq \frac{b_i}{\mathbf{a}_i^t \mathbf{s}_0}$, que es equivalente a $\sigma \leq \frac{\mathbf{a}_i^t \mathbf{x}_0 - b_i}{\mathbf{a}_i^t \mathbf{s}_0}$, con lo que definimos el tamaño de paso factible máximo $\forall i = 1, \dots, m$ con $\mathbf{a}_i^t \mathbf{s}_0 < 0$ como

$$\sigma_0 = \min \left\{ \frac{\mathbf{a}_i^t \mathbf{x}_0 - b_i}{\mathbf{a}_i^t \mathbf{s}_0} \mid i = 1, \dots, m \text{ con } \mathbf{a}_i^t \mathbf{s}_0 < 0 \right\}.$$

Nota. Si $\sigma_0 < +\infty$, y sea l el menor índice para el que $\sigma_0 = \frac{\mathbf{a}_l^t \mathbf{x}_0 - b_l}{\mathbf{a}_l^t \mathbf{s}_0}$, se tiene que la restricción l se vuelve activa en $\mathbf{x}_0 - \sigma_0 \mathbf{s}_0$.

Definición 12. Sea \mathbf{x}_0 un punto cuasiestacionario para el problema (3.1), definimos el *conjunto cuasiestacionario* asociado a \mathbf{x}_0 como el conjunto de las diferentes soluciones óptimas para el problema (3.2), es decir,

$$S(\mathbf{x}_0) = \{ \mathbf{x} \mid \mathbf{a}_i^t \mathbf{x} = b_i \quad \forall i \in I(\mathbf{x}_0), f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}_0) \}.$$

Teorema 3.1 (Existencia de la solución). Si $\exists \gamma \in \mathbb{R}$ tal que $f(\mathbf{x}) \geq \gamma \quad \forall \mathbf{x} \in R \implies$ existe una solución óptima $\tilde{\mathbf{x}}$ para el problema (3.1) y $\tilde{\mathbf{x}}$ es un punto cuasiestacionario.

Dem. La demostración se encuentra en el Anexo D.1 junto con los resultados previos utilizados en esta. □

Teorema 3.2 (Condiciones necesarias y suficientes de optimalidad). \mathbf{x}_0 es una solución óptima para el problema (3.1) si y solo si

- a) $\mathbf{a}_i^t \mathbf{x}_0 \leq b_i, \quad \forall i = 1, \dots, m,$
- b) $-g(\mathbf{x}_0) = u_1 \mathbf{a}_1 + \dots + u_m \mathbf{a}_m; \quad u_i \geq 0, \quad \forall i = 1, \dots, m,$
- c) $u_i(\mathbf{a}_i^t \mathbf{x}_0 - b_i) = 0, \quad \forall i = 1, \dots, m.$

Dem. Supongamos primero que \mathbf{x}_0 es óptimo. Sea $\mathbf{s} \in \mathbb{R}^n$ cualquiera tal que $\mathbf{a}_i^t \mathbf{s} \geq 0 \quad \forall i \in I(\mathbf{x}_0)$. Consideremos el punto $\mathbf{x}_0 - \sigma \mathbf{s}$, donde $\sigma \geq 0$.

Para $i \in I(\mathbf{x}_0)$, $\mathbf{a}_i^t(\mathbf{x}_0 - \sigma \mathbf{s}) = b_i - \sigma \mathbf{a}_i^t \mathbf{s} \leq b_i$, luego $\mathbf{x}_0 - \sigma \mathbf{s}$ satisface todas las restricciones $i \in I(\mathbf{x}_0) \quad \forall \sigma \geq 0$. Como el resto de restricciones son inactivas en \mathbf{x}_0 , $\exists \hat{\sigma} > 0$ tal que $\mathbf{x}_0 - \sigma \mathbf{s} \in R \quad \forall \sigma \in [0, \hat{\sigma}]$.

Como $f(\mathbf{x}_0 - \sigma \mathbf{s})$ es una función convexa en $\sigma \in [0, \hat{\sigma}]$ que tiene el mínimo en $\sigma = 0$, por el lema A.3 a), $f(\mathbf{x}_0 - \sigma \mathbf{s})$ es no decreciente para $0 \leq \sigma \leq \hat{\sigma}$.

Por lo tanto $f(\mathbf{x}_0 - \sigma \mathbf{s})$ debe ser no decreciente en σ para σ pequeño y positivo, esto es que $f_\sigma(\mathbf{x}_0 - \sigma \mathbf{s})$ evaluada en $\sigma = 0$ debe ser no negativa. La serie de Taylor de f entorno a \mathbf{x}_0 es $f(\mathbf{x}_0 - \sigma \mathbf{s}) = f(\mathbf{x}_0) - \sigma g(\mathbf{x}_0)^t \mathbf{s} + \frac{1}{2} \sigma^2 \mathbf{s}^t C \mathbf{s}$, luego $f_\sigma(\mathbf{x}_0 - \sigma \mathbf{s}) = -g(\mathbf{x}_0)^t \mathbf{s} + \sigma \mathbf{s}^t C \mathbf{s}$, evaluada en $\sigma = 0$, se tiene $-g(\mathbf{x}_0)^t \mathbf{s} \geq 0$ y hemos probado que

$$\mathbf{a}_i^t \mathbf{s} \geq 0 \quad \forall i \in I(\mathbf{x}_0) \text{ implica que } -g(\mathbf{x}_0)^t \mathbf{s} \geq 0. \quad (3.3)$$

Consideremos ahora el Problema de Programación Lineal

$$\begin{aligned} \min f(\mathbf{s}) &= -g(\mathbf{x}_0)^t \mathbf{s} \\ \text{sujeto a: } &-\mathbf{a}_i^t \mathbf{s} \leq 0, \quad i \in I(\mathbf{x}_0). \end{aligned}$$

Se sigue de (3.3) que el valor de la función objetivo para el problema anterior no puede ser < 0 . Además, esta cota se consigue para $\mathbf{s} = \mathbf{0}$, y en consecuencia, esta es la solución óptima para el problema. Por el Teorema de Dualidad Fuerte de Programación Lineal [9], existe una solución óptima para el problema dual

$$\begin{aligned} \max f(\mathbf{u}) &= \mathbf{0} \mathbf{u} \\ \text{sujeto a: } &-\sum_{i \in I(\mathbf{x}_0)} u_i \mathbf{a}_i = g(\mathbf{x}_0) \\ &u_i \geq 0, \quad i \in I(\mathbf{x}_0). \end{aligned}$$

Definiendo $u_i = 0 \quad \forall i \notin I(\mathbf{x}_0)$ hemos probado que se satisfacen las 3 condiciones del enunciado.

Recíprocamente, supongamos que \mathbf{x}_0 satisface las 3 condiciones establecidas.

Sea $\mathbf{x} \in R$ cualquiera. Multiplicando la segunda condición por $\mathbf{x} - \mathbf{x}_0$ obtenemos

$$g(\mathbf{x}_0)^t (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) = - \sum_{i \in I(\mathbf{x}_0)} (u_i \mathbf{a}_i^t \mathbf{x} - u_i \mathbf{a}_i^t \mathbf{x}_0).$$

La tercera condición establece que $u_i \mathbf{a}_i^t \mathbf{x}_0 = u_i b_i \quad \forall i \in I(\mathbf{x}_0)$, por lo tanto

$$g(\mathbf{x}_0)^t (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) = \sum_{i \in I(\mathbf{x}_0)} u_i (b_i - \mathbf{a}_i^t \mathbf{x}).$$

Como $\mathbf{x} \in R$ y cada $u_i \geq 0$, cada término de la suma es no negativo, así que $g(\mathbf{x}_0)^t (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \geq 0$.

La serie de Taylor de f entorno a \mathbf{x}_0 es $f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}_0) + g(\mathbf{x}_0)^t (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) + \frac{1}{2} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)^t C (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)$. Como f es convexa, $(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)^t C (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \geq 0$, que con lo anterior implica que $f(\mathbf{x}) \geq f(\mathbf{x}_0) \quad \forall \mathbf{x} \in R$, y por tanto \mathbf{x}_0 es la solución óptima. \square

La segunda condición asocia un multiplicador u_i no negativo con cada restricción, y la tercera condición fuerza a los multiplicadores asociados con restricciones inactivas a tener valor 0. Así, la segunda condición expresa $-g(\mathbf{x}_0)$ como una combinación lineal no negativa de los gradientes de las restricciones activas. Las condiciones del apartado c) reciben el nombre de *condiciones de holgura complementaria*.

Observación. Las condiciones del teorema 3.2 pueden reescribirse matricialmente como

- a) $A \mathbf{x}_0 \leq \mathbf{b}$,
- b) $-g(\mathbf{x}_0) = A^t \mathbf{u}$, $\mathbf{u} \geq \mathbf{0}$,
- c) $\mathbf{u}^t (A \mathbf{x}_0 - \mathbf{b}) = 0$.

Consideramos el modelo de problema con restricciones explícitas de igualdad y desigualdad un poco más general, que es para el que se desarrollará el algoritmo.

$$\begin{aligned} \min f(\mathbf{x}) &= \mathbf{c}^t \mathbf{x} + \frac{1}{2} \mathbf{x}^t C \mathbf{x} \\ \text{sujeto a: } &A_1 \mathbf{x} \leq \mathbf{b}_1 \\ &A_2 \mathbf{x} = \mathbf{b}_2 \\ &\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \end{aligned} \quad (3.4)$$

donde $A_1^t = [\mathbf{a}_1 \mid \cdots \mid \mathbf{a}_m]$, $\mathbf{b}_1 = (b_1 \ \cdots \ b_m)^t$, $A_2^t = [\mathbf{a}_{m+1} \mid \cdots \mid \mathbf{a}_{m+r}]$ y $\mathbf{b}_2 = (b_{m+1} \ \cdots \ b_{m+r})^t$. Es decir, tiene m restricciones de desigualdad y r restricciones de igualdad.

Notemos que este problema difiere del modelo de problema (3.1) únicamente en que incluye restricciones de igualdad. Como las restricciones de igualdad $A_2\mathbf{x} = \mathbf{b}_2$ son equivalentes al conjunto de desigualdades $A_2\mathbf{x} \leq \mathbf{b}_2$ y $A_2\mathbf{x} \geq \mathbf{b}_2$, el problema (3.4) puede escribirse como

$$\begin{aligned} \min f(\mathbf{x}) &= \mathbf{c}^t \mathbf{x} + \frac{1}{2} \mathbf{x}^t \mathbf{C} \mathbf{x} \\ \text{sujeto a: } & A_1 \mathbf{x} \leq \mathbf{b}_1 \\ & A_2 \mathbf{x} \leq \mathbf{b}_2 \\ & -A_2 \mathbf{x} \leq -\mathbf{b}_2 \\ & \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \end{aligned}$$

que tiene la misma forma que (3.1). Sea

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} \mathbf{u}_1 \\ \mathbf{u}_2 \\ \mathbf{u}_3 \end{bmatrix}$$

el vector de los multiplicadores asociados, las 3 condiciones de optimalidad para (3.4) son:

$$\begin{aligned} A_1 \mathbf{x}_0 &\leq \mathbf{b}_1, \quad A_2 \mathbf{x}_0 = \mathbf{b}_2, \\ -g(\mathbf{x}_0) &= A_1^t \mathbf{u}_1 + A_2^t (\mathbf{u}_2 - \mathbf{u}_3), \quad \mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \mathbf{u}_3 \geq \mathbf{0}, \\ \mathbf{u}_1^t (A_1 \mathbf{x}_0 - \mathbf{b}_1) &+ (\mathbf{u}_2 - \mathbf{u}_3)^t (A_2 \mathbf{x}_0 - \mathbf{b}_2) = 0. \end{aligned}$$

Redefiniendo $\mathbf{u}_2 = \mathbf{u}_2 - \mathbf{u}_3$ y como $A_2 \mathbf{x}_0 = \mathbf{b}_2$, las condiciones anteriores pueden escribirse como se muestran en el siguiente teorema.

Teorema 3.3 (Condiciones de optimalidad). \mathbf{x}_0 es una solución óptima del problema (3.4) si y solo si

a) $A_1 \mathbf{x}_0 \leq \mathbf{b}_1, \quad A_2 \mathbf{x}_0 = \mathbf{b}_2,$

b) $-g(\mathbf{x}_0) = A_1^t \mathbf{u}_1 + A_2^t \mathbf{u}_2, \quad \mathbf{u}_1 \geq \mathbf{0},$

c) $\mathbf{u}_1^t (A_1 \mathbf{x}_0 - \mathbf{b}_1) = 0.$

3.2. Algoritmo 3

Vamos a adaptar el Algoritmo 2 para la solución del problema (3.4) con m restricciones de desigualdad y r restricciones de igualdad. Asumimos que los gradientes de las restricciones lineales de igualdad, $\mathbf{a}_{m+1}, \dots, \mathbf{a}_{m+r}$, son linealmente independientes y que conocemos un punto factible inicial \mathbf{x}_0 .

El algoritmo funciona de la siguiente manera, en una iteración j general, parte de un punto factible arbitrario. Los índices de las restricciones activas en este punto cuyos gradientes sean linealmente independientes formarán el *conjunto activo*, que denotaremos con I_j . A partir de éste, el algoritmo determina el punto cuasiestacionario asociado y comprueba la optimalidad del punto. Si los criterios de optimalidad no se satisfacen, se elimina una restricción de desigualdad del conjunto activo y vuelve a buscar otro punto cuasiestacionario sobre el nuevo conjunto activo con un valor de la función objetivo menor. Repitiendo este proceso obtenemos una secuencia de puntos cuasiestacionarios con valores de la función objetivo estrictamente decrecientes.

De esta forma, el algoritmo difiere del Algoritmo 2 en el cálculo del tamaño de paso σ_j , donde además de calcular el tamaño de paso óptimo, también calcula el tamaño de paso factible máximo, y en el criterio de parada, donde ahora aplicaremos los criterios de optimalidad dados en la sección anterior.

3.2.1. Búsqueda de un punto cuasiestacionario

Supongamos que estamos en la iteración inicial $j = 0$ y que tenemos un $\mathbf{x}_0 \in R$. Tomamos cualquier subconjunto del conjunto de restricciones activas en \mathbf{x}_0 cuyos gradientes sean linealmente independientes. Este será el conjunto activo inicial

$$I_0 = \{ i \mid \mathbf{a}_i^t \mathbf{x}_0 = b_i, \mathbf{a}_i \text{ linealmente independientes} \}.$$

Para encontrar un punto cuasiestacionario inicial $\hat{\mathbf{x}}$ resolvemos el problema

$$\begin{aligned} \min f(\mathbf{x}) &= \mathbf{c}^t \mathbf{x} + \frac{1}{2} \mathbf{x}^t C \mathbf{x} \\ \text{sujeto a: } &\mathbf{a}_i^t \mathbf{x} = b_i, i \in I_0 \\ &\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \end{aligned} \quad (3.5)$$

con restricciones lineales de igualdad. Notemos que $\hat{\mathbf{x}}$ cumplirá $f(\hat{\mathbf{x}}) \leq f(\mathbf{x}_0)$ y que otras restricciones que no estén en I_0 podrían estar activas en $\hat{\mathbf{x}}$.

Aplicamos el Algoritmo 2 al problema (3.5) con datos iniciales \mathbf{x}_0, D_0^{-1} y J_0 , siendo $D_0^t = [\mathbf{d}_1 \mid \cdots \mid \mathbf{d}_n]$ con sus primeras columnas $\mathbf{a}_i, i \in I_0$ y el resto cualesquiera de manera que sea no singular, y $J_0 = \{ \alpha_{i0}, \dots, \alpha_{n0} \}$ con $\alpha_{i0} = k$ si $\mathbf{d}_i = \mathbf{a}_k$ y $\alpha_{i0} = 0$ en caso contrario.

Como el problema (3.5) no tiene en cuenta el resto de las $i \notin I_0$ restricciones de (3.4), el punto $\hat{\mathbf{x}}$ construido por el Algoritmo 2 podría ser no factible para (3.4). Para garantizar la factibilidad de este punto introducimos la siguiente modificación del Algoritmo 2 en el cálculo del tamaño de paso.

3.2.2. Cálculo del tamaño de paso σ_j

Supongamos que estamos en una iteración j general en la que tenemos un punto factible \mathbf{x}_j , una dirección de búsqueda \mathbf{s}_j , y sea $\hat{\sigma}_j$ el tamaño de paso factible máximo para \mathbf{x}_j y \mathbf{s}_j , es decir, $\mathbf{x}_j - \sigma \mathbf{s}_j \in R \forall \sigma \in [0, \hat{\sigma}_j]$, y

$$\hat{\sigma}_j = \min \left\{ \frac{\mathbf{a}_l^t \mathbf{x}_j - b_l}{\mathbf{a}_l^t \mathbf{s}_j} \mid \forall i \notin I_j \text{ con } \mathbf{a}_i^t \mathbf{s}_j < 0 \right\} = \frac{\mathbf{a}_l^t \mathbf{x}_j - b_l}{\mathbf{a}_l^t \mathbf{s}_j},$$

donde $l \notin I_j$ es el índice de la restricción que limita a $\hat{\sigma}_j$.

Supongamos que $\mathbf{s}_j^t C \mathbf{s}_j > 0$ (luego veremos qué ocurre cuando $\mathbf{s}_j^t C \mathbf{s}_j = 0$). En este caso, sabemos por los capítulos anteriores que el tamaño de paso óptimo está dado por $\tilde{\sigma}_j = \frac{\mathbf{g}_j^t \mathbf{s}_j}{\mathbf{s}_j^t C \mathbf{s}_j}$.

Definimos el tamaño de paso para la iteración j como $\sigma_j = \min\{\tilde{\sigma}_j, \hat{\sigma}_j\}$, ahora el algoritmo funciona de diferente manera dependiendo del caso.

Caso 1: $\sigma_j = \tilde{\sigma}_j$

En este caso, se tiene que $\mathbf{x}_{j+1} = \mathbf{x}_j - \tilde{\sigma}_j \mathbf{s}_j \in R$ y el algoritmo continúa con la actualización del Algoritmo 2.

Caso 2: $\sigma_j = \hat{\sigma}_j$

En este caso, la restricción l se vuelve activa en \mathbf{x}_{j+1} , por lo que añadimos este índice al conjunto activo I_{j+1} y procedemos aplicando el Algoritmo 2 al problema (3.5) sobre el nuevo conjunto de restricciones activas.

Para poder aplicar el Algoritmo 2 al problema actualizado necesitamos una matriz D_{j+1}^{-1} apropiada y un conjunto de índices J_{j+1} que obtendremos de D_j^{-1} y J_j de la iteración actual.

Si $\mathbf{s}_j^t C \mathbf{s}_j = 0$, entonces, como en el Algoritmo 2, $f(\mathbf{x}_j - \sigma \mathbf{s}_j) = f(\mathbf{x}_j) - \sigma \mathbf{g}_j^t \mathbf{s}_j \xrightarrow{\sigma \rightarrow +\infty} -\infty$. En este caso, fijamos $\tilde{\sigma}_j = +\infty$.

Observar que si $\mathbf{a}_i^t \mathbf{s}_j \geq 0 \forall i = 1, \dots, m$, se tiene que $\mathbf{x}_j - \sigma \mathbf{s}_j \in R \forall \sigma \geq 0$, con lo que podemos fijar $\hat{\sigma}_j = +\infty$.

- Si $\tilde{\sigma}_j = +\infty$ y $\hat{\sigma}_j = +\infty$, el problema (3.4) es no acotado inferiormente.
- En otro caso, al menos uno de los dos es finito y definiendo $\sigma_j = \min\{\tilde{\sigma}_j, \hat{\sigma}_j\}$ el algoritmo continúa como antes, dependiendo del caso.

3.2.3. Actualización de la matriz D_j^{-1} y del conjunto de índices J_j cuando $\sigma_j = \hat{\sigma}_j$

Definimos las matrices D_j^t y D_j^{-1} para la iteración j del mismo modo a las definidas para el Algoritmo 2, denotando con \mathbf{d}_{ij} y \mathbf{c}_{ij} a la columna i -ésima de las matrices D_j^t y D_j^{-1} respectivamente.

Definimos además el conjunto de índices como $J_j = \{\alpha_{1j}, \dots, \alpha_{nj}\}$, donde para $i = 1, \dots, n$,

$$\alpha_{ij} = \begin{cases} -1 & \text{si } \mathbf{d}_{ij} = C\mathbf{c}_{ij}, \\ k & \text{si } \mathbf{d}_{ij} = \mathbf{a}_k, \\ 0 & \text{en otro caso.} \end{cases}$$

Así, para $i = 1, \dots, n$, las columnas \mathbf{c}_{ij} con $\alpha_{ij} = -1$ forman un conjunto de j direcciones conjugadas, las \mathbf{c}_{ij} con $1 \leq \alpha_{ij} \leq m$ son las columnas de D_j^{-1} asociadas con las restricciones de desigualdad activas, las \mathbf{c}_{ij} con $m+1 \leq \alpha_{ij} \leq m+r$ las asociadas con las restricciones de igualdad, y las \mathbf{c}_{ij} con $\alpha_{ij} = 0$ son las columnas restantes.

Notemos que los índices de las restricciones de igualdad $m+1, \dots, m+r$ deben permanecer en el conjunto activo durante todo el algoritmo, y que el conjunto activo es un subconjunto del conjunto de índices para cada iteración.

Como en los Algoritmos 1 y 2, elegiremos la dirección de búsqueda \mathbf{s}_j paralela a alguna de las \mathbf{c}_{ij} con $\alpha_{ij} = 0$. Sea k esta columna, entonces $\mathbf{s}_j = \mathbf{c}_{kj}$ ó $\mathbf{s}_j = -\mathbf{c}_{kj}$. Por definición de $\hat{\sigma}_j$, $\mathbf{a}_l^t \mathbf{s}_j < 0$, donde $l \notin J_j$ es una restricción de desigualdad que se vuelve activa para la iteración siguiente. En consecuencia, $\mathbf{a}_l^t \mathbf{c}_{kj} \neq 0$ y se sigue del Método Φ que reemplazando la fila k de la matriz D_j por \mathbf{a}_l obtendremos una matriz no singular. Por lo tanto, podemos proceder estableciendo

$$D_{j+1}^{-1} = \Phi(D_j^{-1}, \mathbf{a}_l, k) = [\mathbf{c}_{1,j+1} \mid \dots \mid \mathbf{c}_{n,j+1}].$$

El Método Φ proporciona la actualización de las columnas de D_{j+1}^{-1} que son direcciones conjugadas como

$$\mathbf{c}_{i,j+1} = \mathbf{c}_{ij} - \frac{\mathbf{a}_l^t \mathbf{c}_{ij}}{\mathbf{a}_l^t \mathbf{c}_{kj}} \mathbf{c}_{kj}, \quad \forall i \text{ con } \alpha_{ij} = -1.$$

En este caso, no hay ninguna razón para esperar que \mathbf{a}_l sea ortogonal a ninguna de las \mathbf{c}_{ij} con $\alpha_{ij} = -1$, por lo que el conjunto de las columnas de D_j^{-1} que son direcciones conjugadas se destruye con esta actualización y el conjunto de índices se actualiza de la siguiente manera

$$\alpha_{i,j+1} = \begin{cases} \alpha_{ij} & \forall i \text{ con } \alpha_{ij} \geq 0, i \neq k, \\ 0 & \forall i \text{ con } \alpha_{ij} = -1, \\ l & \text{si } i = k. \end{cases}$$

3.2.4. Test de optimalidad

Supongamos que estamos en la iteración j y que hemos encontrado un punto cuasiestacionario \mathbf{x}_j . Sea I_j el conjunto activo, \mathbf{x}_j es factible para (3.4) y una solución óptima para

$$\begin{aligned} \min f(\mathbf{x}) &= \mathbf{c}^t \mathbf{x} + \frac{1}{2} \mathbf{x}^t C \mathbf{x} \\ \text{sujeto a: } &\mathbf{a}_i^t \mathbf{x} = b_i, \quad i \in I_j \\ &\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n. \end{aligned} \quad (3.6)$$

Sean D_j^t , D_j^{-1} y J_j las descritas antes, como \mathbf{x}_j es óptima para (3.6), satisface las condiciones de optimalidad para este problema con restricciones de igualdad:

$$-\mathbf{g}_j = \sum_{i \in I_j} u_i \mathbf{a}_i.$$

Por el teorema 2.4, los multiplicadores pueden obtenerse de \mathbf{g}_j y D_j^{-1} como $u_i = -\mathbf{g}_j^t \mathbf{c}_{ij} \quad \forall i \in I_j$. Definiendo $u_i = 0 \quad \forall i \notin I_j$, vemos que \mathbf{x}_j satisface todas las condiciones de optimalidad para (3.4) con la

posible excepción de $\mathbf{u}_1 \geq 0$, siendo este el vector de los multiplicadores asociados a las restricciones de desigualdad. Para ver esto, definimos k tal que

$$\mathbf{g}_j^t \mathbf{c}_{kj} = \max \{ \mathbf{g}_j^t \mathbf{c}_{ij} \mid \forall i \text{ con } 1 \leq \alpha_{ij} \leq m \}.$$

- Si $\mathbf{g}_j^t \mathbf{c}_{kj} \leq 0$, entonces $\mathbf{u}_1 \geq 0$ y \mathbf{x}_j satisface todas las condiciones de optimalidad para (3.4), luego por el teorema 3.3, \mathbf{x}_j es una solución óptima para (3.4).
- Si $\mathbf{g}_j^t \mathbf{c}_{kj} > 0$, veamos que estableciendo $\mathbf{s}_j = \mathbf{c}_{kj}$ y procediendo con el tamaño de paso y actualización descritos antes se reduce el valor de la función objetivo y la restricción k se vuelve inactiva.

De la serie de Taylor, $f(\mathbf{x}_j - \sigma \mathbf{s}_j) = f(\mathbf{x}_j) - \sigma \mathbf{g}_j^t \mathbf{s}_j + \frac{1}{2} \sigma^2 \mathbf{s}_j^t \mathbf{C} \mathbf{s}_j$, y como $\mathbf{g}_j^t \mathbf{s}_j = \mathbf{g}_j^t \mathbf{c}_{kj} > 0$, se sigue que un pequeño incremento en σ da un menor valor de la función objetivo.

De la definición de las matrices D_j^t y D_j^{-1} , y por (A.2), se cumple $\mathbf{a}_k^t \mathbf{c}_{kj} = 1$, que implica $\mathbf{a}_k^t (\mathbf{x}_j - \sigma \mathbf{s}_j) = b_k - \sigma$ con $\sigma > 0$, luego $\mathbf{a}_k^t (\mathbf{x}_j - \sigma \mathbf{s}_j) < b_k$, es decir, la restricción k se vuelve inactiva en $\mathbf{x}_j - \sigma \mathbf{s}_j \quad \forall \sigma > 0$.

3.2.5. Formulación del algoritmo, teorema de convergencia y ejemplos

Comenzamos la sección reuniendo todos los elementos presentados en las secciones anteriores para formalizar el algoritmo de resolución.

ALGORITMO 3. Modelo de problema:

$$\begin{aligned} \text{minimizar: } & \mathbf{c}^t \mathbf{x} + \frac{1}{2} \mathbf{x}^t \mathbf{C} \mathbf{x} \\ \text{sujeto a: } & \mathbf{a}_i^t \mathbf{x} \leq b_i, \quad i = 1, \dots, m \\ & \mathbf{a}_i^t \mathbf{x} = b_i, \quad i = m + 1, \dots, m + r \\ & \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n. \end{aligned}$$

Inicialización:

Empezar con cualquier \mathbf{x}_0 factible.

Fijar D_0^{-1} , donde $D_0^t = [\mathbf{d}_1 \mid \dots \mid \mathbf{d}_n]$ es no singular y $\mathbf{d}_i = \mathbf{a}_k \quad \forall k = m + 1, \dots, m + r \quad \forall k \in I(\mathbf{x}_0)$ tal que los \mathbf{a}_k son linealmente independientes y cualesquiera $\mathbf{d}_i, i = 1, \dots, n$, restantes.

Fijar $J_0 = \{ \alpha_{10}, \dots, \alpha_{n0} \}$ con $\alpha_{i0} = k$ si $\mathbf{d}_i = \mathbf{a}_k$ y $\alpha_{i0} = 0$ en caso contrario.

Calcular $f(\mathbf{x}_0) = \mathbf{c}^t \mathbf{x}_0 + \frac{1}{2} \mathbf{x}_0^t \mathbf{C} \mathbf{x}_0$, $\mathbf{g}_0 = \mathbf{c} + \mathbf{C} \mathbf{x}_0$ y fijar $j = 0$.

Paso 1: Cálculo de la dirección de búsqueda \mathbf{s}_j .

Sean $D_j^{-1} = [\mathbf{c}_{1j} \mid \dots \mid \mathbf{c}_{nj}]$ y $J_j = \{ \alpha_{1j}, \dots, \alpha_{nj} \}$.

- Si $\alpha_{ij} = 0$ para algún $i \implies$ ir al Paso 1.1.
- Si $\alpha_{ij} \neq 0 \quad \forall i = 1, \dots, n \implies$ ir al Paso 1.2.

Paso 1.1:

Calcular el menor índice k tal que $|\mathbf{g}_j^t \mathbf{c}_{kj}| = \max \{ |\mathbf{g}_j^t \mathbf{c}_{ij}| : \forall i \text{ con } \alpha_{ij} = 0 \}$.

- Si $\mathbf{g}_j^t \mathbf{c}_{kj} = 0 \implies$ ir al Paso 1.2.

- En otro caso, fijar $\mathbf{s}_j = \begin{cases} \mathbf{c}_{kj} & \text{si } \mathbf{g}_j^t \mathbf{c}_{kj} > 0 \\ -\mathbf{c}_{kj} & \text{si } \mathbf{g}_j^t \mathbf{c}_{kj} < 0 \end{cases}$ e ir al Paso 2.

Paso 1.2:

- Si $\nexists i \text{ con } 1 \leq \alpha_{ij} \leq m \implies$ STOP con solución óptima \mathbf{x}_j .
- Si hay algún i con $1 \leq \alpha_{ij} \leq m \implies$ calcular el menor índice k tal que

$$\mathbf{g}_j^t \mathbf{c}_{kj} = \max \{ \mathbf{g}_j^t \mathbf{c}_{ij} \mid \forall i \text{ con } 1 \leq \alpha_{ij} \leq m \}.$$

- Si $\mathbf{g}_j^t \mathbf{c}_{kj} \leq 0 \implies$ STOP con solución óptima \mathbf{x}_j .
- Si $\mathbf{g}_j^t \mathbf{c}_{kj} > 0 \implies$ fijar $\mathbf{s}_j = \mathbf{c}_{kj}$ e ir al Paso 2.

Paso 2: Cálculo del tamaño de paso σ_j .

1) Calcular $\mathbf{s}_j^t \mathbf{C} \mathbf{s}_j$.

- Si $\mathbf{s}_j^t \mathbf{C} \mathbf{s}_j = 0 \implies$ fijar $\tilde{\sigma}_j = +\infty$.
- Si $\mathbf{s}_j^t \mathbf{C} \mathbf{s}_j > 0 \implies$ fijar $\tilde{\sigma}_j = \frac{\mathbf{g}_j^t \mathbf{s}_j}{\mathbf{s}_j^t \mathbf{C} \mathbf{s}_j}$.

2)

- Si $\mathbf{a}_i^t \mathbf{s}_j \geq 0 \forall i = 1, \dots, m \implies$ fijar $\hat{\sigma}_j = +\infty$.
- En otro caso, calcular el menor índice l tal que

$$\hat{\sigma}_j = \frac{\mathbf{a}_l^t \mathbf{x}_j - b_l}{\mathbf{a}_l^t \mathbf{s}_j} = \min \left\{ \frac{\mathbf{a}_i^t \mathbf{x}_j - b_i}{\mathbf{a}_i^t \mathbf{s}_j} \mid \forall i \notin J_j \text{ con } \mathbf{a}_i^t \mathbf{s}_j < 0 \right\}.$$

- Si $\tilde{\sigma}_j = \hat{\sigma}_j = +\infty \implies$ STOP el problema es no acotado inferiormente.
- En otro caso, fijar $\sigma_j = \min\{\tilde{\sigma}_j, \hat{\sigma}_j\}$ e ir al Paso 3.

Paso 3: Actualización.

Fijar $\mathbf{x}_{j+1} = \mathbf{x}_j - \sigma_j \mathbf{s}_j$.

Calcular $f(\mathbf{x}_{j+1}) = \mathbf{c}^t \mathbf{x}_{j+1} + \frac{1}{2} \mathbf{x}_{j+1}^t \mathbf{C} \mathbf{x}_{j+1}$ y $\mathbf{g}_{j+1} = \mathbf{c} + \mathbf{C} \mathbf{x}_{j+1}$.

- Si $\tilde{\sigma}_j \leq \hat{\sigma}_j \implies$ ir al Paso 3.1.
- Si $\tilde{\sigma}_j > \hat{\sigma}_j \implies$ ir al Paso 3.2.

Paso 3.1:

Fijar $\mathbf{d}_j = \frac{1}{\sqrt{\mathbf{s}_j^t \mathbf{C} \mathbf{s}_j}} \mathbf{C} \mathbf{s}_j$, $D_{j+1}^{-1} = \Phi_1(D_j^{-1}, \mathbf{d}_j, k, J_j)$ y $J_{j+1} = \{\alpha_{1,j+1}, \dots, \alpha_{n,j+1}\}$, donde

$$\alpha_{i,j+1} = \begin{cases} \alpha_{ij} & \text{si } i = 1, \dots, n, i \neq k, \\ -1 & \text{si } i = k. \end{cases}$$

Reemplazar j por $j+1$ e ir al Paso 1.

Paso 3.2:

Fijar $D_{j+1}^{-1} = \Phi(D_j^{-1}, \mathbf{a}_l, k)$ y $J_{j+1} = \{\alpha_{1,j+1}, \dots, \alpha_{n,j+1}\}$, donde

$$\alpha_{i,j+1} = \begin{cases} \alpha_{ij} & \forall i \text{ con } \alpha_{ij} \geq 0, i \neq k, \\ 0 & \forall i \text{ con } \alpha_{ij} = -1, \\ l & \text{si } i = k. \end{cases}$$

Reemplazar j por $j+1$ e ir al Paso 1.

Teorema 3.4 (Convergencia del Algoritmo 3). *Si cada punto cuasiestacionario obtenido por el Algoritmo 3 es no degenerado, entonces el algoritmo termina después de un número finito de pasos con una de las dos situaciones:*

- \mathbf{x}_j es la solución óptima para el problema (3.4). En este caso, los multiplicadores asociados a las restricciones activas en \mathbf{x}_j están dados por $u_{\alpha_{ij}} = -\mathbf{g}_j^t \mathbf{c}_{ij} \forall i$ con $1 \leq \alpha_{ij} \leq m+r$ y los multiplicadores asociados al resto de restricciones tienen valor 0.
- El problema es no acotado inferiormente. En este caso, el algoritmo termina con \mathbf{x}_j y \mathbf{s}_j tales que $\mathbf{x}_j - \sigma \mathbf{s}_j \in R \forall \sigma \geq 0$ y $f(\mathbf{x}_j - \sigma \mathbf{s}_j) \xrightarrow{\sigma \rightarrow +\infty} -\infty$.

Dem. La demostración comparte ideas con las de los teoremas 1.7 y 2.4 por lo que se ha enviado al Anexo D.3. \square

Como en los capítulos anteriores, ilustramos el funcionamiento del Algoritmo 3 aplicándolo en el siguiente Problema de Programación Cuadrática con restricciones de desigualdad que hemos sacado de [4, pág. 192-195]. En el próximo capítulo mostraremos la resolución de este problema mediante diferentes programas de ordenador.

Ejemplo 3. Supongamos que hay tres activos candidatos para nuestra cartera de valores. Queremos determinar qué fracción de la cartera deberíamos invertir en cada activo para obtener un retorno total esperado de al menos el 12% mientras minimizamos la varianza del retorno y sin exceder las restricciones de presupuesto. Los retornos esperados de cada activo son del 30%, 20% y 8% respectivamente. Además, ninguno de los tres activos puede constituir más del 75% de la cartera. Supongamos que la matriz de covarianzas es

$$\begin{pmatrix} 3 & 1 & -0,5 \\ 1 & 2 & -0,4 \\ -0,5 & -0,4 & 1 \end{pmatrix}.$$

Si x , y , z representan la fracción de la cartera que invertiremos en cada uno de los tres activos, la varianza del retorno puede escribirse como $f(\mathbf{x}) = 3x^2 + 2y^2 + z^2 + 2xy - xz - 0,8yz$, y el problema completo queda:

$$\begin{aligned} \text{minimizar: } & 3x^2 + 2y^2 + z^2 + 2xy - xz - 0,8yz \\ \text{sujeto a: } & x + y + z = 1 \\ & 1,3x + 1,2y + 1,08z \geq 1,12 \\ & x \leq 0,75 \\ & y \leq 0,75 \\ & z \leq 0,75. \end{aligned}$$

Estamos ante un Problema de Programación Cuadrática con 4 restricciones de desigualdad y 1 restricción de igualdad. Para aplicar el Algoritmo 3 cambiamos de signo la segunda restricción (restricción de retorno) y ponemos la primera restricción en el último lugar (restricción de presupuesto). Así el problema queda expresado en la forma general y procedemos a aplicar el algoritmo:

$$\begin{aligned} \text{minimizar: } & 3x^2 + 2y^2 + z^2 + 2xy - xz - 0,8yz \\ \text{sujeto a: } & -1,3x - 1,2y - 1,08z \leq -1,12 \\ & x \leq 0,75 \\ & y \leq 0,75 \\ & z \leq 0,75 \\ & x + y + z = 1. \end{aligned}$$

Aquí

$$\mathbf{c} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ y } C = \begin{pmatrix} 6 & 2 & -1 \\ 2 & 4 & -0,8 \\ -1 & -0,8 & 2 \end{pmatrix}.$$

$$\text{Inicialización: } \mathbf{x}_0 = \begin{pmatrix} 0,5 \\ 0,5 \\ 0 \end{pmatrix}, D_0 = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, D_0^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & -1 & -1 \end{pmatrix}, J_0 = \{5, 2, 3\},$$

$$f(\mathbf{x}_0) = 1,75, \mathbf{g}_0 = \begin{pmatrix} 4 \\ 3 \\ -0,9 \end{pmatrix}, j = 0.$$

Iteración 0

Paso 1: Como $\alpha_{i0} \neq 0 \forall i = 1, 2, 3 \implies$ Paso 1.2.

$$\text{Paso 1.2: } \mathbf{g}'_0 \mathbf{c}_{k0} = \max \{ \mathbf{g}'_0 \mathbf{c}_{20}, \mathbf{g}'_0 \mathbf{c}_{30} \} = \max \{ 4,9, 3,9 \} = 4,9 \implies \mathbf{s}_0 = \mathbf{c}_{20} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, k = 2.$$

Paso 2: $s_0^t C s_0 = 10 > 0 \implies \tilde{\sigma}_0 = 0,49$.

$$\hat{\sigma}_0 = \min \left\{ \frac{\mathbf{a}_1^t \mathbf{x}_0 - b_1}{\mathbf{a}_1^t \mathbf{s}_0}, \frac{\mathbf{a}_4^t \mathbf{x}_0 - b_4}{\mathbf{a}_4^t \mathbf{s}_0} \right\} = \min \{0,59, 0,75\} = 0,59, \quad l = 1.$$

$\sigma_0 = \min\{\tilde{\sigma}_0, \hat{\sigma}_0\} = \tilde{\sigma}_0 = 0,49 \implies$ Paso 3.1.

Paso 3.1: $\mathbf{x}_1 = \begin{pmatrix} 0,01 \\ 0,5 \\ 0,49 \end{pmatrix}$, $f(\mathbf{x}_1) = 0,5495$, $\mathbf{g}_1 = \begin{pmatrix} 0,57 \\ 1,628 \\ 0,57 \end{pmatrix}$, $\mathbf{d}_0 = \begin{pmatrix} 2,21 \\ 0,88 \\ -0,95 \end{pmatrix}$,

$$D_1^{-1} = \begin{pmatrix} 0,3 & 0,32 & -0,58 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0,7 & -0,32 & -0,42 \end{pmatrix}, \quad J_1 = \{5, -1, 3\}, \quad j = 1.$$

Iteración 1

Paso 1: Como $\alpha_{i1} \neq 0 \forall i = 1, 2, 3 \implies$ Paso 1.2.

Paso 1.2: Como $i = 3$ es el único tal que $1 \leq \alpha_{i1} \leq 4 \implies k = 3$.

$$\mathbf{g}_1^t \mathbf{c}_{31} = 1,058 > 0 \implies \mathbf{s}_1 = \mathbf{c}_{31} = \begin{pmatrix} -0,58 \\ 1 \\ -0,42 \end{pmatrix}.$$

Paso 2: $s_1^t C s_1 = 4,24 > 0 \implies \tilde{\sigma}_1 = 0,25$.

$$\hat{\sigma}_1 = \frac{\mathbf{a}_2^t \mathbf{x}_1 - b_2}{\mathbf{a}_2^t \mathbf{s}_1} = 1,2758, \quad l = 2.$$

$\sigma_1 = \min\{\tilde{\sigma}_1, \hat{\sigma}_1\} = \tilde{\sigma}_1 = 0,25 \implies$ Paso 3.1.

Paso 3.1: $\mathbf{x}_2 = \begin{pmatrix} 0,155 \\ 0,25 \\ 0,595 \end{pmatrix}$, $f(\mathbf{x}_2) = 0,417375$, $\mathbf{g}_2 = \begin{pmatrix} 0,835 \\ 0,834 \\ 0,835 \end{pmatrix}$, $\mathbf{d}_1 = \begin{pmatrix} -0,5147 \\ 1,5424 \\ -0,5147 \end{pmatrix}$,

$$D_2^{-1} = \begin{pmatrix} 0,155 & 0,32 & -0,282 \\ 0,25 & 0 & 0,486 \\ 0,595 & -0,32 & -0,204 \end{pmatrix}, \quad J_2 = \{5, -1, -1\}, \quad j = 2.$$

Iteración 2

Paso 1: Como $\alpha_{i2} \neq 0 \forall i = 1, 2, 3 \implies$ Paso 1.2.

Paso 1.2: Como $\nexists i$ con $1 \leq \alpha_{i2} \leq 4 \implies$ STOP con solución óptima $\mathbf{x}_2 = \begin{pmatrix} 0,155 \\ 0,25 \\ 0,595 \end{pmatrix}$.

Es decir, deberíamos invertir un 15,5% de la cartera en x , un 25% en y , y el 59,5% restante en z , y de esta manera el retorno total esperado para esta cartera de valores es del 14,41%, con una varianza de 0.417375.

Nota. Por el teorema 3.4 sabemos que los multiplicadores asociados a las restricciones activas en \mathbf{x}_2 están dados por $u_{\alpha_{i2}} = -\mathbf{g}_2^t \mathbf{c}_{i2} \forall i \in J_2$ con $1 \leq \alpha_{i2} \leq 5$ y los asociados al resto de restricciones tienen valor 0.

Por tanto, tenemos que $u_i = 0 \forall i = 1, 2, 3, 4$ y $u_5 = -\mathbf{g}_2^t \mathbf{c}_{12} = -0,8347498$, es decir, la única restricción activa en \mathbf{x}_2 es la 5, que por ser de igualdad u_5 no está restringido en signo por las condiciones de holgura complementaria.

Capítulo 4

Resolución de Problemas de Programación Cuadrática con Programas de Ordenador

En este Capítulo mostramos cómo resolver los Problemas de Programación Cuadrática estudiados en los capítulos anteriores mediante diversos programas informáticos. Hemos tomado un software libre que viene en la librería quadprog de R de [5], funciones manuales de Matlab escritas por el autor del libro sobre el que se ha basado todo el trabajo, y dos softwares comerciales, Lingo y Cplex, de los cuales nos ha bastado con la versión académica y podemos consultar un manual en [6] y [7].

A continuación detallamos cómo se introduce un Problema de Programación Cuadrática general en cada uno de los programas nombrados y la interpretación de los resultados obtenidos por los mismos resolviendo el ejemplo 3 del Capítulo 3, donde hemos aplicado el Algoritmo 3 de forma manual. Destacamos que cada software tiene implementado un algoritmo de resolución distinto y que en algunos de ellos no viene especificado.

El código de Matlab que implementa los 3 algoritmos estudiados en el trabajo está escrito, explicado y aplicado a diferentes ejemplos en el libro citado antes, y puede descargarse en [3]. En los ejemplos presentados en el trabajo hemos aplicado los algoritmos manualmente y hemos utilizado estos programas para comprobar las soluciones.

4.1. Resolución con Lingo

Podemos resolver cualquier Problema de Programación Cuadrática con Lingo introduciendo la fórmula de la función objetivo después de la expresión 'MIN =' y en las líneas posteriores se escriben las restricciones, las que sean de desigualdad se escriben con desigualdad estricta y todas finalizan con un punto y coma. En la figura 4.1 a) mostramos cómo se introduce el ejemplo 3. La escritura es más o menos natural, similar a como se escribiría a mano. Notar que en este software si no se indica lo contrario las variables se asumen no negativas en \mathbb{R} .

Comentamos la salida de resultados que aparece en la figura 4.1 b). En la primera línea especifica si la solución óptima obtenida es global ó local, y debajo de esta el menor valor de la función objetivo alcanzado. Destacamos que Lingo reconoce, sin necesidad de especificárselo con ninguna orden adicional, que es un Problema de Programación Cuadrática y dice en el informe que la función objetivo es convexa, si lo es, sino lo pone, dice que la solución puede no ser un óptimo global.

En las últimas líneas escribe cada variable con su valor, y también la solución del problema dual debajo de la columna 'Dual Price'. Observar que la primera fila introducida, que corresponde a la función objetivo, la entiende como una restricción, así que la solución del problema dual obtenida para este ejemplo es

$$\mathbf{u} = (-0,8347495 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad 0)^t,$$

y podemos comprobar que coincide con el vector de los multiplicadores calculado en el capítulo anterior. Debajo de la columna 'Slack or Surplus' están las holguras que quedan para cada restricción.

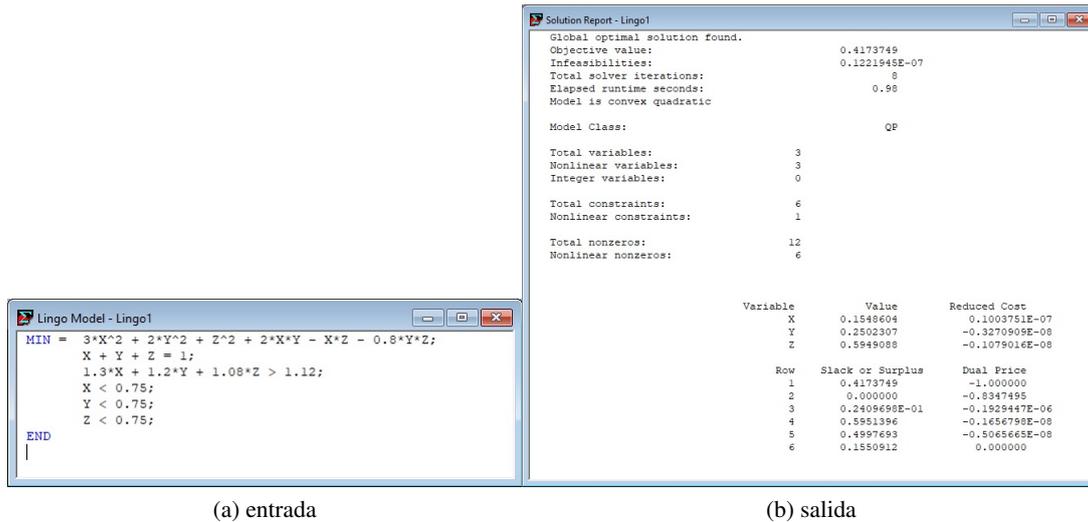


Figura 4.1: Ejemplo 3 para Lingo

4.2. Resolución con Cplex

Explicamos ahora cómo introducir cualquier Problema de Programación Cuadrática en Cplex. Primero debemos definir cada variable del problema, esto se hace con la orden 'dvar', y especificando el tipo de variable, en nuestro caso, al tratarse de números reales, que el ordenador trata como números de coma flotante, escribimos 'float+' por ser las tres variables positivas.

Para la función objetivo hemos definido una expresión, aunque esto no es necesario.

Después de definir los elementos que intervienen en el problema, escribimos este mediante las funciones 'minimize' y 'subject to { }' con las restricciones dentro de las llaves. Las restricciones de igualdad se deben escribir con '=='.

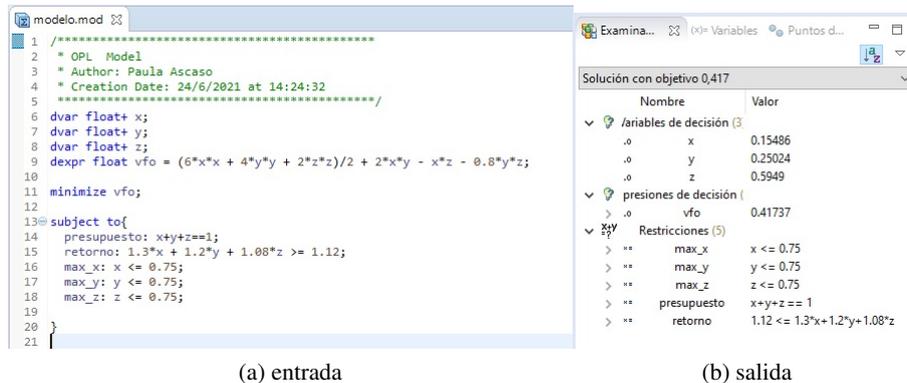


Figura 4.2: Ejemplo 3 para Cplex

La salida de resultados aparece en el panel abajo a la izquierda, donde escribe el valor óptimo de la función objetivo y el valor que toma cada variable. Además, como hemos definido una expresión para la función objetivo, también aparece el valor que toma dicha expresión para los valores dados de las variables de decisión.

Observar que hemos asignado un nombre a cada restricción en la definición del problema por lo que estas también aparecen en la salida de resultados, y si pinchamos en una de ellas, en el panel que se sitúa abajo a la derecha aparecen sus propiedades. Estas propiedades cambian dependiendo de donde situemos el ratón. Por ejemplo, si nos situamos con el ratón encima de la restricción de presupuesto, aparecen las cotas de la restricción, la solución de la variable dual asociada a esta y la holgura, puede verse en la figura

4.3, donde también mostramos las propiedades de la restricción de retorno y de la restricción sobre la variable x para comparar con los resultados obtenidos con Lingo.

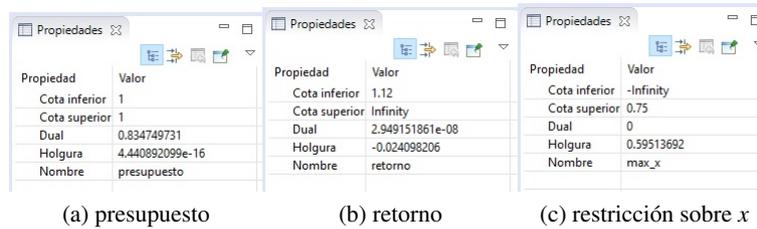


Figura 4.3: Propiedades de las restricciones

4.3. Resolución con R

Con la función `solve.QP` que está implementada en el paquete `quadprog` de R podemos resolver cualquier Problema de Programación Cuadrática de la forma

$$\begin{aligned} \min: & -\mathbf{d}'\mathbf{x} + \frac{1}{2}\mathbf{x}'D\mathbf{x} \\ \text{s. a: } & A'\mathbf{x} \geq \mathbf{b} \\ & \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \end{aligned}$$

donde A' es $m \times n$ y $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$. Los argumentos de la función son: $(D, \mathbf{d}, A, \mathbf{b}, \text{meq})$, donde $\text{meq}=i$ indica que las i primeras restricciones son de igualdad.

Primero definimos las matrices C , \mathbf{c} , A , y \mathbf{b} con los datos del problema. Una forma de hacerlo es como mostramos en la figura 4.4 a). Debemos tener en cuenta que $\mathbf{c} = -\mathbf{d}$, la matriz A que introducimos es la traspuesta de nuestro problema original, y en la que hemos cambiado de signo las 3 últimas restricciones, por ser de \leq , y que debemos hacer esta misma operación para definir el vector \mathbf{b} .

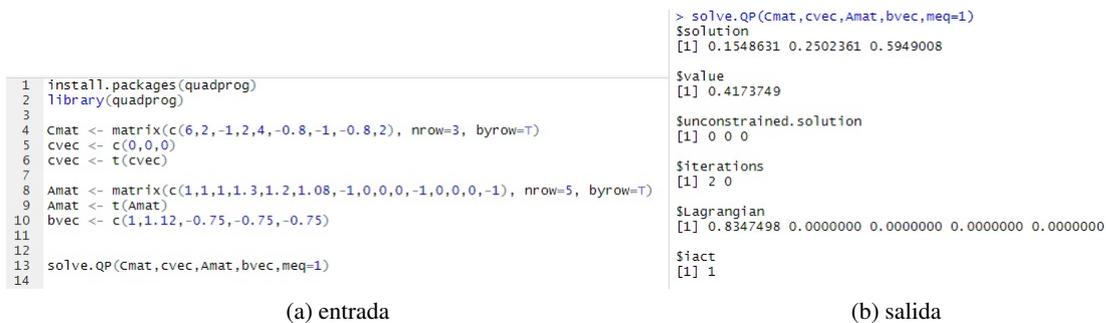


Figura 4.4: Ejemplo 3 en R

Esta función nos devuelve una lista con las siguientes componentes: 'solution' es el vector de soluciones, 'value' el valor de la función objetivo, en 'unconstrained.solution' aparece la solución del problema sin restricciones, 'iterations' es un vector de longitud 2 en el que la primera componente contiene el número de iteraciones requeridas por el algoritmo y la segunda indica cuántas veces las restricciones se vuelven inactivas después de haberse hecho activas primero. En este caso, ninguna restricción que se haya hecho activa por el algoritmo se vuelve inactiva después. 'Lagrangian' contiene el vector de los multiplicadores asociados a la solución, y por último, 'inact' es un vector en el que aparecen los índices de las restricciones activas en la solución.

Bibliografía

- [1] MICHAEL J. BEST, *Quadratic Programming with Computer Programs*, Chapman and Hall/CRC Press, Boca Raton, 2017.
- [2] JACK SHERMAN AND WINIFRED J. MORRISON, Adjustment of an Inverse Matrix Corresponding to a Change in One Element of a Given Matrix, *The Annals of Mathematical Statistics* **21** (1) (1950), 124-127.
- [3] MICHAEL J. BEST, <http://www.math.uwaterloo.ca/~mjb主/>, accedido en abril de 2021.
- [4] LINUS SCHRAGE, *LINDO: An Optimization Modeling System*, The Scientific Press, South San Francisco, 1993.
- [5] S ORIGINAL BY BERWIN A. TURLACH R PORT BY ANDREAS WEINGESSEL <ANDREAS.WEINGESSEL@CI.TUWIEN.AC.AT> FORTRAN CONTRIBUTIONS FROM CLEVE MOLER DPODI/LINPACK), *quadprog: Functions to Solve Quadratic Programming Problems*, 2019, R package version 1.5-8, <https://CRAN.R-project.org/package=quadprog>.
- [6] LINDO SYSTEMS, *LINGO: The Modeling Language and Optimizer*, LINDO Systems Inc., Chicago, 2020, disponible en <https://www.lindo.com/downloads/PDF/LINGO.pdf>.
- [7] IBM ILOG CPLEX OPTIMIZATION STUDIO, *CPLEX User's Manual*, disponible en https://www.ibm.com/docs/en/SSSA5P_12.8.0/ilog.odms.studio.help/pdf/usrcplex.pdf, accedido en junio de 2021.
- [8] JOHN W. EATON AND DAVID BATEMAN AND SOREN HAUBERG AND RIK WEHBRING, *GNU Octave. Version 5.1.0 manual: a high-level interactive language for numerical computations*, 2019 disponible en <https://www.gnu.org/software/octave/doc/v5.1.0/>.
- [9] GRADO DE MATEMÁTICAS, *Apuntes de la asignatura Investigación Operativa*, Universidad de Zaragoza, 2018-2019.

Anexos

Anexo A

Conceptos básicos

En este Anexo se presentan las funciones cuadráticas y convexas sobre las que trabajaremos y algunas propiedades importantes de estas, también se definen las direcciones conjugadas, que darán la estructura y el correcto funcionamiento a los algoritmos, y por último se describen los resultados necesarios para algunas demostraciones que desarrollaremos en el trabajo.

A.1. Funciones cuadráticas y funciones convexas

Sea $\mathbf{x} = (x_1 \ \cdots \ x_n)^t \in \mathbb{R}^n$, una función cuadrática general de n variables puede escribirse como

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n c_i x_i + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \gamma_{ij} x_i x_j,$$

donde $c_i, \gamma_{ij} \in \mathbb{R}$. Podemos asumir sin pérdida de generalidad que $\gamma_{ij} = \gamma_{ji}$, y sino basta reemplazar ambas cantidades por $\frac{\gamma_{ij} + \gamma_{ji}}{2}$.

Sean $\mathbf{c} = (c_1 \ \cdots \ c_n)^t$ y $C = (\gamma_{ij})_{n \times n}$ matriz simétrica. La fórmula anterior puede escribirse en forma matricial como

$$f(\mathbf{x}) = \mathbf{c}^t \mathbf{x} + \frac{1}{2} \mathbf{x}^t C \mathbf{x}.$$

Denotamos con $g(\mathbf{x})$ al gradiente de f en \mathbf{x} , $g(\mathbf{x}) = \left(\frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_1} \ \cdots \ \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_n} \right)^t$, que toma la forma $g(\mathbf{x}) = \mathbf{c} + C\mathbf{x}$, y con $H(\mathbf{x})$ a la matriz Hessiana de f en \mathbf{x} , $H(\mathbf{x}) = (h_{ij})_{n \times n}$, donde $h_{ij} = \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_i \partial x_j}$. Es directo ver que $H(\mathbf{x}) = C$.

Definición 13. Dado $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^n$, la *serie de Taylor* de f entorno a \mathbf{x}_0 es

$$f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}_0) + g(\mathbf{x}_0)^t (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) + \frac{1}{2} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)^t C (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0).$$

Calculando el gradiente de f a partir de esta obtenemos la expresión

$$g(\mathbf{x}) = g(\mathbf{x}_0) + C(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0). \tag{A.1}$$

Definición 14. Una función $f : S \rightarrow \mathbb{R}$ con $\emptyset \neq S \subseteq \mathbb{R}^n$ convexo es una función *convexa* sobre S si $\forall \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in S$ se cumple $f(\sigma \mathbf{x}_1 + (1 - \sigma) \mathbf{x}_2) \leq \sigma f(\mathbf{x}_1) + (1 - \sigma) f(\mathbf{x}_2) \ \forall \sigma \in (0, 1)$.

Definición 15. En las condiciones de la definición anterior, una función es *estrictamente convexa* si la desigualdad es estricta.

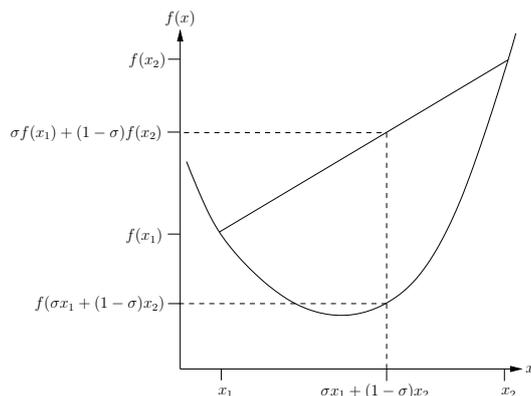


Figura A.1: Dibujo de una función convexa, el segmento que une las imágenes de dos puntos cualesquiera siempre está en el epígrafo de la función.

Definición 16. Una matriz simétrica $C_{n \times n}$ se dice que es *semidefinida positiva* si $\mathbf{s}^t C \mathbf{s} \geq 0 \forall \mathbf{s} \in \mathbb{R}^n$ y es *definida positiva* si $\mathbf{s}^t C \mathbf{s} > 0 \forall \mathbf{s} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{s} \neq \mathbf{0}$.

Teorema A.1 (Caracterización de funciones cuadráticas convexas). Sea $f(\mathbf{x}) = \mathbf{c}^t \mathbf{x} + \frac{1}{2} \mathbf{x}^t C \mathbf{x}$. Entonces:

- f es convexa $\iff \mathbf{s}^t C \mathbf{s} \geq 0 \forall \mathbf{s} \in \mathbb{R}^n$.
- f es estrictamente convexa $\iff \mathbf{s}^t C \mathbf{s} > 0 \forall \mathbf{s} \neq \mathbf{0}$.

Teorema A.2 (Segunda caracterización de funciones cuadráticas convexas). Sea $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ una función cuadrática. Entonces:

- f es convexa $\iff f(\mathbf{x}) \geq f(\mathbf{x}_0) + g(\mathbf{x}_0)^t (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \quad \forall \mathbf{x}, \mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^n$.
- f es estrictamente convexa $\iff f(\mathbf{x}) > f(\mathbf{x}_0) + g(\mathbf{x}_0)^t (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \quad \forall \mathbf{x}, \mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^n$ con $\mathbf{x} \neq \mathbf{x}_0$.

Dem. Sean $\mathbf{x}, \mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^n$. De la serie de Taylor de f entorno a \mathbf{x}_0 tenemos

$$f(\mathbf{x}) - f(\mathbf{x}_0) - g(\mathbf{x}_0)^t (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) = \frac{1}{2} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)^t C (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0).$$

De la caracterización del teorema A.1 tenemos las siguientes equivalencias:

- f es convexa $\iff \mathbf{s}^t C \mathbf{s} \geq 0 \forall \mathbf{s} \in \mathbb{R}^n \iff (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)^t C (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \geq 0 \forall \mathbf{x}, \mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^n \iff f(\mathbf{x}) \geq f(\mathbf{x}_0) + g(\mathbf{x}_0)^t (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \forall \mathbf{x}, \mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^n$.
- f es estrictamente convexa $\iff \mathbf{s}^t C \mathbf{s} > 0 \forall \mathbf{s} \neq \mathbf{0} \iff (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)^t C (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) > 0 \forall \mathbf{x} \neq \mathbf{x}_0 \iff f(\mathbf{x}) > f(\mathbf{x}_0) + g(\mathbf{x}_0)^t (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \forall \mathbf{x} \neq \mathbf{x}_0$.

□

Observación. Como $f(\mathbf{x}_0) + g(\mathbf{x}_0)^t (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)$ es la aproximación lineal a f en \mathbf{x}_0 , f es convexa \iff su aproximación lineal está siempre por debajo de f , y puede verse en la figura A.2.

Lema A.3. Sea $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ una función convexa, entonces se cumple que:

- Si $\exists x'$ mínimo de $f \implies f$ es no creciente en $(-\infty, x')$ y no decreciente en $(x', +\infty)$.
- Si $f(x) \xrightarrow{x \rightarrow +\infty} -\infty \implies f$ es no creciente en \mathbb{R} .

Dem. Veamos la demostración de los dos casos por reducción al absurdo.

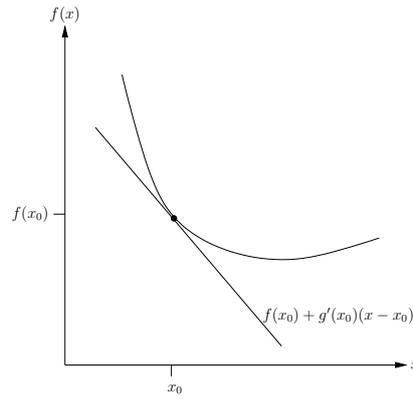


Figura A.2: Aproximación lineal de una función cuadrática convexa en el hipógrafo.

a) Supongamos que $\exists x'$ mínimo de f y que f no es no creciente en $(-\infty, x')$, es decir, en algún momento es creciente, y podemos tomar $x_1 < x_2 < x'$ con $f(x_1) < f(x_2)$.

Por convexidad $\exists \sigma \in (0, 1)$ tal que $x_2 = \sigma x_1 + (1 - \sigma)x'$, y por ser f convexa, $f(x_2) \leq \sigma f(x_1) + (1 - \sigma)f(x') < f(x_1)$, que contradice lo que habíamos supuesto. Por tanto, f es no creciente $\forall x \leq x'$.

Análogamente se prueba que f es no decreciente en $(x', +\infty)$.

b) Supongamos que $f(x) \xrightarrow{x \rightarrow +\infty} -\infty$ y que f no es no creciente. Como antes, podemos tomar $x_1 < x_2$ con $f(x_1) < f(x_2)$ y, como $f \rightarrow -\infty$, podemos tomar un x_3 tal que $f(x_3) < f(x_1)$.

Por convexidad $\exists \sigma \in (0, 1)$ tal que $x_2 = \sigma x_1 + (1 - \sigma)x_3$, y por ser f convexa, $f(x_2) \leq \sigma f(x_1) + (1 - \sigma)f(x_3) < f(x_1)$ lo que contradice nuestra hipótesis, y por tanto, f es no creciente en \mathbb{R} .

□

A.2. Direcciones conjugadas

Definición 17. Dada una matriz $C_{n \times n}$ simétrica, se dice que los vectores $\mathbf{s}_0, \mathbf{s}_1, \dots, \mathbf{s}_k \in \mathbb{R}^n$ son *direcciones conjugadas* respecto a C si

$$\begin{aligned} \mathbf{s}_i^t C \mathbf{s}_i &> 0 \quad \forall i = 0, \dots, k, \text{ y} \\ \mathbf{s}_i^t C \mathbf{s}_j &= 0 \quad \forall i \neq j, i, j = 0, \dots, k. \end{aligned}$$

Además, si $\mathbf{s}_i^t C \mathbf{s}_i = 1 \quad \forall i = 0, \dots, k \implies \mathbf{s}_0, \dots, \mathbf{s}_k$ son *direcciones conjugadas normalizadas*.

Nota. Un conjunto de direcciones conjugadas puede normalizarse reemplazando cada \mathbf{s}_i por $\frac{1}{\sqrt{\mathbf{s}_i^t C \mathbf{s}_i}} \mathbf{s}_i$.

Lema A.4. Si $\mathbf{s}_0, \dots, \mathbf{s}_k$ son direcciones conjugadas $\implies \mathbf{s}_0, \dots, \mathbf{s}_k$ son linealmente independientes.

Dem. Supongamos que $\mathbf{s}_0, \dots, \mathbf{s}_k$ son linealmente dependientes. Entonces existen $\lambda_0, \dots, \lambda_k \in \mathbb{R}$ tales que $\lambda_0 \mathbf{s}_0 + \dots + \lambda_k \mathbf{s}_k = \mathbf{0}$ con algún $\lambda_i \neq 0$.

Supongamos que $\lambda_i \neq 0$. Multiplicando la ecuación anterior por $\mathbf{s}_i^t C$ da

$$\lambda_0 \mathbf{s}_i^t C \mathbf{s}_0 + \dots + \lambda_i \mathbf{s}_i^t C \mathbf{s}_i + \dots + \lambda_k \mathbf{s}_i^t C \mathbf{s}_k = 0.$$

Como $\mathbf{s}_0, \dots, \mathbf{s}_k$ son direcciones conjugadas, todos los términos son 0 excepto el que tiene el índice i , luego $\lambda_i \mathbf{s}_i^t C \mathbf{s}_i = 0$. Pero $\mathbf{s}_i^t C \mathbf{s}_i > 0$, por lo tanto $\lambda_i = 0$ y llegamos a la contradicción que prueba que $\mathbf{s}_0, \dots, \mathbf{s}_k$ son linealmente independientes. □

Corolario. No puede haber más de n direcciones conjugadas para un problema de dimensión n .

A.3. Teorema de la Descomposición Ortogonal

Teorema A.5 (Teorema de la Descomposición Ortogonal). *Dados $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_r \in \mathbb{R}^n$, con $r \leq n$, entonces cualquier vector $\mathbf{g} \in \mathbb{R}^n$ puede escribirse como $\mathbf{g} = \mathbf{g}_1 + \mathbf{g}_2$, donde $\mathbf{g}_1 \in \langle \mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_r \rangle$ y \mathbf{g}_2 es ortogonal a $\langle \mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_r \rangle$. Además, \mathbf{g}_1 y \mathbf{g}_2 están unívocamente determinados.*

Dem. Sea $\mathbf{b}_1, \dots, \mathbf{b}_k$ una base de $\langle \mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_r \rangle$. Llamamos Q al complemento ortogonal de $\langle \mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_r \rangle$, es decir, $Q = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{a}_i^t \mathbf{x} = 0, i = 1, \dots, r\}$.

Como $\dim \langle \mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_r \rangle = k$, la dimensión de Q es $n - k$, y si $\mathbf{b}_{k+1}, \dots, \mathbf{b}_n$ es una base de Q , entonces $\mathbf{b}_1, \dots, \mathbf{b}_n$ genera \mathbb{R}^n . Así, para cualquier $\mathbf{g} \in \mathbb{R}^n$ existen $\theta_1, \dots, \theta_n \in \mathbb{R}$ tales que $\mathbf{g} = \theta_1 \mathbf{b}_1 + \dots + \theta_n \mathbf{b}_n$.

Definiendo $\mathbf{g}_1 = \sum_{i=1}^k \theta_i \mathbf{b}_i$ y $\mathbf{g}_2 = \sum_{i=k+1}^n \theta_i \mathbf{b}_i$ se tiene el resultado. \square

A.4. Propiedades de las matrices

Sea una matriz $D_{n \times n}$ no singular con vectores fila \mathbf{d}_i^t y su inversa con vectores columna \mathbf{c}_j . Como $DD^{-1} = I_n$, tenemos

$$\begin{bmatrix} \mathbf{d}_1^t \\ \mathbf{d}_2^t \\ \vdots \\ \mathbf{d}_n^t \end{bmatrix} [\mathbf{c}_1 \mid \mathbf{c}_2 \mid \dots \mid \mathbf{c}_n] = \begin{bmatrix} \mathbf{d}_1^t \mathbf{c}_1 & \mathbf{d}_1^t \mathbf{c}_2 & \dots & \mathbf{d}_1^t \mathbf{c}_n \\ \mathbf{d}_2^t \mathbf{c}_1 & \mathbf{d}_2^t \mathbf{c}_2 & \dots & \mathbf{d}_2^t \mathbf{c}_n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{d}_n^t \mathbf{c}_1 & \mathbf{d}_n^t \mathbf{c}_2 & \dots & \mathbf{d}_n^t \mathbf{c}_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix},$$

y comparando términos en la última igualdad se tiene

$$\mathbf{d}_i^t \mathbf{c}_j = \begin{cases} 1 & \text{si } i = j \\ 0 & \text{si } i \neq j \end{cases}. \quad (\text{A.2})$$

Lema A.6. *Sea D una matriz $n \times n$ no singular con $D^t = [\mathbf{d}_1 \mid \dots \mid \mathbf{d}_n]$ y $D^{-1} = [\mathbf{c}_1 \mid \dots \mid \mathbf{c}_n]$.*

Un vector $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^n$ cualquiera puede expresarse como combinación lineal de las columnas de D^t en términos de las columnas de D^{-1} y \mathbf{d} como sigue

$$\mathbf{d} = (\mathbf{d}^t \mathbf{c}_1) \mathbf{d}_1 + \dots + (\mathbf{d}^t \mathbf{c}_n) \mathbf{d}_n.$$

Dem. Dado $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^n$, queremos expresarlo como combinación lineal de las columnas de D^t .

Sean $\mathbf{x} = (x_1 \ \dots \ x_n)^t$ los coeficientes de esta combinación lineal, entonces

$$\mathbf{d} = x_1 \mathbf{d}_1 + \dots + x_n \mathbf{d}_n = [\mathbf{d}_1 \mid \dots \mid \mathbf{d}_n] \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = D^t \mathbf{x},$$

trasponiendo $\mathbf{x}^t D = \mathbf{d}^t \implies \mathbf{x}^t = \mathbf{d}^t D^{-1}$, desarrollando esta igualdad,

$$(x_1 \ \dots \ x_n) = \mathbf{d}^t [\mathbf{c}_1 \mid \dots \mid \mathbf{c}_n] = (\mathbf{d}^t \mathbf{c}_1 \ \dots \ \mathbf{d}^t \mathbf{c}_n),$$

comparando componentes se tiene que $x_i = \mathbf{d}^t \mathbf{c}_i$ para $i = 1, \dots, n$ y sustituyendo en la primera igualdad obtenemos la identidad buscada

$$\mathbf{d} = (\mathbf{d}^t \mathbf{c}_1) \mathbf{d}_1 + \dots + (\mathbf{d}^t \mathbf{c}_n) \mathbf{d}_n. \quad \square$$

Anexo B

Métodos para la actualización de inversas y ejemplos para el Algoritmo 1

B.1. Métodos de actualización de matrices inversas

Presentamos los métodos de actualización de matrices utilizados en los algoritmos. En estos, conocemos una matriz y su inversa, la matriz es modificada cambiando una única fila, y se desea encontrar la inversa de la matriz modificada. Una forma eficiente de hacer esto es expresar la nueva inversa en términos de la vieja inversa y la fila modificada.

B.1.1. Método Φ

Sea $D^t = \left[\mathbf{d}_1 \mid \cdots \mid \mathbf{d}_n \right]$ una matriz no singular y sea $D^{-1} = \left[\mathbf{c}_1 \mid \cdots \mid \mathbf{c}_n \right]$.

Dados $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^n$ y $k \in \mathbb{N}$ tales que $\mathbf{d}^t \mathbf{c}_k \neq 0$.

Definimos $\hat{D}^t = \left[\mathbf{d}_1 \mid \cdots \mid \mathbf{d}_{k-1} \mid \mathbf{d} \mid \mathbf{d}_{k+1} \mid \cdots \mid \mathbf{d}_n \right]$, que es la matriz obtenida de D^t reemplazando la columna k por \mathbf{d} .

Denotamos $\Phi(D^{-1}, \mathbf{d}, k) \equiv \hat{D}^{-1}$.

Una forma de calcular $\hat{D}^{-1} = \left[\hat{\mathbf{c}}_1 \mid \cdots \mid \hat{\mathbf{c}}_n \right]$ es:

$$\hat{\mathbf{c}}_i = \mathbf{c}_i - \frac{\mathbf{d}^t \mathbf{c}_i}{\mathbf{d}^t \mathbf{c}_k} \mathbf{c}_k \quad \forall i = 1, \dots, n, i \neq k, \text{ y}$$
$$\hat{\mathbf{c}}_k = \frac{1}{\mathbf{d}^t \mathbf{c}_k} \mathbf{c}_k.$$

B.1.2. Método Φ_1

Sean $D^t = \left[\mathbf{d}_1 \mid \cdots \mid \mathbf{d}_n \right]$, $D^{-1} = \left[\mathbf{c}_1 \mid \cdots \mid \mathbf{c}_n \right]$ y $J = \{\alpha_1, \dots, \alpha_n\}$.

Dados $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^n$ y $k \in \mathbb{N}$ tales que $\mathbf{d}^t \mathbf{c}_k \neq 0$ y $\mathbf{d}^t \mathbf{c}_i = 0 \quad \forall i$ con $\alpha_i = -1$.

Sea $\hat{D}^t = \left[\mathbf{d}_1 \mid \cdots \mid \mathbf{d}_{k-1} \mid \mathbf{d} \mid \mathbf{d}_{k+1} \mid \cdots \mid \mathbf{d}_n \right]$.

Denotamos $\Phi_1(D^{-1}, \mathbf{d}, k, J) \equiv \hat{D}^{-1}$.

Una forma de calcular $\hat{D}^{-1} = \left[\hat{\mathbf{c}}_1 \mid \cdots \mid \hat{\mathbf{c}}_n \right]$ es:

$$\hat{\mathbf{c}}_i = \mathbf{c}_i - \frac{\mathbf{d}^t \mathbf{c}_i}{\mathbf{d}^t \mathbf{c}_k} \mathbf{c}_k \quad \forall i \text{ con } i \neq k \text{ y } \alpha_i \neq -1,$$
$$\hat{\mathbf{c}}_k = \frac{1}{\mathbf{d}^t \mathbf{c}_k} \mathbf{c}_k, \text{ y}$$
$$\hat{\mathbf{c}}_i = \mathbf{c}_i \quad \forall i \text{ con } \alpha_i = -1.$$

Nota. Este método difiere del anterior solamente en que este suprime la actualización de las columnas de \hat{D}^{-1} que son direcciones conjugadas que ya hemos visto que no cambian.

B.2. Ejemplos

Mostramos dos ejemplos de aplicación del Algoritmo 1 para los cuales la finalización ocurre de diferente manera a la presentada en el ejemplo del Capítulo 1.

Ejemplo 4.

$$\text{minimizar: } -2x_1 - 4x_2 - 6x_3 + \frac{1}{2}(2x_1^2 + 8x_2^2 + 18x_3^2 + 8x_1x_2 + 12x_1x_3 + 24x_2x_3)$$

$$\mathbf{c} = \begin{pmatrix} -2 \\ -4 \\ -6 \end{pmatrix} \text{ y } C = \begin{pmatrix} 2 & 4 & 6 \\ 4 & 8 & 12 \\ 6 & 12 & 18 \end{pmatrix}$$

$$\text{Inicialización: } \mathbf{x}_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, J_0 = \{0, 0, 0\}, D_0^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, f(\mathbf{x}_0) = 0, \mathbf{g}_0 = \begin{pmatrix} -2 \\ -4 \\ -6 \end{pmatrix}, j = 0.$$

Iteración 0

$$\text{Paso 1: } |\mathbf{g}_0^t \mathbf{c}_{k0}| = \max\{|-2|, |-4|, |-6|\} = 6 \implies k = 3.$$

$$\text{Como } \mathbf{g}_0^t \mathbf{c}_{30} = -6 < 0 \implies \mathbf{s}_0 = -\mathbf{c}_{30} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

$$\text{Paso 2: } \mathbf{s}_0^t C \mathbf{s}_0 = 18 > 0 \implies \sigma_0 = \frac{1}{3}.$$

$$\text{Paso 3: } \mathbf{x}_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1/3 \end{pmatrix}, f(\mathbf{x}_1) = -1, \mathbf{g}_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \implies \text{STOP con solución óptima } \mathbf{x}_1.$$

Nota. Si no hubiéramos añadido el STOP en el Paso 3 el algoritmo hubiera continuado de la siguiente manera:

$$\text{Paso 3: } \mathbf{d}_0 = \begin{pmatrix} -\sqrt{2} \\ -2\sqrt{2} \\ -3\sqrt{2} \end{pmatrix}, D_1^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1/3 & -2/3 & -\sqrt{2}/6 \end{pmatrix}, J_1 = \{0, 0, -1\}, j = 1.$$

Iteración 1

$$\text{Paso 1: } |\mathbf{g}_1^t \mathbf{c}_{k1}| = \max\{|0|, |0|\} = 0 \implies \text{STOP con solución óptima } \mathbf{x}_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1/3 \end{pmatrix}.$$

Ejemplo 5.

$$\text{minimizar: } 3x_1 + 5x_2 + \frac{1}{2}(2x_1^2 + 8x_2^2 + 8x_1x_2)$$

$$\mathbf{c} = \begin{pmatrix} 3 \\ 5 \end{pmatrix} \text{ y } C = \begin{pmatrix} 2 & 4 \\ 4 & 8 \end{pmatrix}$$

$$\text{Inicialización: } \mathbf{x}_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, J_0 = \{0, 0\}, D_0^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, f(\mathbf{x}_0) = 0, \mathbf{g}_0 = \begin{pmatrix} 3 \\ 5 \end{pmatrix}, j = 0.$$

Iteración 0

$$\text{Paso 1: } |\mathbf{g}_0^t \mathbf{c}_{k0}| = \max\{|3|, |5|\} = 5 \implies k = 2.$$

$$\text{Como } \mathbf{g}_0^t \mathbf{c}_{20} = 5 > 0 \implies \mathbf{s}_0 = \mathbf{c}_{20} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

$$\text{Paso 2: } \mathbf{s}_0^t C \mathbf{s}_0 = 8 > 0 \implies \sigma_0 = \frac{5}{8}.$$

Paso 3: $\mathbf{x}_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ -5/8 \end{pmatrix}$, $f(\mathbf{x}_1) = -\frac{25}{16}$, $\mathbf{g}_1 = \begin{pmatrix} 1/2 \\ 0 \end{pmatrix}$, $\mathbf{d}_0 = \begin{pmatrix} \sqrt{2} \\ 2\sqrt{2} \end{pmatrix}$, $D_1^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -1/2 & \sqrt{2}/4 \end{pmatrix}$,
 $J_1 = \{0, -1\}$, $j = 1$.

Iteración 1

Paso 1: $|\mathbf{g}_1^t \mathbf{c}_{k1}| = \max \{|\frac{1}{2}|\} = \frac{1}{2} \implies k = 1$.

Como $\mathbf{g}_1^t \mathbf{c}_{11} = \frac{1}{2} > 0 \implies \mathbf{s}_1 = \mathbf{c}_{11} = \begin{pmatrix} 1 \\ -1/2 \end{pmatrix}$.

Paso 2: $\mathbf{s}_1^t \mathbf{C} \mathbf{s}_1 = 0 \implies \text{STOP}$, el problema es no acotado inferiormente.

Anexo C

Demostraciones del Capítulo 2

C.1. Existencia y unicidad de la solución

Teorema 2.2 (Unicidad de la solución). *Sea \mathbf{x}_0 una solución óptima para el problema (2.1). Si f es estrictamente convexa $\implies \mathbf{x}_0$ es la única solución óptima.*

Dem. Supongamos que \mathbf{x}_1 es otra solución óptima y que $\mathbf{x}_1 \neq \mathbf{x}_0$. Por el teorema 2.1 tenemos que $A\mathbf{x}_0 = \mathbf{b}$ y $A\mathbf{x}_1 = \mathbf{b}$, y restando estas, $A(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0) = \mathbf{0}$.

Como \mathbf{x}_0 es óptima $\exists \mathbf{u} \in \mathbb{R}^r$ con $-g(\mathbf{x}_0) = A^t \mathbf{u}$, y se tiene que $g(\mathbf{x}_0)^t (\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0) = -\mathbf{u}^t A(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0) = \mathbf{0}$. Con esto, la serie de Taylor de f entorno a \mathbf{x}_0 es $f(\mathbf{x}_1) = f(\mathbf{x}_0) + \frac{1}{2}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0)^t C(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0)$.

Como \mathbf{x}_1 y \mathbf{x}_0 son las dos óptimas, $f(\mathbf{x}_1) = f(\mathbf{x}_0)$, luego $(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0)^t C(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0) = 0$ que, como f es estrictamente convexa, por la caracterización del teorema A.1 implica que $(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0) = \mathbf{0}$, luego $\mathbf{x}_1 = \mathbf{x}_0$ y por tanto \mathbf{x}_0 es la única solución óptima. \square

Teorema 2.3 (Existencia de la solución). *Si $\exists \gamma \in \mathbb{R}$ tal que $f(\mathbf{x}) = \mathbf{c}^t \mathbf{x} + \frac{1}{2} \mathbf{x}^t C \mathbf{x} \geq \gamma \quad \forall \mathbf{x} \in R$ y $R \neq \emptyset \implies$ existe una solución óptima para el problema (2.1).*

Dem. Observar primero que, por el teorema 2.1, una solución óptima \mathbf{x}_0 para el problema (2.1) debe satisfacer $A\mathbf{x}_0 = \mathbf{b}$ y $-g(\mathbf{x}_0) = A^t \mathbf{u}$. Como $g(\mathbf{x}_0) = \mathbf{c} + C\mathbf{x}_0$, la segunda condición es equivalente a $A^t \mathbf{u} + C\mathbf{x}_0 = -\mathbf{c}$. Por lo tanto el problema puede resolverse resolviendo el siguiente sistema de $n+r$ ecuaciones lineales con $n+r$ incógnitas

$$\begin{bmatrix} C & A^t \\ A & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{x}_0 \\ \mathbf{u} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\mathbf{c} \\ \mathbf{b} \end{bmatrix}.$$

Sea $\mathbf{x}_0 \in R$. Llamamos

$$H = \begin{bmatrix} C & A^t \\ A & 0 \end{bmatrix} \text{ y } \mathbf{h} = \begin{bmatrix} -\mathbf{c} \\ \mathbf{b} \end{bmatrix}.$$

Por el teorema A.5 podemos escribir $\mathbf{h} = \mathbf{h}_1 + \mathbf{h}_2$, donde $\mathbf{h}_1 = H\mathbf{w}$ para algún $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^{n+r}$, y $H^t \mathbf{h}_2 = \mathbf{0}$. Dividiendo el vector \mathbf{h}_2 en bloques como $\mathbf{h}_2 = (\mathbf{s}^t, \mathbf{v}^t)^t$, donde $\mathbf{s} \in \mathbb{R}^n$ y $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^r$, podemos escribir las partes de $H^t \mathbf{h}_2 = \mathbf{0}$ obteniendo

$$\begin{aligned} C\mathbf{s} + A^t \mathbf{v} &= \mathbf{0}, \\ A\mathbf{s} &= \mathbf{0}. \end{aligned}$$

Multiplicando la primera igualdad por \mathbf{s}^t tenemos $\mathbf{s}^t C\mathbf{s} + \mathbf{s}^t A^t \mathbf{v} = \mathbf{0} \implies \mathbf{s}^t C\mathbf{s} = \mathbf{0}$. Si multiplicamos la primera igualdad por \mathbf{x}_0^t da $\mathbf{x}_0^t C\mathbf{s} + \mathbf{x}_0^t A^t \mathbf{v} = \mathbf{0} \implies \mathbf{x}_0^t C\mathbf{s} = -(\mathbf{x}_0^t A^t) \mathbf{v}$. Como $g(\mathbf{x}_0) = \mathbf{c} + C\mathbf{x}_0$ y $A\mathbf{x}_0 = \mathbf{b}$, tenemos $g(\mathbf{x}_0)^t \mathbf{s} = \mathbf{c}^t \mathbf{s} + \mathbf{x}_0^t C\mathbf{s} = \mathbf{c}^t \mathbf{s} - \mathbf{b}^t \mathbf{v}$. De la definición de \mathbf{h} y \mathbf{h}_2 , $\mathbf{h}^t \mathbf{h}_2 = -(\mathbf{c}^t \mathbf{s} - \mathbf{b}^t \mathbf{v})$. Además, el teorema A.5 afirma que $\mathbf{h}^t \mathbf{h}_2 = \mathbf{h}_2^t \mathbf{h}_2$. En consecuencia, $g(\mathbf{x}_0)^t \mathbf{s} = -\mathbf{h}_2^t \mathbf{h}_2$.

Para cualquier $\sigma \in \mathbb{R}$, $A(\mathbf{x}_0 + \sigma \mathbf{s}) = A\mathbf{x}_0 = \mathbf{b}$, luego $\mathbf{x}_0 + \sigma \mathbf{s} \in R$. Con todo lo anterior, la serie de Taylor de f entorno a \mathbf{x}_0 queda $f(\mathbf{x}_0 + \sigma \mathbf{s}) = f(\mathbf{x}_0) + \sigma g(\mathbf{x}_0)^t \mathbf{s} + \frac{1}{2} \sigma^2 \mathbf{s}^t C \mathbf{s} = f(\mathbf{x}_0) - \sigma \mathbf{h}_2^t \mathbf{h}_2$.

Ahora, si $\mathbf{h}_2 \neq \mathbf{0}$, entonces $\mathbf{h}_2^t \mathbf{h}_2 > 0$ por ser la suma de cuadrados de las componentes de \mathbf{h}_2 , y se tiene que $f(\mathbf{x}_0 + \sigma \mathbf{s}) \xrightarrow{\sigma \rightarrow +\infty} -\infty$, contradiciendo la hipótesis de que f está acotada inferiormente en R .

En consecuencia, $\mathbf{h}_2 = \mathbf{0}$ y así $\mathbf{h} = \mathbf{h}_1 = H\mathbf{w}$. Dividiendo \mathbf{w} como $\mathbf{w} = (\mathbf{x}_1^t, \mathbf{u}^t)^t$, donde $\mathbf{x}_1 \in \mathbb{R}^n$ y $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^r$, las ecuaciones que definen \mathbf{h} pueden escribirse como

$$\begin{aligned} C\mathbf{x}_1 + A^t\mathbf{u} &= -\mathbf{c}, \\ A\mathbf{x}_1 &= \mathbf{b}. \end{aligned}$$

Así hemos probado la existencia de un $\mathbf{x}_1 \in \mathbb{R}^n$ cumpliendo $A\mathbf{x}_1 = \mathbf{b}$ y $-g(\mathbf{x}_1) = A^t\mathbf{u}$. Solo falta ver que \mathbf{x}_1 es óptimo. Sea $\mathbf{x} \in R$, como $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ y $A\mathbf{x}_1 = \mathbf{b}$, restando, $A(\mathbf{x} - \mathbf{x}_1) = \mathbf{0}$, entonces $g(\mathbf{x}_1)^t(\mathbf{x} - \mathbf{x}_1) = -\mathbf{u}^t A(\mathbf{x} - \mathbf{x}_1) = \mathbf{0}$. Con esto, la serie de Taylor de f entorno a \mathbf{x}_1 es $f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}_1) + \frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_1)^t C(\mathbf{x} - \mathbf{x}_1)$.

Si fuera $(\mathbf{x} - \mathbf{x}_1)^t C(\mathbf{x} - \mathbf{x}_1) < 0$, entonces, como $A(\mathbf{x}_1 + \sigma(\mathbf{x} - \mathbf{x}_1)) = A\mathbf{x}_1 = \mathbf{b}$, es decir, $\mathbf{x}_1 + \sigma(\mathbf{x} - \mathbf{x}_1) \in R \forall \sigma \in \mathbb{R}$, se tendría que $f(\mathbf{x}_1 + \sigma(\mathbf{x} - \mathbf{x}_1)) = f(\mathbf{x}_1) + \frac{1}{2}\sigma^2(\mathbf{x} - \mathbf{x}_1)^t C(\mathbf{x} - \mathbf{x}_1) \xrightarrow{\sigma \rightarrow +\infty} -\infty$ contradiciendo la hipótesis del teorema. En consecuencia, $(\mathbf{x} - \mathbf{x}_1)^t C(\mathbf{x} - \mathbf{x}_1) \geq 0 \forall \mathbf{x} \in R$, y así $f(\mathbf{x}_1) \leq f(\mathbf{x}) \forall \mathbf{x} \in R$, por definición, \mathbf{x}_1 es óptimo. \square

C.2. Teorema de convergencia del Algoritmo 2

Veamos que el algoritmo converge en $j \leq n - r$ iteraciones. Observar que el Algoritmo 2 difiere del Algoritmo 1 únicamente en los datos requeridos para la inicialización. En consecuencia, el lema 1.6 puede aplicarse al Algoritmo 2 igual que al Algoritmo 1.

Teorema 2.4 (Convergencia del Algoritmo 2). *La finalización del algoritmo ocurre antes de $j \leq n - r$ iteraciones con una de las dos situaciones:*

- \mathbf{x}_j es la solución óptima para el problema (2.1). En este caso, los multiplicadores de las restricciones están dados por $u_{\alpha_{ij}} = -\mathbf{g}_j^t \mathbf{c}_{ij} \forall i$ con $1 \leq \alpha_{ij} \leq r$.
- El problema es no acotado inferiormente. En este caso, el algoritmo termina con \mathbf{x}_j y \mathbf{s}_j tales que $A(\mathbf{x}_j - \sigma \mathbf{s}_j) = \mathbf{b} \forall \sigma \geq 0$ y $f(\mathbf{x}_j - \sigma \mathbf{s}_j) \xrightarrow{\sigma \rightarrow +\infty} -\infty$.

Dem. a) Hay 2 puntos en el algoritmo en los cuales la finalización puede ocurrir con el mensaje " \mathbf{x}_j solución óptima obtenida". Probemos la optimalidad de \mathbf{x}_j en estos dos casos.

En la iteración j hay $n - r - j$ elementos de J_j que tienen valor 0. En cada una de las iteraciones siguientes, exactamente uno de ellos es cambiado a -1 . Por lo tanto, si el algoritmo continúa por $n - r$ iteraciones, entonces $\alpha_{ij} \neq 0 \forall i = 1, \dots, n$ y el algoritmo finaliza.

Para cada iteración $j \geq 0$, aplicando el lema A.6 a las matrices D_j^t , D_j^{-1} y al vector $-\mathbf{g}_j$, tenemos que

$$-\mathbf{g}_j = \sum_{\alpha_{ij}=-1} (-\mathbf{g}_j^t \mathbf{c}_{ij}) \mathbf{d}_{ij} + \sum_{\alpha_{ij}=0} (-\mathbf{g}_j^t \mathbf{c}_{ij}) \mathbf{d}_{ij} + \sum_{1 \leq \alpha_{ij} \leq r} (-\mathbf{g}_j^t \mathbf{c}_{ij}) \mathbf{d}_{ij}. \quad (\text{C.1})$$

Por el lema 1.6 a), el primer sumando desaparece. Si el algoritmo termina con " \mathbf{x}_j solución óptima", entonces, o no hay α_{ij} con valor 0, o del Paso 1, $\mathbf{g}_j^t \mathbf{c}_{ij} = 0 \forall i$ con $\alpha_{ij} = 0$. En cualquiera de los dos casos el segundo sumando desaparece y (C.1) se reduce a

$$-\mathbf{g}_j = \sum_{1 \leq \alpha_{ij} \leq r} (-\mathbf{g}_j^t \mathbf{c}_{ij}) \mathbf{d}_{ij}.$$

Notar que, por la definición de D_j^t , es $\mathbf{d}_{ij} = \mathbf{a}_{\alpha_{ij}} \forall i$ con $1 \leq \alpha_{ij} \leq r$, luego si definimos $u_{\alpha_{ij}} = -\mathbf{g}_j^t \mathbf{c}_{ij} \forall i$ con $1 \leq \alpha_{ij} \leq r$, (C.1) se convierte en $-\mathbf{g}_j = u_1 \mathbf{a}_1 + \dots + u_r \mathbf{a}_r$, que por el teorema 2.1 implica que \mathbf{x}_j es la solución óptima.

- Por último, si la finalización ocurre con el mensaje de que el problema es no acotado inferiormente, entonces \mathbf{s}_j satisface (2.2), y $\mathbf{x}_j - \sigma \mathbf{s}_j \in R \forall \sigma \geq 0$. Además, por el Paso 2, $\mathbf{s}_j^t C \mathbf{s}_j = 0$, y como $\mathbf{g}_j^t \mathbf{s}_j > 0$,

de la serie de Taylor se tiene que $f(\mathbf{x}_j - \sigma \mathbf{s}_j) = f(\mathbf{x}_j) - \sigma \mathbf{g}_j^T \mathbf{s}_j \xrightarrow{\sigma \rightarrow +\infty} -\infty$ y, en efecto, el problema es no acotado inferiormente.

□

Anexo D

Demostraciones del Capítulo 3 y teoremas de unicidad

Como en el Anexo C, este Anexo contiene la demostración de la existencia de la solución para el Problema de Programación Cuadrática con restricciones de desigualdad y la de convergencia del Algoritmo 3. Además contiene el enunciado y demostración de un resultado que se utiliza para demostrar el teorema de existencia y otro resultado que da las condiciones necesarias y suficientes de punto cuasiestacionario. También incluye una sección donde se enuncian y demuestran todos los resultados correspondientes a la unicidad de soluciones que no se presentan en el Capítulo 3.

D.1. Existencia de la solución y condiciones necesarias y suficientes de punto cuasiestacionario

Definición 18. Un punto cuasiestacionario \mathbf{x}_0 es

- *no degenerado* si los gradientes de las restricciones activas en \mathbf{x}_0 son linealmente independientes.
- *degenerado* si los gradientes de las restricciones activas en \mathbf{x}_0 son linealmente dependientes.

Lema D.1. Si $\exists \gamma \in \mathbb{R}$ tal que $f(\mathbf{x}) \geq \gamma \quad \forall \mathbf{x} \in R$ y sea $\mathbf{x}_0 \in R \implies$ existe un punto cuasiestacionario $\tilde{\mathbf{x}}$ para el problema (3.1) tal que $f(\tilde{\mathbf{x}}) \leq f(\mathbf{x}_0)$.

Dem. Dado $\mathbf{x}_0 \in R$, consideramos el problema (3.2) sujeto a restricciones lineales de igualdad.

Podemos asumir sin pérdida de generalidad que los gradientes de las restricciones del problema (3.2) son linealmente independientes, ya que si $\{\mathbf{a}_i \mid i \in I(\mathbf{x}_0)\}$ son linealmente dependientes, podemos reemplazar $I(\mathbf{x}_0)$ por el mayor subconjunto de índices de las restricciones activas que deja igual la región factible del problema.

Podemos aplicar entonces el Algoritmo 2 al problema (3.2) con punto inicial \mathbf{x}_0 . Por el teorema 2.4 la finalización del algoritmo ocurrirá en un número finito de pasos con una de las dos situaciones:

- a) una solución óptima $\hat{\mathbf{x}}$,
- b) un punto $\hat{\mathbf{x}}$ y una dirección de búsqueda \mathbf{s}_0 tales que $f(\hat{\mathbf{x}} - \sigma \mathbf{s}_0) \xrightarrow{\sigma \rightarrow +\infty} -\infty$.

Discutimos estas dos posibilidades por separado.

Caso 1: solución óptima en $\hat{\mathbf{x}}$

Sea $\mathbf{s}_0 = \mathbf{x}_0 - \hat{\mathbf{x}}$ y sea σ_0 el tamaño de paso factible máximo para \mathbf{x}_0 y \mathbf{s}_0 , es decir, $\mathbf{x}_0 - \sigma \mathbf{s}_0 \in R \quad \forall \sigma \in [0, \sigma_0]$. Como $f(\mathbf{x}_0 - \sigma \mathbf{s}_0)$ es una función convexa en $\sigma \in [0, \sigma_0]$ que tiene el mínimo en σ_0 , por el lema A.3 a), $f(\mathbf{x}_0 - \sigma \mathbf{s}_0)$ es no creciente para $0 \leq \sigma \leq \sigma_0$.

- Si $\sigma_0 \geq 1$, entonces $\mathbf{x}_0 - 1 \cdot \mathbf{s}_0 \equiv \hat{\mathbf{x}} \in R$, con lo que $\hat{\mathbf{x}}$ es un punto cuasiestacionario con $f(\hat{\mathbf{x}}) \leq f(\mathbf{x}_0)$, por ser f no creciente para $0 \leq \sigma \leq \sigma_0$. En este caso hemos probado el lema con $\tilde{\mathbf{x}} = \hat{\mathbf{x}}$.

- Si $\sigma_0 < 1$, sea l el índice de la restricción que limita a σ_0 , esto es, $\sigma_0 = \frac{\mathbf{a}_l^t \mathbf{x}_0 - b_l}{\mathbf{a}_l^t \mathbf{s}_0}$.

Definimos $\mathbf{x}_1 = \mathbf{x}_0 - \sigma_0 \mathbf{s}_0$. Entonces $f(\mathbf{x}_1) \leq f(\mathbf{x}_0)$, por ser f no creciente para $0 \leq \sigma \leq \sigma_0$.

Además, por ser \mathbf{x}_0 y $\hat{\mathbf{x}}$ factibles para el problema (3.2) se tiene que $\mathbf{a}_i^t \mathbf{x}_0 = b_i$ y $\mathbf{a}_i^t \hat{\mathbf{x}} = b_i \forall i \in I(\mathbf{x}_0)$. Como $\mathbf{a}_i^t \mathbf{s}_0 < 0$, esto implica que $\{\mathbf{a}_i \mid i \in I(\mathbf{x}_0)\}$ junto con \mathbf{a}_l son linealmente independientes. Probemos esto último por reducción al absurdo. Supongamos que $\mathbf{a}_i, i \in I(\mathbf{x}_0)$ y \mathbf{a}_l son linealmente dependientes, es decir, existen $\lambda_i, i \in I(\mathbf{x}_0)$ y λ_l con, al menos, $\lambda_l \neq 0$ tales que

$$\sum_{i \in I(\mathbf{x}_0)} \lambda_i \mathbf{a}_i^t + \lambda_l \mathbf{a}_l^t = \mathbf{0}.$$

Multiplicando por \mathbf{s}_0 obtenemos

$$\sum_{i \in I(\mathbf{x}_0)} \lambda_i \mathbf{a}_i^t \mathbf{s}_0 + \lambda_l \mathbf{a}_l^t \mathbf{s}_0 = 0,$$

donde $\mathbf{a}_i^t \mathbf{s}_0 = \mathbf{a}_i^t \mathbf{x}_0 - \mathbf{a}_i^t \hat{\mathbf{x}} = b_i - b_i = 0 \forall i \in I(\mathbf{x}_0)$, con lo que $\lambda_l \mathbf{a}_l^t \mathbf{s}_0 = 0$, y como $\mathbf{a}_l^t \mathbf{s}_0 < 0$, tiene que ser $\lambda_l = 0$ y llegamos a la contradicción.

Por lo tanto, el número de restricciones activas en \mathbf{x}_1 que tienen gradientes linealmente independientes es al menos uno mayor que en \mathbf{x}_0 .

Caso 2: (3.2) es no acotado inferiormente

Sea σ_0 el tamaño de paso factible máximo para $\hat{\mathbf{x}}$ y \mathbf{s}_0 .

Si $\sigma_0 = +\infty$, entonces $\hat{\mathbf{x}} - \sigma \mathbf{s}_0$ es factible para (3.1) $\forall \sigma \geq 0$ y $f(\hat{\mathbf{x}} - \sigma \mathbf{s}_0) \xrightarrow{\sigma \rightarrow +\infty} -\infty$, lo que contradice la hipótesis del lema.

En consecuencia, $\sigma_0 < +\infty$, y sea l el índice de la restricción que limita a σ_0 .

Definimos $\mathbf{x}_1 = \hat{\mathbf{x}} - \sigma_0 \mathbf{s}_0$, entonces, por ser f no creciente, $f(\mathbf{x}_1) \leq f(\hat{\mathbf{x}})$. Por construcción del Algoritmo 2, $f(\hat{\mathbf{x}}) \leq f(\mathbf{x}_0)$, luego tenemos que $f(\mathbf{x}_1) \leq f(\hat{\mathbf{x}}) \leq f(\mathbf{x}_0)$ y, como en el Caso 1, el número de restricciones activas en \mathbf{x}_1 que tienen gradientes linealmente independientes es al menos uno mayor que en \mathbf{x}_0 .

- Si el Caso 1 ocurre con \mathbf{x}_1 punto cuasiestacionario con $f(\mathbf{x}_1) \leq f(\mathbf{x}_0)$, entonces hemos probado el lema con $\tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{x}_1$.
- En otro caso, Caso 1 y Caso 2 concluyen con $\mathbf{x}_1 \in R$, $f(\mathbf{x}_1) \leq f(\mathbf{x}_0)$, y para los que el número de restricciones activas en \mathbf{x}_1 que tienen gradientes linealmente independientes es al menos uno mayor que en \mathbf{x}_0 . En este caso, podemos reemplazar $I(\mathbf{x}_0)$ por $I(\mathbf{x}_1)$ en el problema (3.2) y argumentar de nuevo que Caso 1 o Caso 2 pueden ocurrir.
 - Si el Caso 1 ocurre con \mathbf{x}_2 punto cuasiestacionario con $f(\mathbf{x}_2) \leq f(\mathbf{x}_1)$, entonces hemos probado el lema con $\tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{x}_2$.
 - En otro caso, Caso 1 y Caso 2 concluyen con $\mathbf{x}_2 \in R$, $f(\mathbf{x}_2) \leq f(\mathbf{x}_1)$, y para los que el número de restricciones activas en \mathbf{x}_2 que tienen gradientes linealmente independientes es al menos uno mayor que en \mathbf{x}_1 .

Este argumento puede repetirse varias veces, si es necesario, hasta que, o del Caso 1 \mathbf{x}_k es un punto cuasiestacionario obtenido con $f(\mathbf{x}_k) \leq f(\mathbf{x}_{k-1})$ y el lema está probado con $\tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{x}_k$, o un \mathbf{x}_k con $f(\mathbf{x}_k) \leq f(\mathbf{x}_{k-1})$ es obtenido y el número de restricciones activas en \mathbf{x}_k que tienen gradientes linealmente independientes es exactamente m . En este caso, \mathbf{x}_k es un punto extremo, y en consecuencia un punto cuasiestacionario, con lo que se completa la demostración del lema con $\tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{x}_k$.

□

Teorema 3.1 (Existencia de la solución). Si $\exists \gamma \in \mathbb{R}$ tal que $f(\mathbf{x}) \geq \gamma \quad \forall \mathbf{x} \in R \implies$ existe una solución óptima $\tilde{\mathbf{x}}$ para el problema (3.1) y $\tilde{\mathbf{x}}$ es un punto cuasiestacionario.

Dem. Debido a las diferentes soluciones óptimas para el problema (3.1) podría tener infinitos puntos cuasiestacionarios. Como cada conjunto cuasiestacionario está asociado a un subconjunto de $\{1, 2, \dots, m\}$, hay a lo sumo 2^m conjuntos cuasiestacionarios. Por lo tanto, hay un número finito de conjuntos cuasiestacionarios. Supongamos que es p este número.

Sea \mathbf{x}_i un punto cuasiestacionario del i -ésimo conjunto cuasiestacionario, $S(\mathbf{x}_i)$. Definimos k tal que

$$f(\mathbf{x}_k) = \min\{f(\mathbf{x}_i) \mid i = 1, \dots, p\}.$$

Ahora sea $\mathbf{x} \in R$ un punto cualquiera. Por el lema D.1, existe un punto cuasiestacionario $\tilde{\mathbf{x}}$ con $f(\tilde{\mathbf{x}}) \leq f(\mathbf{x})$. Ahora $\tilde{\mathbf{x}} \in S(\mathbf{x}_i)$ para algún i con $1 \leq i \leq p$ por lo que $f(\mathbf{x}_i) = f(\tilde{\mathbf{x}})$. Por otro lado, por definición de k , $f(\mathbf{x}_k) \leq f(\mathbf{x}_i) = f(\tilde{\mathbf{x}}) \leq f(\mathbf{x})$. Por lo tanto, $f(\mathbf{x}_k) \leq f(\mathbf{x}) \quad \forall \mathbf{x} \in R$ y $\tilde{\mathbf{x}} \equiv \mathbf{x}_k$ es una solución óptima para el problema (3.1). \square

Teorema D.2 (Condiciones necesarias y suficientes de punto cuasiestacionario). \mathbf{x}_0 es un punto cuasiestacionario para el problema (3.1) si y solo si

- a) $\mathbf{a}_i^t \mathbf{x}_0 \leq b_i, \quad \forall i = 1, \dots, m,$
- b) $-g(\mathbf{x}_0) = u_1 \mathbf{a}_1 + \dots + u_m \mathbf{a}_m,$
- c) $u_i(\mathbf{a}_i^t \mathbf{x}_0 - b_i) = 0, \quad \forall i = 1, \dots, m.$

Dem. Por definición, \mathbf{x}_0 es un punto cuasiestacionario para el problema (3.1) si y solo si $\mathbf{x}_0 \in R$ y \mathbf{x}_0 es la solución óptima para el problema (3.2) sujeto a restricciones lineales de igualdad.

Por el teorema 2.1, \mathbf{x}_0 es la solución óptima para el problema (3.2) si y solo si $\mathbf{a}_i^t \mathbf{x}_0 = b_i \quad \forall i \in I(\mathbf{x}_0)$ y existen $u_i \in \mathbb{R}$, $i \in I(\mathbf{x}_0)$ con

$$-g(\mathbf{x}_0) = \sum_{i \in I(\mathbf{x}_0)} u_i \mathbf{a}_i. \quad (\text{D.1})$$

Definiendo $u_i = 0$ para $i \notin I(\mathbf{x}_0)$, obtenemos un vector $\mathbf{u} = (u_1 \quad \dots \quad u_m)^t \in \mathbb{R}^m$ y la condición (D.1) se convierte en

$$-g(\mathbf{x}_0) = u_1 \mathbf{a}_1 + \dots + u_m \mathbf{a}_m,$$

y además se cumple

$$u_i(\mathbf{a}_i^t \mathbf{x}_0 - b_i) = 0, \quad \forall i = 1, \dots, m,$$

ya que, para $i \notin I(\mathbf{x}_0)$, $\mathbf{a}_i^t \mathbf{x}_0 - b_i < 0$ lo que implica que $u_i = 0$, y para $i \in I(\mathbf{x}_0)$, $\mathbf{a}_i^t \mathbf{x}_0 - b_i = 0$ con lo que se satisface sin imponer ninguna restricción sobre u_i . \square

D.2. Condiciones necesarias y suficientes para la unicidad de la solución

Definimos el conjunto $I(\mathbf{x}_0)$, igual que en la sección 3.1, como el conjunto de índices de las restricciones de desigualdad activas en \mathbf{x}_0 .

Lema D.3. Si \mathbf{x}_0 y \mathbf{x}_1 son soluciones óptimas para el problema (3.4) \implies todos los puntos del segmento que une \mathbf{x}_0 y \mathbf{x}_1 son también óptimos, y además, $g(\mathbf{x}_0)^t(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0) = 0$ y $(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0)^t C(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0) = 0$.

Dem. Sea $\sigma \in \mathbb{R}$ con $0 \leq \sigma \leq 1$. Como \mathbf{x}_0 y \mathbf{x}_1 son factibles, también lo es $\sigma \mathbf{x}_1 + (1 - \sigma) \mathbf{x}_0 \quad \forall \sigma \in [0, 1]$.

Como f es convexa, por la definición, $f(\sigma \mathbf{x}_1 + (1 - \sigma) \mathbf{x}_0) \leq \sigma f(\mathbf{x}_1) + (1 - \sigma) f(\mathbf{x}_0)$.

Como \mathbf{x}_0 y \mathbf{x}_1 son los dos óptimos, $f(\mathbf{x}_0) = f(\mathbf{x}_1)$, luego $f(\sigma \mathbf{x}_1 + (1 - \sigma) \mathbf{x}_0) \leq f(\mathbf{x}_0)$, por lo que $\sigma \mathbf{x}_1 + (1 - \sigma) \mathbf{x}_0$ es también una solución óptima $\forall \sigma \in [0, 1]$.

Además, como $\sigma \mathbf{x}_1 + (1 - \sigma) \mathbf{x}_0 = \mathbf{x}_0 + \sigma(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0)$, la serie de Taylor de f entorno a \mathbf{x}_0 es

$$f(\sigma \mathbf{x}_1 + (1 - \sigma) \mathbf{x}_0) = f(\mathbf{x}_0) + \sigma g(\mathbf{x}_0)^t (\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0) + \frac{1}{2} \sigma^2 (\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0)^t C (\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0).$$

Como $f(\sigma \mathbf{x}_1 + (1 - \sigma) \mathbf{x}_0) = f(\mathbf{x}_0) \forall \sigma \in [0, 1]$, tenemos $g(\mathbf{x}_0)^t (\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0) = 0$ y $(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0)^t C (\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0) = 0$. \square

Teorema D.4 (Caracterización del conjunto de soluciones óptimas). *Sea \mathbf{x}_0 una solución óptima para el problema (3.4) y sea $\mathbf{u} = (u_1 \ \cdots \ u_{m+r})^t$ el vector de los multiplicadores asociados.*

Definimos el conjunto S formado por todos los $\mathbf{x}_0 - \mathbf{s} \in \mathbb{R}^n$, donde \mathbf{s} cumple que $\mathbf{x}_0 - \mathbf{s} \in R$,

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_i^t \mathbf{s} &= 0 \quad \forall i \in I(\mathbf{x}_0) \text{ con } u_i > 0, \\ \mathbf{a}_i^t \mathbf{s} &\geq 0 \quad \forall i \in I(\mathbf{x}_0) \text{ con } u_i = 0, \\ \mathbf{a}_i^t \mathbf{s} &= 0 \quad \forall i = m+1, \dots, m+r, \\ \text{y } \mathbf{s}^t C \mathbf{s} &= 0. \end{aligned}$$

Entonces S es el conjunto de las soluciones óptimas para el problema (3.4).

Dem. Sea T el conjunto de soluciones óptimas para el problema (3.4). Veamos que $T \subseteq S$ y que $S \subseteq T$.

Supongamos primero que $\mathbf{x}_0 - \mathbf{s}$ es una solución óptima, es decir, que $\mathbf{x}_0 - \mathbf{s} \in T$. Por ser óptima, $\mathbf{x}_0 - \mathbf{s} \in R$. Como \mathbf{x}_0 y $\mathbf{x}_0 - \mathbf{s}$ son las dos óptimas, por el lema D.3, $g(\mathbf{x}_0)^t \mathbf{s} = 0$ y $\mathbf{s}^t C \mathbf{s} = 0$.

Como $\mathbf{x}_0 - \mathbf{s} \in R$, cumple que $\mathbf{a}_i^t (\mathbf{x}_0 - \mathbf{s}) \leq b_i \forall i = 1, \dots, m$ y $\mathbf{a}_i^t (\mathbf{x}_0 - \mathbf{s}) = b_i \forall i = m+1, \dots, m+r$. Como $\mathbf{x}_0 \in R$, cumple que $\mathbf{a}_i^t \mathbf{x}_0 = b_i \forall i = m+1, \dots, m+r$, luego $\mathbf{a}_i^t \mathbf{s} = 0 \forall i = m+1, \dots, m+r$.

De las condiciones de optimalidad para \mathbf{x}_0 , teorema 3.3 b), $-g(\mathbf{x}_0) = A_1^t \mathbf{u}_1 + A_2^t \mathbf{u}_2$, $\mathbf{u}_1 \geq \mathbf{0}$, obtenemos

$$-g(\mathbf{x}_0)^t \mathbf{s} = \mathbf{u}_1^t A_1 \mathbf{s} + \mathbf{u}_2^t A_2 \mathbf{s} = \sum_{i=1}^m u_i \mathbf{a}_i^t \mathbf{s} + \sum_{i=m+1}^{m+r} u_i \mathbf{a}_i^t \mathbf{s} = \sum_{i=1}^m u_i \mathbf{a}_i^t \mathbf{s} = 0. \quad (\text{D.2})$$

Sea $i \in I(\mathbf{x}_0)$, es decir, cumple $\mathbf{a}_i^t \mathbf{x}_0 = b_i$. Como $\mathbf{a}_i^t (\mathbf{x}_0 - \mathbf{s}) \leq b_i$, entonces $-\mathbf{a}_i^t \mathbf{s} \leq 0$, es decir, $\mathbf{a}_i^t \mathbf{s} \geq 0$. Por lo tanto,

$$\mathbf{a}_i^t \mathbf{s} \geq 0 \quad \forall i \in I(\mathbf{x}_0). \quad (\text{D.3})$$

Las condiciones de holgura complementaria para \mathbf{x}_0 fuerzan a los multiplicadores asociados con restricciones inactivas a tener valor 0, luego $u_i = 0 \forall i \notin I(\mathbf{x}_0)$ y así todos los términos de (D.2) asociados con restricciones inactivas en \mathbf{x}_0 se anulan.

Como $u_i \geq 0 \forall i = 1, \dots, m$, con lo anterior, $u_i \geq 0 \forall i \in I(\mathbf{x}_0)$ que, junto con (D.3), implica que el resto de términos de (D.2) son todos no negativos, y como suman 0, cada término vale 0.

Por lo tanto $\mathbf{a}_i^t \mathbf{s} = 0 \forall i \in I(\mathbf{x}_0)$ con $u_i > 0$, y $\mathbf{a}_i^t \mathbf{s} \geq 0 \forall i \in I(\mathbf{x}_0)$ con $u_i = 0$.

Con todo esto hemos probado que $\mathbf{x}_0 - \mathbf{s} \in S$ y así $T \subseteq S$.

Recíprocamente, supongamos que $\mathbf{x}_0 - \mathbf{s} \in S$.

Como $-g(\mathbf{x}_0) = u_1 \mathbf{a}_1 + \dots + u_{m+r} \mathbf{a}_{m+r}$, se sigue de la definición de S que $g(\mathbf{x}_0)^t \mathbf{s} = 0$. Como $\mathbf{s}^t C \mathbf{s} = 0$, se sigue de la serie de Taylor que $f(\mathbf{x}_0 - \mathbf{s}) = f(\mathbf{x}_0) - g(\mathbf{x}_0)^t \mathbf{s} + \frac{1}{2} \mathbf{s}^t C \mathbf{s} = f(\mathbf{x}_0)$.

Así, $\mathbf{x}_0 - \mathbf{s}$ es un punto factible que toma el mismo valor de la función objetivo que una solución óptima, luego $\mathbf{x}_0 - \mathbf{s}$ es también óptimo, y así, $\mathbf{x}_0 - \mathbf{s} \in T$, con lo que $S \subseteq T$.

Resumiendo, hemos probado que $T \subseteq S$ y que $S \subseteq T$, lo que implica que $S = T$. \square

Teorema D.5 (Condiciones necesarias y suficientes para la unicidad de la solución). *Sea \mathbf{x}_0 una solución óptima para el problema (3.4) y sea $\mathbf{u} = (u_1 \ \cdots \ u_{m+r})^t$ el vector de los multiplicadores asociados. Entonces, \mathbf{x}_0 es la única solución óptima si y solo si $\mathbf{s}^t C \mathbf{s} > 0 \forall \mathbf{s} \neq \mathbf{0}$ cumpliendo*

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_i^t \mathbf{s} &= 0 \quad \forall i \in I(\mathbf{x}_0) \text{ con } u_i > 0, \\ \mathbf{a}_i^t \mathbf{s} &\geq 0 \quad \forall i \in I(\mathbf{x}_0) \text{ con } u_i = 0, \\ \mathbf{a}_i^t \mathbf{s} &= 0 \quad \forall i = m+1, \dots, m+r. \end{aligned}$$

Dem. Sea \mathbf{x}_0 la única solución óptima para el problema (3.4), y sea $\mathbf{0} \neq \mathbf{s} \in \mathbb{R}^n$ cumpliendo

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_i^t \mathbf{s} &= 0 \quad \forall i \in I(\mathbf{x}_0) \text{ con } u_i > 0, \\ \mathbf{a}_i^t \mathbf{s} &\geq 0 \quad \forall i \in I(\mathbf{x}_0) \text{ con } u_i = 0, \\ \mathbf{a}_i^t \mathbf{s} &= 0 \quad \forall i = m+1, \dots, m+r. \end{aligned}$$

Veamos que $\mathbf{x}_0 - \sigma \mathbf{s} \in R$ para algún $\sigma > 0$.

Para $i = m+1, \dots, m+r$, como $\mathbf{x}_0 \in R$ cumple que $\mathbf{a}_i^t \mathbf{x}_0 = b_i$, luego $\mathbf{a}_i^t (\mathbf{x}_0 - \sigma \mathbf{s}) = \mathbf{a}_i^t \mathbf{x}_0 - \sigma \mathbf{a}_i^t \mathbf{s} = b_i - \sigma \mathbf{a}_i^t \mathbf{s} = b_i$, y se tiene que $\mathbf{a}_i^t (\mathbf{x}_0 - \sigma \mathbf{s}) = b_i \quad \forall i = m+1, \dots, m+r$.

Para $i = 1, \dots, m$, como $\mathbf{x}_0 \in R$ cumple que $\mathbf{a}_i^t \mathbf{x}_0 \leq b_i$.

Si $i \in I(\mathbf{x}_0)$, se cumple que $\mathbf{a}_i^t \mathbf{x}_0 = b_i$, luego $\mathbf{a}_i^t (\mathbf{x}_0 - \sigma \mathbf{s}) = \mathbf{a}_i^t \mathbf{x}_0 - \sigma \mathbf{a}_i^t \mathbf{s} = b_i - \sigma \mathbf{a}_i^t \mathbf{s}$.

Si $u_i > 0$, entonces $\mathbf{a}_i^t \mathbf{s} = 0$, y si $u_i = 0$, entonces $\mathbf{a}_i^t \mathbf{s} \geq 0$. Se tiene que $\mathbf{a}_i^t (\mathbf{x}_0 - \sigma \mathbf{s}) \leq b_i \quad \forall i \in I(\mathbf{x}_0)$.

Si $i \notin I(\mathbf{x}_0)$, entonces $\mathbf{a}_i^t (\mathbf{x}_0 - \sigma \mathbf{s}) = \mathbf{a}_i^t \mathbf{x}_0 - \sigma \mathbf{a}_i^t \mathbf{s} < b_i - \sigma \mathbf{a}_i^t \mathbf{s}$ y podemos tomar un $\sigma > 0$ de manera que $\mathbf{a}_i^t (\mathbf{x}_0 - \sigma \mathbf{s}) \leq b_i \quad \forall i \notin I(\mathbf{x}_0)$.

Hemos probado que $\mathbf{x}_0 - \sigma \mathbf{s} \in R$ con $\sigma > 0$.

Si fuera $\sigma \mathbf{s}^t C \sigma = 0$, entonces por el teorema D.4, $\mathbf{x}_0 - \sigma \mathbf{s}$, $\sigma > 0$, sería otra solución óptima y entraría en contradicción con nuestra hipótesis. Luego necesariamente, por ser f convexa, ha de ser $\sigma \mathbf{s}^t C \sigma > 0$ con $\sigma > 0$, y se tiene que $\mathbf{s}^t C \mathbf{s} > 0 \quad \forall \mathbf{s} \neq \mathbf{0}$.

Recíprocamente, sea $\mathbf{0} \neq \mathbf{s} \in \mathbb{R}^n$ cumpliendo

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_i^t \mathbf{s} &= 0 \quad \forall i \in I(\mathbf{x}_0) \text{ con } u_i > 0, \\ \mathbf{a}_i^t \mathbf{s} &\geq 0 \quad \forall i \in I(\mathbf{x}_0) \text{ con } u_i = 0, \\ \mathbf{a}_i^t \mathbf{s} &= 0 \quad \forall i = m+1, \dots, m+r, \\ \text{y } \mathbf{s}^t C \mathbf{s} &> 0. \end{aligned}$$

Por el teorema D.4, el único \mathbf{s} que verifica las condiciones es $\mathbf{s} = \mathbf{0}$ y por tanto el conjunto de las soluciones óptimas está formado por \mathbf{x}_0 , es decir, \mathbf{x}_0 es la única solución óptima. \square

Corolario. 1) Para el caso particular de problemas sin restricciones, el teorema D.5 establece que una solución óptima es la única solución óptima para el problema (1.1) si y solo si $\mathbf{s}^t C \mathbf{s} > 0 \quad \forall \mathbf{s} \neq \mathbf{0}$, es decir, si y solo si C es definida positiva. Esto establece el recíproco del teorema 1.3.

2) Para el caso particular de problemas sujetos a restricciones lineales de igualdad, el teorema D.5 establece que una solución óptima es la única solución óptima para el problema (2.1) si y solo si $\mathbf{s}^t C \mathbf{s} > 0 \quad \forall \mathbf{s} \neq \mathbf{0}$ con $A \mathbf{s} = \mathbf{0}$.

Si C es definida positiva, entonces $\mathbf{s}^t C \mathbf{s} > 0 \quad \forall \mathbf{s} \neq \mathbf{0}$, y en particular, $\mathbf{s}^t C \mathbf{s} > 0 \quad \forall \mathbf{s} \neq \mathbf{0}$ para el que $A \mathbf{s} = \mathbf{0}$. Por lo tanto, el teorema D.5 implica el teorema 2.2.

Definición 19. Sea \mathbf{x}_0 una solución óptima para (3.4) y sea $\mathbf{u} = (u_1 \ \dots \ u_{m+r})^t$ el vector de los multiplicadores asociados. Las condiciones de holgura complementaria, $u_i (\mathbf{a}_i^t \mathbf{x}_0 - b_i) = 0 \quad \forall i = 1, \dots, m$, fuerzan a u_i , a $\mathbf{a}_i^t \mathbf{x}_0 - b_i$, o a ambos a anularse. Esta última posibilidad puede resultar en algunas dificultades técnicas.

Con objeto de excluir tal caso, decimos que \mathbf{x}_0 satisface las *condiciones de holgura complementaria estrictas* para (3.4) si

$$\mathbf{a}_i^t \mathbf{x}_0 = b_i \text{ implica que } u_i > 0, \quad \forall i = 1, \dots, m.$$

Teorema D.6 (Condición suficiente para la unicidad de la solución). *Sea \mathbf{x}_0 una solución óptima para el problema (3.4). Supongamos que \mathbf{x}_0 satisface las condiciones de holgura complementaria estrictas y que $\mathbf{s}^t C \mathbf{s} > 0 \quad \forall \mathbf{s} \neq \mathbf{0}$ cumpliendo*

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_i^t \mathbf{s} &= 0 \quad \forall i \in I(\mathbf{x}_0), \\ \mathbf{a}_i^t \mathbf{s} &= 0 \quad \forall i = m+1, \dots, m+r. \end{aligned}$$

Entonces \mathbf{x}_0 es la única solución óptima. Además, si los gradientes de las restricciones activas en \mathbf{x}_0 , incluyendo las restricciones de igualdad, son linealmente independientes, entonces el vector de los multiplicadores asociados está unívocamente determinado.

Dem. La unicidad de \mathbf{x}_0 es consecuencia directa del teorema D.5 y de las condiciones de holgura complementaria estrictas.

Supongamos que hay dos vectores de multiplicadores distintos \mathbf{u}_0 y \mathbf{u}_1 . Sea I_0 el conjunto de índices de las restricciones activas en \mathbf{x}_0 , incluyendo las restricciones de igualdad.

Como \mathbf{x}_0 es la única solución óptima,

$$-g(\mathbf{x}_0) = \sum_{i \in I_0} (u_0)_i \mathbf{a}_i \quad \text{y} \quad -g(\mathbf{x}_0) = \sum_{i \in I_0} (u_1)_i \mathbf{a}_i.$$

Restando obtenemos

$$\sum_{i \in I_0} ((u_0)_i - (u_1)_i) \mathbf{a}_i = \mathbf{0}.$$

Como \mathbf{a}_i , $i \in I_0$, son linealmente independientes, esto implica que $\mathbf{u}_0 = \mathbf{u}_1$, y así los multiplicadores están unívocamente determinados. \square

D.3. Teorema de convergencia del Algoritmo 3

Teorema 3.4 (Convergencia del Algoritmo 3). *Si cada punto cuasiestacionario obtenido por el Algoritmo 3 es no degenerado, entonces el algoritmo termina después de un número finito de pasos con una de las dos situaciones:*

- \mathbf{x}_j es la solución óptima para el problema (3.4). En este caso, los multiplicadores asociados a las restricciones activas en \mathbf{x}_j están dados por $u_{\alpha_{ij}} = -\mathbf{g}_j^t \mathbf{c}_{ij} \forall i$ con $1 \leq \alpha_{ij} \leq m+r$ y los multiplicadores asociados al resto de restricciones tienen valor 0.
- El problema es no acotado inferiormente. En este caso, el algoritmo termina con \mathbf{x}_j y \mathbf{s}_j tales que $\mathbf{x}_j - \sigma \mathbf{s}_j \in R \forall \sigma \geq 0$ y $f(\mathbf{x}_j - \sigma \mathbf{s}_j) \xrightarrow{\sigma \rightarrow +\infty} -\infty$.

Dem. a) Por construcción, en cada iteración j , se cumple $\mathbf{a}_i^t \mathbf{x}_j = b_i \forall i \in J_j$ y $\mathbf{a}_i^t \mathbf{x}_j \leq b_i \forall i \notin J_j$, por lo que cada \mathbf{x}_j es factible.

Probemos la optimalidad de \mathbf{x}_j para los dos casos en los que el algoritmo finaliza con el mensaje " \mathbf{x}_j solución óptima obtenida".

Aplicando el lema A.6 a las matrices D_j^t, D_j^{-1} y al vector $-\mathbf{g}_j$ de la iteración j , tenemos que

$$-\mathbf{g}_j = \sum_{\alpha_{ij}=-1} (-\mathbf{g}_j^t \mathbf{c}_{ij}) \mathbf{d}_{ij} + \sum_{\alpha_{ij}=0} (-\mathbf{g}_j^t \mathbf{c}_{ij}) \mathbf{d}_{ij} + \sum_{1 \leq \alpha_{ij} \leq m+r} (-\mathbf{g}_j^t \mathbf{c}_{ij}) \mathbf{d}_{ij}. \quad (\text{D.4})$$

De la definición de D_j^t , es $\mathbf{d}_{ij} = \mathbf{a}_{\alpha_{ij}} \forall i$ con $1 \leq \alpha_{ij} \leq m+r$. De la actualización de D_j^{-1} y del lema 1.6 a) se tiene que $\mathbf{g}_j^t \mathbf{c}_{ij} = 0 \forall i$ con $\alpha_{ij} = -1$, por lo que el primer sumando desaparece. Si el algoritmo termina con " \mathbf{x}_j solución óptima", entonces, o no hay α_{ij} con valor 0, o del Paso 1.1, $\mathbf{g}_j^t \mathbf{c}_{ij} = 0 \forall i$ con $\alpha_{ij} = 0$. En cualquiera de los dos casos el segundo sumando desaparece y (D.4) se reduce a

$$-\mathbf{g}_j = \sum_{1 \leq \alpha_{ij} \leq m+r} (-\mathbf{g}_j^t \mathbf{c}_{ij}) \mathbf{a}_{\alpha_{ij}}. \quad (\text{D.5})$$

La finalización en el Paso 1.2 implica que, o no hay ningún i con $1 \leq \alpha_{ij} \leq m$, o

$$\mathbf{g}_j^t \mathbf{c}_{ij} \leq 0 \forall i \text{ con } 1 \leq \alpha_{ij} \leq m. \quad (\text{D.6})$$

Si definimos $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^{m+r}$ como $u_i = 0 \quad \forall i \notin J_j$ y $u_{\alpha_{ij}} = -\mathbf{g}_j^t \mathbf{c}_{ij} \quad \forall i \in J_j$ con $1 \leq \alpha_{ij} \leq m+r$, entonces (D.5) se convierte en

$$-\mathbf{g}_j = \sum_{i=1}^{m+r} u_i \mathbf{a}_i,$$

y por (D.6) se cumple que $u_i \geq 0 \quad \forall i = 1, \dots, m$.

Como $\mathbf{a}_i^t \mathbf{x}_j - b_i = 0 \quad \forall i \in J_j$ y $u_i = 0 \quad \forall i \notin J_j$, se tiene que $u_i (\mathbf{a}_i^t \mathbf{x}_j - b_i) = 0 \quad \forall i = 1, \dots, m$, y con esto hemos probado que se satisfacen las 3 condiciones de optimalidad del teorema 3.3 y que \mathbf{x}_j es una solución óptima.

- b) Si la finalización ocurre en el Paso 2 con el mensaje de que el problema es no acotado inferiormente, entonces, como $\hat{\sigma}_j = +\infty$, se tiene que $\mathbf{x}_j - \sigma \mathbf{s}_j \in R \quad \forall \sigma \geq 0$.

Del Paso 1, $\mathbf{g}_j^t \mathbf{s}_j > 0$, y como $\hat{\sigma}_j = +\infty$, se tiene que $\mathbf{s}_j^t \mathbf{C} \mathbf{s}_j = 0$. Con la serie de Taylor esto implica que $f(\mathbf{x}_j - \sigma \mathbf{s}_j) = f(\mathbf{x}_j) - \sigma \mathbf{g}_j^t \mathbf{s}_j \xrightarrow{\sigma \rightarrow +\infty} -\infty$ y el problema es no acotado inferiormente.

Para probar que el algoritmo finaliza en un número finito de pasos, observamos primero que no se elimina ninguna restricción del conjunto activo hasta que se alcanza un punto cuasiestacionario. Cada iteración antes de la determinación de un punto cuasiestacionario o construye una dirección conjugada adicional o añade una nueva restricción al conjunto activo. Así, comenzando con un punto factible arbitrario, se localizará un punto cuasiestacionario en un número finito de iteraciones.

Sean $j_1 < j_2 < \dots < j_i < \dots$ iteraciones para las cuales $\mathbf{x}_{j_1}, \mathbf{x}_{j_2}, \dots, \mathbf{x}_{j_i}, \dots$ son puntos cuasiestacionarios. Por construcción, $f(\mathbf{x}_0) \geq f(\mathbf{x}_1) \geq f(\mathbf{x}_2) \geq \dots$, luego si cada $\sigma_{j_i} > 0$, entonces $f(\mathbf{x}_{j_{i+1}}) < f(\mathbf{x}_{j_i})$ para cada $i = 1, 2, \dots$. En consecuencia, $f(\mathbf{x}_{j_1}) > f(\mathbf{x}_{j_2}) > \dots > f(\mathbf{x}_{j_i}) > \dots$, la subsecuencia de los valores de la función objetivo para los puntos cuasiestacionarios será estrictamente decreciente, por lo que no se repetirá ningún conjunto cuasiestacionario. Como el problema solo tiene un número finito de conjuntos cuasiestacionarios, el algoritmo debe terminar en un número finito de pasos.

Queda por considerar el caso de un punto cuasiestacionario \mathbf{x}_j para el que $\sigma_j = 0$. No se presenta la demostración en el caso de la degeneración porque resulta más elaborada y compleja, pero utilizando la regla de elegir el menor índice k y l en los pasos 1.2 y 2, respectivamente, se garantiza la no repetición de puntos cuasiestacionarios y por tanto la convergencia en un número finito de iteraciones. Se puede consultar la demostración completa en el libro [1, pág. 154-157]. \square

