

ADVERTIMENT. La consulta d'aquesta tesi queda condicionada a l'acceptació de les següents condicions d'ús: La difusió d'aquesta tesi per mitjà del servei TDX (www.tesisenxarxa.net) ha estat autoritzada pels titulars dels drets de propietat intel·lectual únicament per a usos privats emmarcats en activitats d'investigació i docència. No s'autoritza la seva reproducció amb finalitats de lucre ni la seva difusió i posada a disposició des d'un lloc aliè al servei TDX. No s'autoritza la presentació del seu contingut en una finestra o marc aliè a TDX (framing). Aquesta reserva de drets afecta tant al resum de presentació de la tesi com als seus continguts. En la utilització o cita de parts de la tesi és obligat indicar el nom de la persona autora.

ADVERTENCIA. La consulta de esta tesis queda condicionada a la aceptación de las siguientes condiciones de uso: La difusión de esta tesis por medio del servicio TDR (www.tesisenred.net) ha sido autorizada por los titulares de los derechos de propiedad intelectual únicamente para usos privados enmarcados en actividades de investigación y docencia. No se autoriza su reproducción con finalidades de lucro ni su difusión y puesta a disposición desde un sitio ajeno al servicio TDR. No se autoriza la presentación de su contenido en una ventana o marco ajeno a TDR (framing). Esta reserva de derechos afecta tanto al resumen de presentación de la tesis como a sus contenidos. En la utilización o cita de partes de la tesis es obligado indicar el nombre de la persona autora.

WARNING. On having consulted this thesis you're accepting the following use conditions: Spreading this thesis by the TDX (www.tesisenxarxa.net) service has been authorized by the titular of the intellectual property rights only for private uses placed in investigation and teaching activities. Reproduction with lucrative aims is not authorized neither its spreading and availability from a site foreign to the TDX service. Introducing its content in a window or frame foreign to the TDX service is not authorized (framing). This rights affect to the presentation summary of the thesis as well as to its contents. In the using or citation of parts of the thesis it's obliged to indicate the name of the author

CONTRIBUCIONS ALS ALGORISMES DE PUNT
INTERIOR BASATS EN MÈTODES ITERATIUS PER
A SISTEMES D'EQUACIONS USANT
REGULARITZACIONS QUADRÀTIQUES

Jordi Cuesta Andrea

Tesi Doctoral

CONTRIBUCIONS ALS ALGORISMES DE
PUNT INTERIOR BASATS EN MÈTODES
ITERATIUS PER A SISTEMES
D'EQUACIONS USANT
REGULARITZACIONS QUADRÀTIQUES

Autor: Jordi Cuesta

Director: Jordi Castro

Dept. d'Estadística i Investigació Operativa
Secció Informàtica
Universitat Politècnica de Catalunya

Dedicatòria

Aquesta tesi la dedico a l'Anna, la meva dona, i al Jordi, el meu fill, per la paciència que han tingut amb mi durant els anys que he dedicat a desenvolupar-la.

Agraïments

La persona que més a prop ha estat d'aquest treball és el Dr. Jordi Castro, director del projecte de tesi; sense el seu suport constant i la seva dedicació aquesta tesi mai s'hauria completat. De la resta de persones que d'una forma més indirecta també han contribuït al desenvolupament de la tesi esmentaré al Prof. Jacek Gondzio, de l'Universitat d'Edimburg, i al Prof. Jean-Philippe Vial, de la Universitat de Ginebra, amb els quals vàrem mantenir converses sobre el mètode de punt proximal i sobre barreres auto-concordants que van resultar ser profitoses en el desenvolupament de la regularització de punt proximal i en la demostració d'alguns teoremes de convergència. No vull oblidar d'esmentar a tot l'equip docent del programa de doctorat que m'han introduït en el món de la investigació operativa i l'optimització.

Reus, juny de 2009

Índex

| | | |
|----------|--|-----------|
| 1 | Introducció | 1 |
| 1.1 | Objectius | 2 |
| 1.2 | Aportacions | 4 |
| 1.3 | Esquema general de la memòria | 5 |
| 2 | Mètodes de punt interior | 7 |
| 2.1 | Programació lineal (PL): formulació | 7 |
| 2.2 | Mètodes de punt interior | 9 |
| 2.3 | El mètode de Newton en punt interior | 10 |
| 2.4 | Funcions de barrera | 11 |
| 2.5 | Mètode clàssic de barrera logarítmica | 12 |
| 2.6 | Camí central primal-dual | 13 |
| 2.7 | Mètodes de punt interior de seguiment del camí primal-dual | 15 |
| 2.8 | Correccions de segon ordre a la passa de Newton | 18 |
| 2.9 | Extensió a la programació quadràtica amb fites superiors a les variables | 19 |
| 2.9.1 | Sistema augmentat i equacions normals | 23 |
| 3 | Regularització quadràtica de la funció de barrera | 27 |
| 3.1 | Regularització numèrica | 27 |
| 3.1.1 | Regularització en optimització | 28 |
| 3.1.2 | Regularització en mètodes de punt interior | 29 |
| 3.2 | Regularització quadràtica de la barrera: formulació | 33 |
| 3.2.1 | Regularització de punt proximal | 35 |
| 3.3 | Convergència a l'òptim del mètode de punt interior clàssic de Fiacco-McCormick | 38 |
| 3.4 | Existència del camí central primal-dual del problema regularitzat | 41 |
| 3.5 | Convergència dels algorismes de seguiment del camí regularitzats | 46 |
| 3.5.1 | Funcions i barreres auto-concordants | 46 |
| 3.5.2 | Les Barreres regularitzades són Barreres Auto-Concordants | 48 |
| 3.5.3 | Complexitat afegida pel terme de regularització | 52 |
| 3.6 | Regularització de problemes lineals generals | 53 |

| | | |
|----------|--|-----------|
| 3.6.1 | Motivació | 53 |
| 3.6.2 | Implementació | 53 |
| 3.6.3 | Resultats computacionals | 54 |
| 4 | Regularització dels problemes angulars en blocs | 59 |
| 4.1 | Problemes amb estructura angular en blocs | 59 |
| 4.2 | Estat de l'art | 61 |
| 4.3 | Mètode especialitzat de punt interior | 62 |
| 4.3.1 | Resolució de les equacions KKT d'optimalitat | 62 |
| 4.3.2 | Resolució de les equacions normals | 64 |
| 4.3.3 | Efecte dels termes quadràtics | 66 |
| 4.4 | Reducció del radi espectral | 68 |
| 4.4.1 | El cas general $N_i \in \mathbb{R}^{m_i \times n_i}$, $L_i \in \mathbb{R}^{l \times n_i}$ | 68 |
| 4.4.2 | El cas de fites superiors generalitzades (GUB) | 76 |
| 4.4.2.1 | Definició de fites GUB | 76 |
| 4.4.2.2 | Fites GUB i problemes amb estructura angular en blocs | 77 |
| 4.4.2.3 | Reducció del radi espectral en les fites GUB | 78 |
| 4.4.3 | El cas de fluxos multiarticle | 78 |
| 4.4.3.1 | Regularització de les variables de folga | 78 |
| 4.4.4 | El cas amb $N \in \mathbb{R}^{n \times n}$ | 80 |
| 4.5 | Regularitzacions proximal i quadràtica | 81 |
| 5 | Experiència computacional amb problemes angular en blocs | 83 |
| 5.1 | Problemes lineals de xarxes multiarticle | 83 |
| 5.1.1 | Instàncies dels problemes | 84 |
| 5.1.2 | Formulació | 85 |
| 5.1.3 | Descripció de la implementació usada | 86 |
| 5.1.3.1 | Eleccions de la matriu de regularització | 87 |
| 5.1.3.2 | Finalització de l'algorisme i verificació de l'òptim | 89 |
| 5.1.4 | Estudi empíric del comportament de la regularització | 89 |
| 5.1.4.1 | Regularització amb $Q = (\mu/\mu_0)\delta I$ | 90 |
| 5.1.4.2 | Regularització amb $Q = (\mu/\mu_0)\delta \cdot \text{diag}(x_i/z_i)$ | 91 |
| 5.1.4.3 | Regularització amb $Q = it \cdot (\mu/\mu_0)\delta I$ | 91 |
| 5.1.4.4 | Regularització amb $Q = it \cdot (\mu/\mu_0)\delta \cdot \text{diag}(x_i/z_i)$ | 92 |
| 5.1.4.5 | Altres eleccions per a Q | 92 |
| 5.1.4.6 | Conclusions per als problemes multiarticle | 93 |
| 5.1.4.7 | Comportament de la regularització segons la magnitud de Q | 96 |
| 5.1.4.8 | Comparació entre RIPM i PIPM | 98 |
| 5.1.4.9 | Resultats usant els millors paràmetres | 98 |

| | | |
|----------|--|------------|
| 5.2 | Problemes amb estructura angular en blocs generals | 104 |
| 5.2.1 | Instàncies dels problemes | 104 |
| 5.2.2 | Detalls d'implementació | 104 |
| 5.2.3 | Problemes de congestió mínima en una xarxa de transport | 106 |
| 5.2.3.1 | Formulació | 106 |
| 5.2.3.2 | Descripció dels problemes test | 109 |
| 5.2.3.3 | Regularització amb $Q = (\mu/\mu_0)\delta \cdot I$ | 110 |
| 5.2.3.4 | Regularització amb $Q = it \cdot (\mu/\mu_0)\delta \cdot \text{diag}(x_i/z_i)$ | 110 |
| 5.2.3.5 | Problemes de congestió mínima resolts amb CPLEX-11 | 111 |
| 5.2.3.6 | Efecte de la regularització de les folgues | 112 |
| 5.2.4 | Problemes multiarticle no orientats | 113 |
| 5.2.4.1 | Formulació | 113 |
| 5.2.4.2 | Descripció dels problemes test | 113 |
| 5.2.4.3 | Regularització amb $Q = (\mu/\mu_0)\delta \cdot I$ | 113 |
| 5.2.4.4 | Regularització amb $Q = it \cdot (\mu/\mu_0)\delta \cdot \text{diag}(x_i/z_i)$ | 115 |
| 5.2.4.5 | Problemes multiarticle no orientats resolts amb CPLEX-11 | 115 |
| 6 | Conclusions i àrees de possible recerca | 117 |
| 6.1 | Conclusions | 117 |
| 6.2 | Ampliacions i línies de treball futur | 118 |
| 6.3 | Publicacions i presentacions realitzades com a conseqüència del treball de tesi | 120 |
| | Glossari de símbols | 123 |
| | Bibliografia | 125 |
| | Índex alfabètic | 131 |

Índex d'algorismes

| | | |
|-----|---|----|
| 2.1 | Primal-dual de punt interior per a programació lineal | 17 |
| 2.2 | Primal-dual de punt interior, correccions de Mehrotra | 19 |
| 3.1 | Regularització quadràtica d'un problema lineal general | 55 |
| 4.1 | QIPM: Mètode especialitzat per a problemes amb estructura angular en blocs | 66 |
| 4.2 | RIPM: Mètode especialitzat regularitzat per a problemes lineals amb estructura angular en blocs | 82 |

Índex de figures

| | | |
|-----|--|----|
| 3.1 | Valors de (3.43) per a $u = 1000$, $q = 1000/u^2$ | 52 |
| 3.2 | Valors de (3.43) per a $u = 1000$, $q = 0.9/u^2$ | 53 |
| 3.3 | Predicció del comportament de la regularització segons els valors de (3.46) (escales logarítmiques) | 56 |
| 4.1 | Nombre d'iteracions de punt interior (font:[12]) | 67 |
| 4.2 | Nombre d'iteracions de PCG per a alguns problemes Mnetgen (font [12]) . . | 68 |
| 4.3 | Evolució del radi espectral de $D^{-1}(C^T B^{-1}C)$ i de la seva fita (4.18), problema PDS1 | 71 |
| 4.4 | Efecte de la regularització en el radi espectral, problema PDS1 | 75 |
| 5.1 | Evolució de μ_k/μ_0 , $k \cdot \mu_k/\mu_0$ i $k^2 \cdot \mu_k/\mu_0$ en PDS1, algorisme RIPM | 88 |
| 5.2 | Temps de CPU per a QIPM, RIPM, PIPM | 96 |
| 5.3 | Iteracions de punt interior segons els valors de $Q = \nu I$ en el problema PDS1 | 97 |
| 5.4 | Iteracions PCG i de punt interior per al problema PDS1, $Q = \nu I$ | 97 |
| 5.5 | Evolució del percentatge d'iteracions de gradient conjugat, PDS1 | 99 |
| 5.6 | Iteracions de PCG segons δ per a PIPM i RIPM, problema PDS5 | 99 |

Índex de taules

| | | |
|------|--|-----|
| 3.1 | Jacobiana i residu de cada formulació | 38 |
| 3.2 | Resultats amb els problemes Netlib, resolts sense i amb regularització | 55 |
| 4.1 | Problema quadràtic angular en blocs de grans dimensions variant $Q = \beta 1_n$ | 72 |
| 5.1 | Característiques del problemes multiarticle | 85 |
| 5.2 | Fluxos multiarticle amb regularització $Q = (\mu/\mu_0)\nu I$ | 90 |
| 5.3 | Fluxos multiarticle amb regularització $Q = (\mu/\mu_0)\nu \cdot \text{diag}(x_i/z_i)$ | 91 |
| 5.4 | Fluxos multiarticle amb regularització $Q = it \cdot (\mu/\mu_0)\nu I$ | 92 |
| 5.5 | Fluxos multiarticle amb regularització $Q = it \cdot (1/\mu_0)\nu \cdot \text{diag}(x_i/z_i)$ | 93 |
| 5.6 | Temps de CPU, problemes multiarticle | 94 |
| 5.7 | Ràtio temps de CPU de RIPM i PIPM respecte QIPM, problemes multiarticle | 95 |
| 5.8 | Problemes Mnetgen | 100 |
| 5.9 | Problemes Mnetgen resolts amb CPLEX-11 | 102 |
| 5.10 | Problemes PDS, $Q = it \cdot (1/\mu_0) \cdot 0.1 \cdot \text{diag}(x_i/z_i)$ | 103 |
| 5.11 | Problemes PDS resolts amb CPLEX-11 | 103 |
| 5.12 | Problemes Tripart i Gridgen1, $Q = it \cdot (1/\mu_0) \cdot \text{diag}(x_i/z_i)$ | 103 |
| 5.13 | Problemes Tripart i Gridgen1 resolts amb CPLEX-11 | 104 |
| 5.14 | Característiques dels problemes de congestió mínima | 109 |
| 5.15 | Problemes de congestió mínima resolts amb regularització, $Q = (\mu/\mu_0)\delta \cdot I$ | 110 |
| 5.16 | Problemes de congestió mínima regularitzats, $Q = it \cdot (\mu/\mu_0)\delta \cdot \text{diag}(x_i/z_i)$ | 111 |
| 5.17 | Problemes de congestió mínima resolts amb CPLEX-11 | 111 |
| 5.18 | Efecte de la regularització de les folgues | 112 |
| 5.19 | Característiques dels problemes multiarticle no orientats | 114 |
| 5.20 | Problemes multiarticle no orientats, $Q = (\mu/\mu_0)\delta \cdot I$ | 114 |
| 5.21 | Problemes multiarticle no orientats, $Q = it \cdot (\mu/\mu_0)\delta \cdot \text{diag}(x_i/z_i)$ | 115 |
| 5.22 | Problemes no orientats amb CPLEX-11 | 115 |

Capítol 1

Introducció

Aquesta memòria de tesi té com a objecte d'estudi el desenvolupament de nous algorismes especialitzats i les seves implementacions per a resoldre una família de problemes d'optimització lineal: aquells que en la seva formulació presenten una matriu de restriccions amb estructura diagonal en blocs. En pertanyen a aquesta família els problemes de fluxos multiarticle en xarxa i els problemes de congestió mínima en una xarxa, entre d'altres. La estructura especial de la matriu de restriccions pot aprofitar-se per a augmentar l'eficiència dels algorismes estàndard d'optimització.

Els problemes de fluxos multiarticle en xarxa optimitzen el conjunt de fluxos en cada arc d'una xarxa amb la particularitat de que diversos productes (articles) independents comparteixen els arcs. Són problemes amb un elevat nombre de variables i restriccions, donat que cada article tindrà el seu conjunt de variables i restriccions. En el context d'aquesta memòria, quan diem “elevat nombre” volem dir entre desenes de milers i centenars de milers de variables, i entre milers i centenars de milers de restriccions. Donat que tots els articles comparteixen la mateixa xarxa, en la seva formulació s'arriba a una matriu de restriccions amb estructura diagonal en blocs. Dintre d'aquesta categoria de problemes tenim dues subcategories: problemes de fluxos orientats, en els quals en cada arc només es permet el flux en un sentit, i problemes de fluxos no orientats, en els quals podem tenir fluxos en els dos sentits en cada arc.

En un problema de congestió cal assignar recursos tenint en compte que cada recurs pot ser compartit per diversos usuaris de forma que el cost que paga cada usuari per al recurs s'incrementa al compartir-lo. Un problema típic de congestió mínima és el d'assignació de rutes als conductors en una xarxa de tràfic rodat.

En aquest treball desenvolupem tant els algorismes com les seves implementacions pràctiques, presentant resultats numèrics. Els algorismes s'entenen aquí com seqüències d'operacions que generen sèries de valors, les quals han de ser convergents a l'òptim del problema. Hem dedicat una part d'aquesta memòria a la presentació teòrica dels algorismes i a l'establiment de les seves propietats i dels teoremes de convergència. En un altre part s'apliquen

aquests algorismes a diverses implementacions computacionals, i es proven a resoldre problemes. També es mostra com la teoria i la pràctica coincideixen en el sentit de que les prediccions que es poden fer a partir de les propietats teòriques dels algorismes realment s'observen en les implementacions pràctiques.

El punt de partida d'aquesta tesi va ser un fet empíric: l'observació d'un millor comportament computacional d'un algorisme de punt interior per a problemes de fluxos multiarticle en xarxes quan en la funció objectiu hi figuren termes quadràtics. La idea original llavors va ser buscar alguna forma d'aproximar un problema lineal per un de quadràtic de forma que s'explotés el fet experimental observat sense perjudicar la convergència del problema. La seqüència cronològica de tasques va ser: provar algunes tècniques d'aproximar un problema lineal per un de quadràtic per a confirmar que la idea original tenia perspectives d'èxit, desenvolupar una teoria el més general possible que per una banda formalitzés l'aproximació quadràtica esmentada i per altre banda expliqués el comportament experimental observat, i que a la seva vegada proporcionés un camí per a construir nous algorismes, dissenyar aquests algorismes i implementacions, provar-los i confirmar les prediccions teòriques. De fet aquesta línia de treball no és res més que l'aplicació del mètode científic: explicar fenòmens, establir relacions entre els fets i enunciar lleis que expliquin els fenòmens i permetin obtenir, amb aquests coneixements, aplicacions útils. No obstant l'ordre d'exposició en aquesta memòria de tesi no serà el cronològic, sinó que es presentarà el material ordenat lògicament, que és la forma més adequada en el context d'un treball científic: conceptes, propietats i teoremes, algorismes i implementacions pràctiques.

Un cop presentat el marc general on s'enquadra el treball el següent pas serà precisar els objectius concrets perseguits i enumerar les aportacions que aquest treball ha permès fer respecte al que fins ara existia en aquest camp de recerca.

1.1 Objectius

Com s'ha explicat anteriorment l'objectiu general de la tesi ha estat el desenvolupament d'algorismes especialitzats i les seves implementacions per a resoldre problemes que estan dintre de la categoria de “problemes de programació lineal amb matriu de restriccions amb estructura diagonal en blocs” (*primal block-angular problems*). A continuació detallem la seqüència d'objectius específics, en ordre temporal coincident amb la seqüència de tasques realitzades:

- Desenvolupar la teoria que ens permet entendre els fets empírics observats: l'observació d'un millor comportament computacional dels problemes de fluxos multiarticle en xarxes quan en la seva funció objectiu hi figuren termes quadràtics. El resultat ha de ser un conjunt de teoremes que mostrin el perquè d'aquest comportament experimental. La conjectura inicial va ser que el comportament observat era degut a

un millor comportament del preconditionador usat per l'algorisme en la resolució dels sistemes lineals, comportament que depèn del radi espectral d'una certa matriu. Llavors l'estudi teòric va estar dirigit a mostrar com l'addició de termes quadràtics en la funció objectiu podia fer decreixer aquell radi espectral, millorant el comportament del preconditionador i l'eficiència de l'algorisme. La tasca realitzada va confirmar la conjectura.

- Formalitzar la idea d'aproximar un problema lineal per un de quadràtic. Sense fer referència en cap moment al tipus de problemes al que es vol aplicar amb posterioritat, els problemes *primal block-angular*, es desenvolupa una teoria formal que proporcioni un marc consistent per a plantejar l'aproximació quadràtica en termes generals, dintre del context de mètodes de punt interior per a programació lineal. Per tant els resultats aconseguits són generals: es poden aplicar a qualsevol problema lineal. El terme quadràtic afegit s'ha d'anar decreixent conforme l'algorisme avança vers l'òptim.
- A partir dels resultats teòrics anteriors dissenyar algorismes especialitzats per a la família de problemes *primals bloc-angulars* que afegeixen un terme quadràtic a la funció objectiu lineal per tal d'explotar el fet empíric abans esmentat.
- Estudiar la convergència dels algorismes anteriors, així com altres aspectes tècnics, importants com a marc previ al disseny de les implementacions.
- Desenvolupar implementacions eficients dels algorismes. És pren com a punt de partida una implementació de punt interior especialitzat molt eficient que usa el mètode del gradient conjugat preconditionat lineal i, com s'ha dit anteriorment, es pretén millorar el preconditionament utilitzant l'aproximació quadràtica. La implementació s'ha de comparar amb l'original i també amb altres algorisme genèrics considerats molt eficients.
- Verificar en la pràctica els teoremes i prediccions de la teoria que s'han desenvolupat prèviament.
- Un cop realitzats els algorismes especialitzats i vist l'èxit de la idea original, sorgeix de forma natural la idea d'aplicar la mateixa tècnica a un algorisme genèric de punt interior. Això és formalment possible per que la teoria de l'aproximació quadràtica s'ha realitzat de forma general, sense particularitzar cap concepte als problemes especialitzats. En el cas general de programació lineal no es pretén millorar cap preconditionament, sinó provar d'aplicar la nova tècnica a qualsevol problema lineal. S'ha implementat l'aproximació quadràtica en un algorisme de punt interior per a programació lineal i quadràtica i s'ha provat a resoldre un conjunt de problemes lineals estàndard.

1.2 Aportacions

Com és després de la introducció prèvia i de la llista d'objectius presentada, el treball realitzat ha aportat innovacions tant en el camp teòric dels mètodes de punt interior com en la implementació de programari d'optimització. En el camp teòric alguna de les aportacions fetes son totalment noves en el sentit de ser un primer intent d'abordar cert tipus de problemes amb una tècnica nova; d'altres aportacions teòriques són confirmacions de conjectures que ja s'havien proposat fa anys, i que no havien estat encara confirmades. En el camp d'algorismes i implementacions pràctiques tot el que s'aporta són millores respecte algorismes ja existents en vista a augmentar la seva eficiència computacional. No cal dir que aquestes millores en absolut són definitives, i que seran millorables en un futur tant refinant les noves tècniques presentades en aquesta memòria com aplicant-ne de noves. Potser l'aportació més notable és la d'usar termes quadràtics per a aproximar una funció lineal: la tècnica d'aproximar funcions no lineals per funcions quadràtiques és força antiga, també podem trobar exemples d'aproximació de funcions quadràtiques per lineals, però la tècnica aquí proposada és, al menys al nostre nivell de coneixement, totalment innovadora.

Detallem a continuació les diferents aportacions puntuals que aquest treball ha realitzat:

- Donar resultats teòrics sobre l'eficiència del preconditionador usat en un algorisme de punt interior especialitzat per a fluxos en xarxes multiarticle, estudiant com afecta al radi espectral d'una certa matriu la inclusió de termes quadràtics en la funció objectiu. Això demostra la conjectura mencionada en els objectius sobre l'efecte del radi espectral d'una certa matriu en l'eficiència de l'algorisme, conjectura que s'havia publicat anteriorment en un article de recerca [12] i que estava pendent de confirmació.
- Desenvolupar una tècnica genèrica d'aproximació per a funcions quadràtiques aplicable a qualsevol problema de programació lineal, dintre del context del mètodes de punt interior. Com veurem, aquesta nova tècnica es pot considerar que pertany a la família de tècniques numèriques anomenades de regularització. Així, doncs, obtindrem una tècnica de regularització quadràtica.
- Implementació pràctica de la tècnica de regularització quadràtica aplicada a un algorisme especialitzat de punt interior per a problemes de fluxos multiarticle en xarxa (*multicommodity network flow problems*), considerat com el més eficient en el seu àmbit, amb l'objectiu d'incrementar encara més les seves prestacions. També s'aplica la regularització a altres dos algorismes de punt interior especialitzats: un per a fluxos no orientats multiarticle en xarxa (*nonoriented multicommodity flows problems*) i un altre per a problemes de congestió mínima (*minimum congestion problems*)
- La quarta i última aportació és la utilització de la tècnica de regularització quadràtica, que en un principi havia estat dissenyada per als algorismes especialitzats esmentats,

en l'àmbit més general de programació lineal.

1.3 Esquema general de la memòria

Conceptualment podem dividir aquest treball en 2 blocs:

- Bloc 1. Desenvolupaments teòrics.
 - Capítol 2. Presentem la programació lineal i quadràtica, els mètodes de punt interior i els de barrera.
 - Capítol 3. Introduïm els conceptes de regularització numèrica, primer de forma genèrica i posteriorment en el context dels mètodes de punt interior. Desenvolupem la teoria de la regularització quadràtica de la funció de barrera, dintre del marc de la programació lineal. Es veuen també resultats teòrics respecte la convergència dels algorismes basats en barreres regularitzades. Per tal de verificar els desenvolupaments teòrics s'implementa un algorisme regularitzat per a problemes lineals generals, i es prova en un conjunt estàndard de problemes.
- Bloc 2. Implementacions pràctiques.
 - Capítol 4. Aplicació de la regularització quadràtica de la funció de barrera als problemes angular en blocs. Primer de tot es formulen aquests problemes i es fa un breu resum de l'estat de l'art; seguidament es presenta un algorisme de punt interior especialitzat i es veuen els resultats teòrics abans esmentats referents a la millora del preconditionador aconseguida en afegir termes quadràtics a la funció objectiu.
 - Capítol 5. Resultats computacionals usant implementacions especialitzades per als problemes de fluxos multiarticle, tant orientats com no orientats, i per als problemes de congestió mínima. També s'inclou en aquest capítol algunes comprovacions experimentals de prediccions teòriques fetes en els capítols anteriors, així com un estudi empíric de la influència de la magnitud del terme quadràtic de regularització sobre els resultats computacionals.

En l'últim capítol com a conclusió detallem les aportacions realitzades, resumim els resultats assolits i proposem possibles extensions i línies de futura recerca.

Sobre les notacions emprades En tota la memòria s'utilitzaran lletres majúscules per a matrius i minúscules per a els vectors o escalars. Els vectors es suposaran que són vectors columna, i per tant un vector transposat serà un vector fila. Denotarem, per a qualsevol

vector x , per $X = \text{diag}(x)$ la matriu diagonal X resultant de prendre els elements del vector x i disposar-los en la diagonal d' X .

Capítol 2

Mètodes de punt interior

El model d'optimització contínua més simple és el de programació lineal. En aquest model totes les funcions del problema són funcions lineals. Malgrat que matemàticament és el model més simple, el seu camp d'aplicació és molt ampli. Fins i tot en aquells casos en que tenim funcions no lineals sovint es possible fer aproximacions lineals de forma local i aprofitar el model lineal. Si conservem totes les funcions lineals amb la variació de permetre incloure en la funció objectiu termes que utilitzen productes de parelles de variables, anomenats termes quadràtics, llavors obtenim un problema quadràtic. Aquest model quadràtic és important també per les seves aplicacions pràctiques, així com per servir per a l'aproximació de problemes no lineals convexos. Com s'ha comentat en la introducció, en aquesta memòria utilitzarem models quadràtics per a aproximar problemes lineals, una tècnica innovadora que podem situar dintre del context de la regularització numèrica de problemes lineals. En aquest capítol establím les bases formulant els models lineal i quadràtic així com mostrem els seus mètodes de resolució actuals fins al nivell de detall requerit per als següents capítols, i adreçant al lector a referències especialitzades per als detalls que no són necessaris per a la comprensió del material i que a més a més consumirien excessiu espai en aquesta memòria.

2.1 Programació lineal (PL): formulació

El problema lineal que volem resoldre el donarem en la seva formulació estàndard:

$$\begin{aligned} \min_x \quad & c^T x \\ \text{subjecte a} \quad & Ax = b \\ & x \geq 0 \end{aligned} \tag{2.1}$$

on $x \in \mathbb{R}^n$ és el vector de variables, $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ és la matriu de restriccions del problema (amb $m < n$), $b \in \mathbb{R}^m$ és el vector de termes independents (o disponibilitats) i $c \in \mathbb{R}^n$ el vector de costos lineals. El conjunt de punts $\{x \mid Ax = b, x \geq 0\}$ s'anomena regió factible primal, o simplement regió factible, i els punts d'aquesta regió són els punts factibles primals del problema. Suposarem que la matriu A és de rang complet per files.

La funció lagrangiana per al problema (2.1) és:

$$L(x, y, z) = c^T x - \sum_{i=1}^m y_i (A_i x - b_i) - \sum_{j=1}^n z_j x_j \quad (2.2)$$

on A_i és la fila i -èsima de la matriu A , i els vectors y, z contenen els multiplicadors de Lagrange de les restriccions $Ax = b, x \geq 0$ respectivament.

Com tot problema lineal és també un problema convex, de la teoria general d'optimització convexa amb restriccions (veure, per exemple, [52]) podem particularitzar les condicions necessàries d'existència de l'òptim dels problemes convexos per al problema lineal (2.1) (veure [44], capítol 13) per tal d'obtenir les anomenades equacions de Karush-Kuhn-Tucker, o abreujadament condicions KKT:

$$A^T y + z = c \quad (2.3a)$$

$$Ax = b \quad (2.3b)$$

$$z_i x_i = 0 \quad (2.3c)$$

$$(x, z) \geq 0 \quad (2.3d)$$

D'altre banda de les propietats dels problemes convexos sabem que a cada problema convex li podem associar un altre problema anomenat el seu dual, format amb les mateixes dades reorganitzades, que en el cas del problema (2.1) és:

$$\begin{aligned} \max_y \quad & b^T y \\ \text{subjecte a} \quad & A^T y + z = c \\ & z \leq 0 \end{aligned} \quad (2.4)$$

La parella (y, z) són les variables duals, i el conjunt $\{(y, z) \mid A^T y + z = c, z \geq 0\}$ s'anomena regió factible dual. El problema original (2.1) s'anomena problema primal, i als dos problemes en conjunt ens referim com problema primal-dual. És evident que hi ha una estreta connexió del problema primal-dual amb les condicions KKT del problema: les restriccions dels problemes apareixen com a condicions KKT i les variables y, z del problema dual són els multiplicadors de Lagrange del problema primal. Així, doncs, si el punt (x^*, y^*, z^*) és

solució de les condicions KKT llavors resol simultàniament els problemes primal i dual. D'altra banda el teorema de la dualitat forta per programació lineal afirma que en un problema factible l'òptim primal $c^T x^*$ i l'òptim dual $b^T y^*$ coincideixen; es defineix el gap dual en el punt primal-dual (x, y) com la diferència $|c^T x - b^T y|$ en valor absolut entre els valors de les funcions objectius primal i dual, que ha de ser igual a zero en l'òptim. Un criteri molt usat en els algorismes de cerca de l'òptim per decidir si un punt primal-dual (x, y) està prou a prop de l'òptim (x^*, y^*) és veure si el gap dual relatiu, $|c^T x - b^T y| / (1 + |c^T x|)$ és menor que certa tolerància.

2.2 Mètodes de punt interior

En aquesta memòria ens centrem en els mètodes de resolució de les equacions (2.3) que s'anomenen mètodes de punt interior, anomenats així degut al fet de que les iteracions que realitzen generen una seqüència de punts $\{(x^{(0)}, y^{(0)}, z^{(0)}), \dots, (x^{(k)}, y^{(k)}, z^{(k)})\}$ tal que tots ells estan inclosos en l'entorn $\{(x, z) > 0\}$, és a dir, són interiors a aquest entorn. En general existeixen diverses solucions del sistema (2.3a)–(2.3c) que no verifiquen (2.3d); els mètodes de punt interior eviten caure en alguna d'aquestes solucions incompletes mantenint els successius punts de cada iteració lluny de la frontera $\{(x, z) = 0\}$. S'han proposat diversos mètodes dintre d'aquesta categoria d'algorismes de punt interior:

- Mètodes d'escalat afí (Dikin, 1967): històricament els primers, transformen el problema original mitjançant un escalat afí de les variables; han quedat àmpliament superats per mètodes més moderns.
- Mètodes de transformacions projectives: també transformen el problema original, però de forma més elaborada. El famós algorisme de Karmarkar (1984) que va ser el primer en aconseguir tenir complexitat polinòmica $\mathcal{O}(n^{3,5})$ [33] pertany a aquesta categoria.
- Mètodes de barrera: modifiquen la funció objectiu original afegint nous termes que actuen com una barrera per evitar violar les restriccions de no negativitat; els termes afegits tenen un pes μ decreixent a mesura que ens acostem a l'òptim. Això permet resoldre el problema original d'optimització amb restriccions de desigualtat resolent una seqüència de problemes sense restriccions. El mètode original de Fiacco i McCormick [23] efectua dos tipus d'iteracions: la principal on es va actualitzant el paràmetre μ i les iteracions interiors on per a cada μ es resol de forma iterativa el problema de minimització sense restriccions. Es pot demostrar (veure per exemple [23]) que la seqüència de solucions generada convergeix a la solució del problema a mesura que $\mu \rightarrow 0$. El conjunt de solucions proporciona la trajectòria $\{(x^{(0)}, y^{(0)}, z^{(0)}), \dots, (x^{(k)}, y^{(k)}, z^{(k)})\}$ que coneixem com el camí central (*central path*) del problema 2.1. Més recentment els mètodes

de barrera resolen els problemes de minimització sense restriccions aproximadament, de forma que només efectuen un únic tipus d'iteració.

- Mètodes primals-duals de seguiment del camí central (*primal-dual path-following methods*): resolen les equacions (2.3) aplicant variants especialitzades del mètode de Newton per a sistemes d'equacions no lineals, modificant les direccions proporcionades de forma que les restriccions de no negativitat es satisfan de forma estricta en cada iteració, això és, $(x_i, z_i) > 0$, $i = 1, 2, \dots, n$. Per a mantenir els successius punts lluny de la frontera $x = 0$ segueixen una trajectòria propera a l'anomenat camí central (*central path*) del problema primal-dual (2.1),(2.4). Estan directament relacionats amb els mètodes de barrera; la diferència fonamental és que els mètodes de seguiment del camí tracten les variables duals (y, z) no com a simples variables auxiliars, sinó com a variables al mateix nivell que les primals.

Els mètodes de barrera i els mètodes primals-duals de seguiment del camí central tenen fonaments comuns. D'altre banda, aquests últims han demostrat ser els més eficients per a problemes a gran escala. En la categoria de mètodes de punt interior de seguiment del camí central cauen els algorismes que treballarem en aquesta memòria. A més a més, la regularització que es presentarà en els següents capítols es basa en una funció de barrera. En els següents apartats es mostren, breument, els components necessaris per formular la regularització de la funció de barrera i el mètode de punt interior associat.

2.3 El mètode de Newton en punt interior

La solució de les equacions KKT d'optimalitat (2.3) proporciona l'òptim del problema (2.1) i del (2.4) simultàniament. El mètode més usat per a resoldre-les és el mètode de Newton per a sistemes d'equacions no lineals. Donada l'equació $F(p) = 0 \in \mathbb{R}^n$, $p \in \mathbb{R}^n$ realitza iteracions de forma que, en la iteració k -èsima, actualitza el punt p_k de la següent forma:

- Calcula una solució d_k del sistema lineal $\nabla F(p_k)d_k = -F(p_k)$, on $\nabla F(p_k)$ representa la matriu jacobiana d' $F(p)$ en el punt p_k
- Usa d_k com la direcció de moviment: $p_{k+1} = p_k + d_k$

La convergència està assegurada si el punt inicial p_0 està en un entorn de l'òptim p^* , altrament el mètode pot ser divergent [36, capítol 5].

Per a resoldre les equacions KKT es defineix una aplicació $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ tal com

$$F(x, y, z) = \begin{bmatrix} A^T y + z - c \\ Ax - b \\ XZe \end{bmatrix} \quad (2.5)$$

on X, Z són matrius diagonals que contenen els vectors x, z respectivament, i e és el vector $(1, \dots, 1) \in \mathbb{R}^n$; llavors es resol l'equació $F(x, y, z) = 0$ subjecte a $(x, z) \geq 0$. Aplicant el mètode de Newton en cada iteració es resol el sistema

$$\begin{bmatrix} & A^T & I \\ A & & \\ Z & & X \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta x^{(k)} \\ \Delta y^{(k)} \\ \Delta z^{(k)} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} A^T y^{(k)} + z^{(k)} - c \\ Ax^{(k)} - b \\ X^{(k)} Z^{(k)} e \end{bmatrix} \quad (2.6)$$

L'actualització del punt ha de tenir en compte la restricció $(x, z) \geq 0$. Per tant, a banda del problema d'iniciar les iteracions amb un punt inicial prou bo, el mètode de Newton pur aplicat a les equacions (2.3) presenta el problema important del tractament de les desigualtats (2.3d). Una forma de resoldre aquest problema és incorporant les desigualtats en la definició de la funció $F(x, y, z)$, com es veu en la següent secció.

2.4 Funcions de barrera

Donat el problema d'optimització

$$\min_x f(x) \quad f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R} \quad (2.7)$$

$$\text{subjecte a } c_i(x) \geq 0 \quad i \in I, c_i : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R} \quad (2.8)$$

la seva regió factible està definida per

$$\mathcal{F}^0 = \{x \in \mathbb{R}^n \mid c_i(x) \geq 0, \quad i \in I\}$$

Una funció de barrera $\Phi(x) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ per a aquest problema és aquella que verifica

- $\Phi(x)$ pren valors $+\infty$ en tot \mathbb{R}^n excepte en \mathcal{F}^0
- $\Phi(x)$ és contínua i derivable en \mathcal{F}^0
- Quan x s'atansa a la frontera de \mathcal{F}^0 , $\Phi(x)$ s'atansa a $+\infty$

Usant una funció de barrera és possible transformar un problema d'optimització amb restriccions de no negativitat en una seqüència de problemes sense restriccions. En el seu treball pioner, Fiacco i McCormick [23] van donar cos teòric a la classe de mètodes d'optimització amb restriccions que cerca una solució reemplaçant el problema original per una seqüència de problemes sense restriccions. Ho van fer en el context més general d'optimització no lineal. Parlant en temes generals, es reemplacen les restriccions per funcions de penalització que s'afegeixen a la funció objectiu.

Per al cas particular del problema lineal (2.1) les restriccions són simplement $c_i(x) = x_i$, $i = 1, \dots, n$. La substitució del problema original es fa de la següent forma:

$$\begin{aligned} \min_x \quad & c^T x \\ \text{subjecte a} \quad & Ax = b \\ & x \geq 0 \\ & \Updownarrow \\ \min_x \quad & c^T x + \mu \Phi(x) \\ \text{subjecte a} \quad & Ax = b \end{aligned} \tag{2.9}$$

$$\tag{2.10}$$

on $\mu \in \mathbb{R}^+$ s'anomena el paràmetre de la barrera. El terme addicional $\mu\Phi(x)$ en la funció objectiu manté als successius punts de les iteracions allunyat del límit $x = 0$. La solució de (2.9) no serà la mateixa que la del problema original sinó que dependrà del valor de μ . Ara bé, si resollem (2.9) per a una seqüència decreixent de valors de μ sembla lògic esperar que la influència del terme de barrera decreixerà fins ser negligible comparat amb la funció objectiu $c^T x$ de forma que en el límit $\mu \rightarrow 0$ l'òptim de (2.9) serà també solució de (2.1). En efecte, el mínim de (2.9) s'atansa a la solució de (2.7) quan $\mu \rightarrow 0$ sota certes condicions (veure [59], teorema 5, i [23], pàgina 79, teorema 12). A més a més, en cada iteració amb $\mu > 0$ la barrera assegura que es compleix la restricció $x \geq 0$.

2.5 Mètode clàssic de barrera logarítmica

La funció de barrera més usada és la de barrera logarítmica, que per al problema (2.7) pren la forma

$$\Phi(x) = - \sum_{i=1}^n \log c_i(x) \tag{2.11}$$

i quan afegim la funció de barrera a la funció objectiu del problema (2.7), la nova funció objectiu esdevé

$$F(x; \mu) = f(x) - \Phi(x) = f(x) - \mu \sum_{i=1}^n \log c_i(x) \tag{2.12}$$

El mètode clàssic de barrera logarítmica de Fiacco-McCormick [23] usa un punt inicial factible x^0 i un paràmetre inicial de barrera $\mu^0 > 0$ per a resoldre

$$\min_x F(x; \mu^k) = f(x) - \mu^k \sum_{i=1}^n \log c_i(x) \quad (2.13)$$

després actualitza el paràmetre $\mu^{k+1} = \gamma\mu^k$ amb $0 < \gamma < 1$ i itera fins que μ^k sigui prou petit. Els algorismes basats en aquest mètode presenten dos tipus d'iteracions: la principal on es va actualitzant el paràmetre μ i les iteracions interiors on per a cada μ es resol de forma iterativa el problema de barrera. En cada iteració interior tenim punts factibles primals; en canvi només obtenim un punt factible dual al final de cada iteració principal. Es va anomenar al mètode tècnica de minimització seqüencial sense restriccions (“*sequential unconstrained minimization technique - SUMT*”).

Un problema important d'aquest mètode és el progressiu deteriorament del condicionament numèric del problema a mesura que s'atansa a l'òptim, doncs llavors algunes de les restriccions $c_i(x)$ poden prendre valors nuls: la condició de primer ordre d'òptim per a (2.13) és $\nabla_x F(x; \mu) = \nabla_x f(x) - \mu^k \sum_i \frac{1}{c_i(x)} = 0$, que per aquelles restriccions que en l'òptim verifiquen $c_i(x^*) = 0$ prendrà valors infinits. També la matriu Hessiana d' $F(x; \mu)$ pren valors infinits quan $c_i(x^*) = 0$.

De fet, en el moment que es va proposar aquest mètode (1961), no es pensava que pugues ser competitiu en programació lineal, un camp dominat en aquell moment pel mètode simplex. A banda del mal condicionament comentat, la solució del problema lineal (2.6) amb matrius A esparses no estava prou desenvolupat. Encara calia el desenvolupament de noves tècniques per a poder ser aplicable de forma pràctica el mètode de barrera en programació lineal, com ara les implementacions eficients de les factoritzacions de Cholesky per a matrius esparses. Un altre modificació posterior important ha estat resoldre simultàniament el problema primal i el dual.

2.6 Camí central primal-dual

El problema de barrera que es planteja per tal de resoldre (2.7) és

$$\min_x F(x; \mu) = f(x) - \mu \sum_{i=1}^n \log c_i(x)$$

La condició necessària d'existència d'òptim és

$$\nabla_x F(x; \mu) = \nabla_x f(x) - \mu \sum_{i=1}^n \frac{\nabla c_i(x)}{c_i(x)} = 0 \quad (2.14)$$

si definim el multiplicador de Lagrange z de la següent forma

$$z_i(\mu) = \frac{\mu}{c_i(x)}$$

llavors (2.14) ens quedarà

$$\nabla_x f(x) - \sum_{i=1}^n z_i \nabla c_i(x) = 0 \quad (2.15)$$

Definim ara la funció de Lagrange

$$\mathcal{L}(x, \lambda) = f(x) - \sum_{i=1}^n z_i c_i(x) \quad (2.16)$$

La condició (2.15) serà equivalent a fer $\nabla_x \mathcal{L}(x, z) = 0$, que equival a obtenir una de les condicions KKT del problema original (2.7).

Anem ara a restringir-nos a la programació lineal. El problema lineal (2.1) té, a diferència de (2.7), restriccions d'igualtat a més a més de les de desigualtat. D'altra banda, les restriccions $c_i(x) \geq 0$ són simplement $x \geq 0$. Llavors el problema de barrera que associem al problema (2.1) és

$$\min_x F(x; \mu) = c^T x - \mu \sum_{i=1}^n \log x_i \quad (2.17a)$$

$$\text{subjecte a } Ax = b \quad (2.17b)$$

Procedint com abans per a obtenir la condició necessària d'òptim:

$$\begin{aligned} \nabla_x F(x; \mu) &= c - \mu X^{-1} e - A^T y = 0 \\ z &= \mu X^{-1} e \Rightarrow \\ c - z - A^T y &= 0 \end{aligned}$$

Aquesta condició d'optimalitat de primer ordre coincideix amb la condició de factibilitat del problema dual (2.4). La resta de condicions d'optimalitat de primer ordre són:

$$\begin{aligned} Ax - b &= 0 \text{ (factibilitat primal)} \\ (x, z) &\geq 0 \text{ (no negativitat)} \\ z_i x_i &= \mu \text{ (complementarietat)}, \text{ on } i : 1 \dots n \end{aligned}$$

La condició de complementarietat $z_i x_i = \mu$ implica que, per tal de que les condicions KKT

del problema de barrera (2.17) coincideixin amb les del problema lineal original (2.1) ha de ser $\mu = 0$. Definim el camí central primal-dual C com el conjunt de solucions dels problemes (2.17) i (2.4) quan variem μ . És una corba parametritzada per μ que té un paper important en els mètodes de punt interior. Les equacions del camí central són

$$A^T y + z = c \quad (2.18a)$$

$$Ax = b \quad (2.18b)$$

$$z_i x_i = \mu \quad i = 1, \dots, n \quad (2.18c)$$

$$(x, z) \geq 0 \quad (2.18d)$$

i difereixen només lleugerament de les condicions KKT (2.3): s'ha pertorbat la condició de complementarietat. Veiem que el problema de barrera aplicat a programació lineal ens porta a les equacions primals-duals del camí central.

Aquesta corba té les següents propietats importants (veure [60, pàgines 36 i següents]):

1. El valor dels productes $z_i x_i$ és el mateix per a tot i .
2. Per a cada valor de μ existeix una solució única (x, y, z) de (2.18), de forma que el camí C està ben definit.
3. El gap dual $c^T x_\mu - b^T y_\mu \geq 0$, una de les mesures que són usades en els algorismes per estimar la distància a l'òptim, doncs en ell es verifica $c^T x^* - b^T y^* = 0$, pren el valor $n\mu$.
4. Els punts límits $x^* = \lim_{\mu \rightarrow 0} x_\mu$ i $(y^*, z^*) = \lim_{\mu \rightarrow 0} (y_\mu, z_\mu)$ existeixen i són solucions del problema primal i del dual, respectivament.

2.7 Mètodes de punt interior de seguiment del camí primal-dual

Aquesta família de mètodes modifiquen lleugerament l'equació (2.5) de la següent forma:

$$F(x, y, z) = \begin{bmatrix} A^T y + z - c \\ Ax - b \\ XZe - \tau e \end{bmatrix} = 0 \quad (2.19)$$

$$(x, z) \geq 0$$

La modificació només ha estat afegir el paràmetre escalar $\tau > 0$ en la condició de complementarietat, però malgrat això els canvis resultants són molt significatius. Ara obliguem als productes $x_i z_i$ a tenir el mateix valor positiu per a $i = 1, \dots, n$. En aquest context es defineix el camí central C com la trajectòria de punts estrictament factibles $(x(\tau), y(\tau), z(\tau))$ dependent del paràmetre τ tals que verifiquen (2.19) per a un τ donat. En cada iteració es resol (2.19) per a un valor de τ , el qual es va decrementant progressivament. Es demostra (veure [60] pàgina 37 i següents) que per a cada valor de τ existeix una única solució de (2.19) i que per tant la trajectòria C està ben definida. D'altre banda a mesura que $\tau \rightarrow 0$ les solucions de (2.19) aproximen millor les de (2.5).

En la pràctica el que realment fan aquests algorismes és relaxar la restricció $XZe - \tau e = 0$ substituint-la per la pertinença dels punts (x, z) a un entorn de la trajectòria C , de tal manera que els productes $x_i z_i$ no prenen exactament el valor τ sinó algun altre valor aproximat. Els entorns més usats són:

- L'entorn $N_2(\theta)$ usat pels algorismes de passa curta (*short step path following*) que mesura la distància al camí central usant la norma euclídea:

$$N_2(\theta) = \{(x, y, z) \mid \|XZe - \mu e\| \leq \theta\} \quad (2.20)$$

on $\theta \in [0, 1)$ és un paràmetre ajustable de l'algorisme, i X, Z són les matrius diagonals que contenen els elements dels vectors x, z respectivament.

- L'entorn $N_{-\infty}(\lambda)$ usat pels algorismes de passa llarga (*long step path following*):

$$N_{-\infty}(\gamma) = \{(x, y, z) \mid x_i z_i \geq \gamma \mu \ i = 1, 2, \dots, n \ \gamma \in (0, 1)\}. \quad (2.21)$$

Mentre que els algorismes que usen la passa curta tenen millor complexitat teòrica, els que usen la passa llarga obtenen millors prestacions computacionals; el següent resultat [60, capítol 5] mostra les complexitats de tots dos tipus d'algorismes:

Teorema 2.7.1 (Complexitat dels algorismes de punt interior)

Donat un $\epsilon > 0$ suposem que el punt inicial $(x^{(0)}, y^{(0)}, z^{(0)})$ que es pren en l'algorisme de punt interior verifica que $\mu_0 \leq 1/\epsilon^k$ per cert valor positiu k ; llavors existeix un valor K tal que $\mu_k \leq \epsilon$ per tot $k \geq K$, i aquest valor K és de l'ordre $\mathcal{O}(n \log 1/\epsilon)$ per l'algorisme de passa llarga i de l'ordre de $\mathcal{O}(\sqrt{n} \log 1/\epsilon)$ per l'algorisme de passa curta.

Tots els algorismes usats en aquesta memòria són de passa llarga. D'altre banda, si a més a més de la pertinença a un entorn del camí central exigim que els punts (x, y, z) siguin factibles, obtenim la família de mètodes factibles, mentre que si permeten als successius punts $(x^{(k)}, y^{(k)}, z^{(k)})$ de ser no factibles, és a dir que no compleixen exactament les equacions $r_c = Ay + z - c = 0$, $r_b = Ax - b = 0$, obtenim la família de mètodes infactibles primals-duals

Algorisme 2.1 Primal-dual de punt interior per a programació lineal

Donat $(x^{(0)}, y^{(0)}, z^{(0)})$ tal que $(x^{(0)}, z^{(0)}) > 0$; fer $k = 0$

Mentre $(x^{(k)}, y^{(k)}, z^{(k)})$ no sigui òptim **fer**

- Calcular $\mu_k = (x^{(k)})^T z^{(k)} / n$, σ_k
- Resoldre

$$\begin{bmatrix} & A^T & 1_n \\ A & & \\ Z & & X \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta x^{(k)} \\ \Delta y^{(k)} \\ \Delta z^{(k)} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} A^T y^{(k)} + z^{(k)} - c \\ Ax^{(k)} - b \\ X^{(k)} Z^{(k)} e - \sigma_k \mu_k e \end{bmatrix} \quad (2.22)$$

- Escollir $\alpha_k \in (0, 1]$ tal que $(x^{(k+1)}, y^{(k+1)}, z^{(k+1)}) = (x^{(k)}, y^{(k)}, z^{(k)}) + \alpha_k (\Delta x^{(k)}, \Delta y^{(k)}, \Delta z^{(k)})$ verifiqui $(x^{(k+1)}, z^{(k+1)}) \geq 0$
- $k = k + 1$

Fi_Mentre

de punt interior, els quals afiten superiorment els residus $\|Ax^k - b\|$, $\|A^T y^k + z^k - c\|$ en cada iteració per a algun múltiple del paràmetre $\tau_k = \sigma_k \mu_k$, de forma que a mesura que $\tau \rightarrow 0$ les successives solucions de (2.19) aconseguen progressivament la factibilitat primal-dual.

Un altre característica dels algorismes de seguiment del camí és que la direcció original proporcionada pel mètode de Newton és modificada per tal d'allunyar-la de la frontera de la regió factible i així permetre una llargada de passa superior sense violar les restriccions de no negativitat. Per aconseguir-ho es defineix un paràmetre de centrat $\sigma \in [0, 1]$ i una mesura dual $\mu = x^T z / n$ de forma que $\tau = \sigma \mu$ i les equacions que es resolen en cada iteració són

$$F(x, y, z) = \begin{bmatrix} A^T y + z - c \\ Ax - b \\ X Z e - \sigma \mu e \end{bmatrix} = 0$$

En cada passa, l'algorisme de punt interior ha de decidir quin és el valor de σ : valors propers a 0 proporcionen la direcció de Newton que resol exactament les equacions KKT del problema, mentre que valors propers a 1 desvien la direcció de forma que el proper punt (x, z) verifiqui $x_i z_i = \mu$, $1 \leq i \leq n$. L'esquema de l'algorisme ve donat per l'Algorisme 2.1.

2.8 Correccions de segon ordre a la passa de Newton

Si en l'Algorisme 2.1 es pren la llargada de passa $\alpha_k = 1$ llavors s'aconsegueix simultàniament factibilitat primal i dual, això és, els residus $r_c = A^T y^{(k)} + z^{(k)} - c$, $r_b = Ax^{(k)} - b$ s'anul·len; en canvi el residu $r_{xz} = X^{(k)}Z^{(k)}e - \sigma_k \mu_k e$ no s'anula: queda un terme no nul $\Delta X^{(k)} \Delta Z^{(k)} e$ de segon ordre. Mehrotra [41] va proposar una nova correcció a la passa de Newton que és força utilitzada en el programari de punt interior consistent en afegir un terme addicional, anomenat de correcció, en la determinació de la passa, per a millorar la reducció del residu r_{xz} . La determinació de la passa corregida es realitza en dos fases:

- obtenció de la passa de predicció: es calcula primer la passa $d^p = (\Delta_p x^{(k)}, \Delta_p y^{(k)}, \Delta_p z^{(k)})$, anomenada de predicció, resolen el sistema

$$\begin{bmatrix} & A^T & 1_n \\ A & & \\ Z & & X \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta_p x^{(k)} \\ \Delta_p y^{(k)} \\ \Delta_p z^{(k)} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} A^T y^{(k)} + z^{(k)} - c \\ Ax^{(k)} - b \\ X^{(k)} Z^{(k)} e \end{bmatrix}$$

- obtenció de la passa de correcció i centralització: usant d^p es calcula el paràmetre de centrat σ_k més adient, tenint en compte la longitud màxima permesa per a la passa d^p sense violar les restriccions de no negativitat, i es determina la passa corregida $d = (\Delta_c x^{(k)}, \Delta_c y^{(k)}, \Delta_c z^{(k)})$ resolent el següent sistema

$$\begin{bmatrix} & A^T & 1_n \\ A & & \\ Z & & X \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta_c x^{(k)} \\ \Delta_c y^{(k)} \\ \Delta_c z^{(k)} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ -\sigma_k \mu_k e + \Delta_p x^{(k)} \Delta_p z^{(k)} e \end{bmatrix} \quad (2.23)$$

En l'última equació de complementarietat es combinen el terme de correcció $\Delta_p x^{(k)} \Delta_p z^{(k)} e$ i el de centralització $\sigma_k \mu_k e$. Degut a l'utilització de aquestes dues passes el mètode és conegut per la denominació algorisme de punt interior predictor-corrector de Mehrotra.

Com les matrius dels sistemes de les passes de predicció i de correcció són iguals, només cal fer una única factorització per a resoldre els dos sistemes, de forma que la complexitat afegida per al càlcul de dues direccions en lloc d'una no és gran. L'esquema de l'algorisme resultant es mostra a l'Algorisme 2.2.

Algunes implementacions conegudes que usen la correcció de Mehrotra són LIPSOL [61], PCx [20] i LOQO [57]. L'algorisme que usarem en la Secció 3.6 per a proporcionar resultats computacionals per la regularització quadràtica de problemes lineals generals també usa la correcció de segon ordre.

Algorisme 2.2 Primal-dual de punt interior, correccions de Mehrotra

Donat $(x^{(0)}, y^{(0)}, z^{(0)})$ tal que $(x^{(0)}, z^{(0)}) > 0$; fer $k = 0$

Mentre $(x^{(k)}, y^{(k)}, z^{(k)})$ no sigui òptim **fer**

- Calcular $\mu_k = (x^{(k)})^T z^{(k)} / n$, σ_k
- Resoldre

$$\begin{bmatrix} & A^T & 1_n \\ A & & \\ Z & & X \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta_p x^{(k)} \\ \Delta_p y^{(k)} \\ \Delta_p z^{(k)} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} A^T y^{(k)} + z^{(k)} - c \\ Ax^{(k)} - b \\ X^{(k)} Z^{(k)} e \end{bmatrix} \quad (2.24)$$

- Calcular σ_k
- Resoldre

$$\begin{bmatrix} & A^T & 1_n \\ A & & \\ Z & & X \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta_c x^{(k)} \\ \Delta_c y^{(k)} \\ \Delta_c z^{(k)} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ -\sigma_k \mu_k e + \Delta_p x^{(k)} \Delta_p z^{(k)} e \end{bmatrix} \quad (2.25)$$

- $(\Delta x^{(k)}, \Delta y^{(k)}, \Delta z^{(k)}) = (\Delta_p x^{(k)}, \Delta_p y^{(k)}, \Delta_p z^{(k)}) + (\Delta_c x^{(k)}, \Delta_c y^{(k)}, \Delta_c z^{(k)})$
- Escollir $\alpha_k \in (0, 1]$ tal que $(x^{(k+1)}, y^{(k+1)}, z^{(k+1)}) = (x^{(k)}, y^{(k)}, z^{(k)}) + \alpha_k (\Delta x^{(k)}, \Delta y^{(k)}, \Delta z^{(k)})$ verifiqui $(x^{(k+1)}, z^{(k+1)}) \geq 0$
- $k = k + 1$

Fi_Mentre

2.9 Extensió a la programació quadràtica amb fites superiors a les variables

Un problema d'optimització on la funció objectiu és quadràtica i les restriccions són lineals s'anomena problema quadràtic. La seva formulació estàndard és:

$$\begin{aligned} \min_x \quad & c^T x + \frac{1}{2} x^T Q x \\ \text{subjecte a} \quad & Ax = b \\ & x \geq 0 \end{aligned} \quad (2.26)$$

on Q és una matriu $n \times n$ simètrica. Aquest tipus de problemes tenen la seva pròpia àrea d'aplicacions pràctiques, però també són útils com a subproblemes en aquells mètodes d'opti-

mització que aproximen un problema per una seqüència de problemes quadràtics, i és aquest tipus d'aplicacions el que ens interessa tractar aquí. Dintre d'aquesta categoria de mètodes esmentarem els següents:

- Mètode de programació quadràtica seqüencial (*Sequential Quadratic Programming*) [44, capítol 18]: aproximen un problema no lineal

$$\min_x f(x) \quad \text{subjecte a } c(x) \geq 0$$

per una seqüència de problemes quadràtics. En la iteració k -èsima de l'algorisme, s'aproxima localment el problema original per un model quadràtic al voltant del punt actual x_k .

- Mètode de programació amb penalització quadràtica (*Quadratic Penalty Method*) [44, capítol 17]: reemplacen un problema amb restriccions per una seqüència de problemes sense restriccions on les restriccions originals són substituïdes per termes quadràtics de penalització en la funció objectiu, de forma que els termes de penalització creixen quan les restriccions són violades i és fan zero quan no ho són. Per exemple si el problema original és un problema amb només restriccions d'igualtat:

$$\min_x f(x) \quad \text{subjecte a } c_i(x) = 0, \quad i \in \Gamma \quad (2.27)$$

llavors la funció quadràtica de penalització $Q(x, \mu)$ serà:

$$Q(x, \mu) = f(x) + \frac{1}{2\mu} \sum_{i \in \Gamma} c_i^2(x)$$

on μ és el paràmetre de penalització, que s'atansa progressivament a zero, i per tant incrementant progressivament la penalització a les violacions de la restricció $c_i(x) = 0$.

- Mètode de la Lagrangiana augmentada [44, capítol 17]: de forma semblant al mètode de penalitzacions quadràtiques, també usa un terme quadràtic de penalització associat a les restriccions del problema, però l'afegeix a la funció Lagrangiana del problema en comptes de a la funció objectiu, de forma que obtenim l'anomenada Lagrangiana augmentada. Per al mateix exemple (2.27) amb només restriccions d'igualtat la Lagrangiana augmentada serà:

$$\mathcal{L}_{\mathcal{A}}(x, \lambda, \mu) = f(x) - \sum_{i \in \Gamma} \lambda_i c_i(x) + \sum_{i \in \Gamma} c_i^2(x)$$

que només difereix de la Lagrangiana estàndard en el terme quadràtic de penalització. Si comparem amb el mètode de penalitzacions quadràtiques tenim que el terme

$\frac{1}{2\mu} \sum_{i \in \Gamma} c_i^2(x)$ esdevé mal condicionat a mesura que $\mu \rightarrow 0$, en canvi en la formulació de la Lagragiana augmentada això no succeeix.

La matriu Hessiana de la funció objectiu del problema quadràtic (2.26) coincideix amb la matriu Q . Per tant si Q és definida positiva, llavors (2.26) és un problema quadràtic convex. En els casos on la matriu Q és definida positiva i a més a més diagonal el problema (2.26) serà convex separable, això és, la funció objectiu $c^T x + \frac{1}{2} x^T Q x$ és podrà expressar com la suma d' n funcions objectius convexes $\sum_i Q_{ii} x_i^2 + c_i x_i$. El cas convex i separable no és gaire més difícil de resoldre que el problema lineal (2.1). En efecte, les condicions KKT per al problema (2.26) són

$$A^T y + z = c + Qx \quad (2.28)$$

$$Ax = b \quad (2.29)$$

$$z_i x_i = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (2.30)$$

$$x, z \geq 0 \quad (2.31)$$

i si (2.26) és separable llavors l'única diferència amb les condicions KKT del problema lineal (2.1) és el terme Qx on Q és una matriu diagonal. D'altra banda si el problema quadràtic és convex també es manté la teoria de la dualitat esmentada en l'apartat anterior.

En el cas del problema quadràtic (2.26) el problema de barrera és

$$\min_x F(x; \mu) = c^T x + \frac{1}{2} x^T Q x - \mu \sum_{i=1}^n \log x_i, \quad (2.32)$$

$$\text{subjecte a } Ax = b \quad (2.33)$$

i és immediat veure que les equacions KKT queden

$$\begin{aligned} c + Qx - z - A^T y &= 0 \\ Ax - b &= 0 \\ x, z &\geq 0 \\ z_i x_i &= \mu \end{aligned} \quad (2.34)$$

Considerem ara una nova extensió en la que les variables primals del problema quadràtic estiguin afitades superiorment per $u \in \mathbb{R}^n$:

$$\begin{aligned}
& \min_x \quad c^T x + \frac{1}{2} x^T Q x \\
& \text{subjecte a} \quad Ax = b \\
& \quad \quad \quad 0 \leq x \leq u
\end{aligned} \tag{2.35}$$

Aquesta formulació ens serà útil quan desenvolupem, en el proper capítol, la regularització quadràtica d'un problema lineal. Incorporant variables de folga s l'última desigualtat esdevé $x + s = u$, $(x, s) \geq 0$.

El corresponent problema dual és

$$\begin{aligned}
& \max_{x,y} \quad b^T y - \frac{1}{2} x^T Q x - u^T w \\
& \text{subjecte a} \quad A^T y - Q x + z - w = c \\
& \quad \quad \quad (z, w) \geq 0
\end{aligned} \tag{2.36}$$

i per tant el gap dual relatiu, que usarem més endavant en els algorismes, serà

$$\frac{|(c^T x + \frac{1}{2} x^T Q x) - (b^T y - \frac{1}{2} x^T Q x - u^T w)|}{1 + |(c^T x + \frac{1}{2} x^T Q x)|} \tag{2.37}$$

El problema de barrera associat al problema (2.35) és

$$\min_x F(x; \mu) = c^T x + \frac{1}{2} x^T Q x - \mu \left(\sum \log x_i + \sum \log(u_i - x_i) \right) \tag{2.38}$$

$$\text{subjecte a } Ax = b \tag{2.39}$$

i les condicions necessàries i suficients d'òptim esdevenen

$$-Qx + z - w + A^T y = c \tag{2.40a}$$

$$Ax = b \tag{2.40b}$$

$$(w, z) \geq 0 \tag{2.40c}$$

$$u > x > 0 \tag{2.40d}$$

$$XZe = \mu e \tag{2.40e}$$

$$(U - X)We = \mu e \tag{2.40f}$$

on $e \in \mathbb{R}^n$ és el vector $(1, 1, \dots, 1)$ i les matrius $X, Z, U, W \in \mathbb{R}^{n \times n}$ són matrius diagonals que contenen els elements dels vectors x, z, u, w respectivament. Les dues primeres igualtats de (2.40) imposen la factibilitat dual i primal, respectivament, les dues desigualtats següents expressen la no negativitat de les variables i les dues últimes igualtats imposen complementarietat.

Definim ara la funció $F(x, y, z, w) : \mathbb{R}^{3n+m} \rightarrow \mathbb{R}^{3n+m}$ usant les equacions de factibilitat i complementarietat de (2.40b):

$$F(x, y, z, w) = \begin{bmatrix} -Qx + z - w + A^T y - c \\ Ax - b \\ XZe - \mu e \\ (U - X)We - \mu e \end{bmatrix} \quad (2.41)$$

Tenim que (2.40b) equival a

$$\begin{aligned} F(x, y, z, w) &= 0 \\ (w, z) &\geq 0 \\ u > x &> 0 \end{aligned}$$

Si apliquem el mètode de Newton al problema $F(x, y, z, w) = 0$ per a obtenir les direccions de moviment $(\Delta x, \Delta y, \Delta z, \Delta w)$, obtenim el sistema lineal següent:

$$\begin{bmatrix} -Q & A^T & 1_n & -1_n \\ A & & & \\ Z & & X & \\ -W & & & U - X \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta x \\ \Delta y \\ \Delta z \\ \Delta w \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r_c \\ r_b \\ r_{xz} \\ r_{uw} \end{bmatrix} \quad (2.42)$$

on hem definit els residus r_c, r_b, r_{xz}, r_{uw} :

$$\begin{aligned} r_c &= -(-Qx + z - w + A^T y - c) = c - (A^T y + z - w - Qx) \\ r_b &= -(Ax - b) = b - Ax \\ r_{xz} &= -(XZe - \mu e) = \mu e - XZe \\ r_{uw} &= -((U - X)We - \mu e) = \mu e - (U - X)We \end{aligned}$$

2.9.1 Sistema augmentat i equacions normals

L'estructura de la matriu del sistema (2.42) permet reformular el problema de forma més compacta, estalviant a més a més costos computacionals. Si eliminem Δw i Δz de les dues

últimes equacions de (2.42) obtenim

$$\Delta z = X^{-1}(r_{xz} - Z\Delta x) \quad (2.43a)$$

$$\Delta w = (U - X)^{-1}(r_{uw} + W\Delta x) \quad (2.43b)$$

$$\begin{bmatrix} -Q & A^T \\ A & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta x \\ \Delta y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r_c - \Delta z + \Delta w \\ r_b \end{bmatrix} \quad (2.43c)$$

Usant (2.43b), (2.43a) en (2.43c) obtenim

$$-Q\Delta x + A^T\Delta y = r_c - X^{-1}(r_{xz} - Z\Delta x) + (U - X)^{-1}(r_{uw} + W\Delta x) \Leftrightarrow$$

$$(-Q - X^{-1}Z - (U - X)^{-1}W)\Delta x + A^T\Delta y = r_c - X^{-1}r_{xz} + (U - X)^{-1}r_{uw}$$

Ara podem escriure les equacions en $(\Delta x, \Delta y)$ en la forma coneguda com sistema augmentat:

$$\begin{bmatrix} -\Theta^{-1} & A^T \\ A & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta x \\ \Delta y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r \\ r_b \end{bmatrix} \quad (2.44)$$

on hem definit $r = r_c - X^{-1}r_{xz} + (U - X)^{-1}r_{uw}$ i

$$\Theta = (Q + X^{-1}Z + (U - X)^{-1}W)^{-1} \quad (2.45)$$

La matriu del sistema augmentat és simètrica però no es definida positiva. Podem realitzar una eliminació addicional de Δx en (2.44) per a obtenir les anomenades equacions normals:

$$-\Theta^{-1}\Delta x + A^T\Delta y = r$$

↓

$$\Delta x = \Theta(A^T\Delta y - r) \Leftrightarrow \quad (2.46)$$

$$(A\Theta A^T)\Delta y = r_b + A\Theta r = g \quad (2.47)$$

En definitiva, les direccions de Newton $(\Delta x, \Delta y, \Delta z, \Delta w)$ de 2.42 es calculen resolent primer (2.47) i després (2.46), (2.43a), (2.43b).

L'obtenció de Δx usant l'equació (2.46) un cop tenim Δy no presenta dificultats tècniques, doncs Θ és una matriu diagonal. El mateix podem dir per a l'obtenció de $\Delta z, \Delta w$ usant (2.43a),(2.43b) un cop tenim Δx . Així doncs la tasca més laboriosa computacionalment serà resoldre el sistema lineal (2.47), amb la matriu $A\Theta A^T$ simètrica i definida positiva,

que usualment es duu a terme usant factoritzacions de Cholesky. La majoria d'implementacions dels mètodes primals-duals de punt interior procedeixen d'aquesta forma. No obstant, la resolució del sistema augmentat (2.44) pot presentar avantatges en certes situacions [60, pàgines 220 i següents].

Capítol 3

Regularització quadràtica de la funció de barrera

3.1 Regularització numèrica

Parlant en termes molt generals, regularitzar un problema és transformar-lo en un altre amb millors propietats numèriques. És una tècnica habitualment usada per a tractar problemes “mal formulats” (*ill-posed problems*). Es considera que un problema està ben formulat segons Hadamard [31] quan verifica tres condicions:

1. Existeix una solució
2. La solució és única
3. La solució depèn contínuament de les dades del problema

És desitjable que un problema estigui ben plantejat, doncs llavors podem usar algorismes estables per a resoldre'l. Altrament podem intentar re-formular el problema afegint elements addicionals per a obtenir-ne un altre ben plantejat. En aquest sentit un àrea força activa de recerca és la dels problemes inversos (*inverse problems*) [3], que són aquells en els quals volem obtenir els valors d'alguns paràmetres del model a partir de les dades observades. En particular, un problema lineal invers té la forma

$$b = A(x)$$

on A és un operador lineal que descriu la relació entre les dades i els paràmetres del model. Aquest tipus de problemes és freqüent que produeixen formulacions mal plantejades segons Hadamard, especialment en la tercera condició de dependència contínua de la sol-solució respecte les dades, resultant models inestables sota pertorbacions .

La tècnica més usada per regularitzar problemes mal plantejats és la regularització de Tikhonov [53, pàgines 28 i següents], directament relacionada amb l'algorisme de Levenberg-Marquardt [44, capítol 10] per al problema de mínims quadrats. Per a resoldre el sistema sobre determinat d'equacions $Ax = b$ la tècnica habitual és minimitzar el residu $\|Ax - b\|^2$. Del conjunt de solucions possibles podem privilegiar una determinada amb certes propietats desitjables afegint un terme de regularització en la minimització:

$$\|Ax - b\|^2 + \|\alpha Tx\|^2$$

per a alguna matriu T de Tikhonov i amb $\alpha \in \mathbb{R}$ un factor d'escalat. Per exemple, triant $T = I$, $\alpha = 1$ privilegiem les solucions de norma mínima.

3.1.1 Regularització en optimització

La regularització numèrica en optimització també s'aplica en aquells casos on, malgrat el problema original estigui ben plantejat, volem igualment aconseguir una millora en les seves propietats numèriques o bé obtenir una solució amb certes propietats desitjables. Podem per tant definir la regularització numèrica en optimització com un conjunt de tècniques que introdueixen termes de pertorbació o bé en la funció objectiu, o bé en les restriccions o bé en totes dues, a fi i efecte de millorar l'estabilitat numèrica dels algorismes.

Si considerem ara un problema general d'optimització convexa

$$\begin{aligned} \min_x \quad & f(x) \\ \text{subjecte a} \quad & x \in C \end{aligned}$$

una tècnica habitual de regularitzar el problema és afegir una funció convexa a l'objectiu

$$\begin{aligned} \min_x \quad & f(x) + \alpha g(x) \\ \text{subjecte a} \quad & x \in C \end{aligned}$$

on $g(x)$ és una funció convexa i $\alpha \in \mathbb{R}^+$ un factor d'escalat. La regularització de Tikhonov és un cas particular on $g(x) = \|x\|^2$. En general, la solució del problema regularitzat no té perquè ser solució del problema original. En el cas de que sí que ho sigui, direm que la regularització és exacta [26]. Per el cas particular de programació lineal amb una funció de regularització $g(x)$ convexa,

$$\begin{aligned} \min_x \quad & c^T x + \alpha g(x) \\ \text{subjecte a} \quad & Ax = b \\ & x \geq 0 \end{aligned}$$

es demostra en [39] que, si el problema original està ben definit de forma que té solució i és única, llavors per valors suficientment petits d' α , la regularització és exacta.

Un cas particular important d'optimització convexa és el problema de mínims quadrats amb l'objectiu afegit de que $\|x\|$ tingui el mínim valor possible:

$$\min_x \begin{bmatrix} \|f(x)\| \\ \|x\| \end{bmatrix} \quad (3.1)$$

on $f(x)$ és convexa. En aquest tipus de problemes tenim dos objectius simultanis. Un mètode habitual de resoldre'l és usar la regularització, convertint el problema original (3.1) en un altre que inclou paràmetres d'escalat:

$$\min_x \|f(x)\|^2 + \alpha \|x\|^2 \quad (3.2)$$

on $\alpha \in \mathbb{R}^+$. El terme de regularització es pot interpretar com el nostre coneixement previ sobre el valor de l'òptim x : si sabem que no pot ser massa gran, llavors donarem un valor gran a α per tal de penalitzar els x de valor elevat.

D'ara en endavant ens restringirem a la regularització aplicada als algorismes de punt interior per a programació lineal.

3.1.2 Regularització en mètodes de punt interior

En aquest apartat introduïrem les tècniques de regularització aplicades a l'àmbit dels mètodes d'optimització de punt interior. Suposem que tenim el problema d'optimització convex

$$\min_x f(x), \quad x \in C, \quad f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$$

A continuació fem un breu resum d'algunes d'aquestes tècniques.

- Ja en el treball original de Fiacco i McCormick [23] es fa referència a la regularització dintre del context dels mètodes de punt interior per a optimització. Proposaven afegir un factor r a les restriccions que s'anul·la a mesura que avancem vers l'òptim per tal de relaxar les condicions necessàries de convergència del mètode.
- Moreau [42] va introduir el concepte d'embolcall proximal d'una funció (*Moreau envelope*), mes conegut per el nom de regularització de Moreau-Yosida. Donat el problema

de minimització convex $\min \{f(x) : x \in \mathbb{R}^n\}$ on $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ és una funció convexa, es defineix la funció regularitzada $F(x)$ de Moreau-Yosida d' f com la funció $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ següent:

$$F(x) = \min_z \left\{ f(z) + \frac{1}{2\lambda} \|z - x\|^2 \right\}$$

on λ és un paràmetre positiu i $z \in \mathbb{R}^n$. Com més petit prenem el paràmetre λ més s'aproximarà $F(x)$ a $f(x)$. Quan apliquem aquesta regularització a una funció convexa no diferenciable f , la funció regularitzada F és "suavitzada" i té millors propietats diferencials. A més a més en el cas d'una funció f convexa, la funció i la seva regularització de Moreau-Yosida tenen el mateix conjunt de punts mínims. Llavors podem substituir el problema original $\min_x f(x)$ per al problema regularitzat $\min_x F(x)$. Donat que la funció regularitzada és diferenciable amb continuïtat, es poden utilitzar mètodes diferencials per a trobar el mínim de la funció original. Veure per exemple [47], [38].

- Directament relacionat amb la regularització de Moreau-Yosida, l'algorisme de punt proximal [37], desenvolupat inicialment en el context de la minimització d'una funció convexa en un espai de Hilbert, en la seva forma original el que fa es afegir una funció quadràtica convexa a la funció objectiu com a terme de regularització:

$$x^{k+1} = \arg \min_x \left\{ f(x) + \frac{1}{2\lambda} \|x - x^k\|^2 \right\} \quad (3.3)$$

L'algorisme de punt proximal pot ser descrit com un mètode d'optimització aplicat a la funció regularitzada de Moreau-Yosida. En aquesta formulació original, la complexitat dels algorismes de punt interior que usen la passa regularitzada (3.3) resulta ser la mateixa que quan usen la passa estàndard no regularitzada $x^{k+1} = \arg \min_x \{f(x)\}$.

- Setiono [50] utilitza el terme de regularització proximal en un algorisme de programació lineal de punt interior per tal de millorar el condicionament del sistema que cal resoldre en aplicar el mètode de Newton. La seva formulació usa la minimització de la barrera logarítmica regularitzada $F(x)$ següent:

$$x^{k+1} = \arg \min_x (c^T x + F^k(x)) \quad (3.4)$$

$$F^k(x) = \frac{\alpha^k}{2} \|x - x^k\|^2 - \mu^k \sum_{i=1}^n \log x_i \quad (3.5)$$

on la norma $\|\cdot\|$ és l'euclídea i x^k és el punt obtingut en la iteració k -èsima. El paràmetre

α_k és configura en cada iteració. Rockafellar [55] va mostrar que el requeriment de minimitzar de forma exacta en cada iteració la funció objectiu regularitzada proximal podia relaxar-se sense perdre la convergència. Seguint a Rockafellar, Setiono no resol exactament (3.4), sinó que el que realment resol en cada iteració és el problema

$$\begin{aligned} \min_x \quad & (c + \nabla F^k(x^k))^T (x - x^k) + \frac{1}{2} (x - x^k)^T \nabla^2 F^k(x^k) (x - x^k) \\ \text{subjecte a} \quad & Ax = b \\ \text{on} \quad & \nabla F^k(x) = \alpha^k (x - x^k) - \mu^k X^{-1}e \\ & \nabla^2 F^k(x) = \alpha^k I + \mu^k X^{-2} \\ & \nabla F^k(x^k) = -\mu^k X_k^{-1}e \\ & \nabla^2 F^k(x^k) = \alpha^k I + \mu^k X_k^{-2} \end{aligned} \quad (3.6)$$

Si definim $\tilde{c}^k = c - \mu^k X_k^{-1}e$ i $Q_k = \alpha^k I + \mu^k X_k^{-2} \succ 0$, que és una matriu diagonal definida positiva que conté el paràmetre de barrera μ , podem expressar (3.6) com un problema quadràtic separable

$$\min_x (\tilde{c}^k)^T (x - x^k) + \frac{1}{2} (x - x^k)^T Q_k (x - x^k) \quad (3.7)$$

- Alguns algorismes de punt interior per a PL usen el sistema augmentat (2.44) per a resoldre les equacions Karush-Kuhn-Tucker. En aplicar a aquest sistema el mètode de Newton resulta un sistema lineal amb una matriu indefinida; amb un terme de regularització la matriu esdevé quasi-definida i factorizable [56].
- Saunders i Tomlin [49] han usat una regularització numèrica dintre d'un algorisme infactible primal-dual predictor-corrector per a programació lineal. El que fan és substituir el problema original per un de quadràtic de la forma

$$\begin{aligned} \min_{x,p} \quad & c^T x + \frac{1}{2} \|\gamma x\|^2 + \frac{1}{2} \|p\|^2 \\ \text{subjecte a} \quad & Ax + \delta p = b, x \geq 0 \end{aligned}$$

Els paràmetres δ i γ són valors reals positius ajustables. La matriu del sistema augmentat regularitzat esdevé:

$$K = \begin{bmatrix} -H & A' \\ A & \delta^2 I \end{bmatrix}, H = D + \gamma^2 I$$

Si els paràmetres δ i γ tenen valors apropiats, llavors existirà una factorització triangular $PKP' = LDL'$

- Gondzio i Altman [2] també usen una regularització quadràtica semblant, amb la diferència de que els paràmetres ajustables modifiquen els seus valors dinàmicament:

$$K = \begin{bmatrix} -D & A' \\ A & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -R_p & 0 \\ 0 & R_d \end{bmatrix}$$

R_p i R_d són matrius diagonals que es poden veure com termes de regularització proximals per a les funcions objectiu primal i dual, respectivament.

- En totes les regularitzacions exposades anteriorment s'afegeix el terme addicional de regularització a la funció objectiu o a les restriccions. Hi han també treballs fets en els quals es regularitza un mètode de barrera afegint directament un terme proximal a la funció de barrera. Així per exemple es defineix l'algorisme “*proximal ACCPM*” com una variant del mètode ACCPM (“*analytic center cutting plane method*”) [27], en el qual s'afegeix un terme proximal de la forma $\frac{1}{2}(x - x_k)^T Q(x - x_k)$ a la funció de barrera que defineix el centre analític.
 - En [22] s'aplica la variant proximal al problema “*P-median problem*”, útil per a molts models de situacions del món real, com ara la ubicació de béns públics o instal·lacions industrials, magatzems [32] i altres [34]. Emmarcat com un model de localització de béns públics, el model p-median minimitza la distància ponderada de tots els usuaris al seu servei més pròxim subjecte a les següents restriccions: tots els usuaris reben el servei, el nombre total de serveis o la seva capacitat no s'excedeix.
 - En [4] s'aplica el mètode ACCPM proximal al problema de fluxos multiarticle en una xarxa de transport.
 - En els dos casos anteriors el terme proximal no es va afegir per a millorar les prestacions numèriques dels algorismes, sinó per a simplificar la demostració de la convergència, l'estimació de la complexitat de l'algorisme, i per a ajustar alguns paràmetres interns. No obstant, l'algorisme Proximal-ACCPM té, en general, un rendiment numèric superior a ACCPM [5].

En els següents apartats formulem la regularització que hem treballat en aquesta memòria. De forma semblant a l'algorisme ACCPM proximal, afegeix el terme addicional no a la funció objectiu o les restriccions, sinó a la funció de barrera logarítmica, de forma que el terme de regularització queda multiplicat per al paràmetre de barrera, el qual decreix progressivament en avançar l'algorisme vers l'optimalitat, assegurant així que també el terme afegit de regularització tendeix a anular-se.

3.2 Regularització quadràtica de la barrera: formulació

Treballarem a partir d'ara amb l'optimització d'un problema lineal amb fites superiors $u \in \mathbb{R}^n$ en les variables primals x :

$$\begin{aligned} \min_x \quad & c^T x \\ \text{subjecte a} \quad & Ax = b \\ & 0 \leq x \leq u \end{aligned} \quad (3.8)$$

Introduïm aquí les fites superiors u degut a que milloren les propietats teòriques de la regularització que proposem, afirmació que es veurà justificada posteriorment. Això no és cap restricció important, doncs malgrat un problema en forma estàndard no inclou aquestes fites, en un problema que no sigui il·limitat sempre existiran les fites superiors, malgrat siguin desconegudes a priori.

La funció de barrera logarítmica que inclou les fites superiors és

$$F(x, \mu) = -\mu \left(\sum_i \ln x_i + \sum_i \ln(u_i - x_i) \right) \quad (3.9)$$

La barrera (3.9) és diferenciable i estrictament convexa en l'interior de $0 \leq x \leq u$: $\nabla F = -\mu (X^{-1}e - (U - X)^{-1}e)$, $\nabla^2 F = \mu (X^{-2} + (U - X)^{-2}) \succ 0$. Regularitzem aquesta barrera afegint el terme quadràtic convex $\frac{1}{2}x^T Qx$, on Q és una matriu diagonal positiva, de forma que quedi afectat pel paràmetre de barrera μ :

$$F_Q(x; \mu) = -\mu \left(-\frac{1}{2}x^T Qx + \sum_i \ln x_i + \sum_i \ln(u_i - x_i) \right) \quad (3.10)$$

$$= F(x, \mu) + \mu \left(\frac{1}{2}x^T Qx \right) \quad (3.11)$$

El problema de barrera regularitzada que s'ha de resoldre és, doncs,

$$\begin{aligned} \min_x B(x, \mu) &= c^T x - \mu \left(-\frac{1}{2}x^T Qx + \sum_i \ln x_i + \sum_i \ln(u_i - x_i) \right) \\ \text{subjecte a } Ax &= b \end{aligned} \quad (3.12)$$

Amb el terme de regularització la nova funció $F_Q(x; \mu)$ té les següents propietats:

1. $F_Q(x; \mu)$ pren valors finits en l'interior de la seva regió de definició $\{u \geq x \geq 0\}$ i infinits en la seva frontera

2. $F_Q(x; \mu)$ és diferenciable amb continuïtat en l'interior de la regió factible i estrictament convexa: $\nabla F_Q = \nabla F + \mu Qx$, $\nabla^2 F_Q = \nabla^2 F + \mu Q \succ 0$.
3. Els seus valors s'atansen a ∞ conforme ens atansem a la frontera de la regió factible.
4. La reducció del terme de regularització conforme ens atansem a l'òptim ve regulada pel paràmetre de barrera μ .
5. Tal com es demostrarà en l'apartat 3.5.2, la barrera regularitzada verifica les condicions necessàries per a ser una barrera auto-concordant (*self-concordant barrier*).

Les propietats 1–3 són de comprovació immediata i asseguren que $F_Q(x; \mu)$ és una funció de barrera. La propietat 4 és evident. En quant a la propietat 5, ens permetrà més endavant establir resultats sobre la convergència de l'algorisme regularitzat de punt interior usant les propietats de les funcions i barreres auto-concordants [43, capítol 4.2].

La funció de Lagrange del problema (3.12) és

$$\mathcal{L}(x, y) = c^T x - \mu \left(-\frac{1}{2} x^T Q x + \sum \ln x_i + \sum_i \ln(u_i - x_i) \right) - y(Ax - b)$$

i les condicions de primer ordre d'òptim són

$$\begin{aligned} \nabla_x \mathcal{L}(x, y) &= c - \mu(-Qx + X^{-1}e - (U - X)^{-1}e) - A^T y = 0 \\ \nabla_y \mathcal{L}(x, y) &= Ax - b = 0 \end{aligned}$$

Definim $w = \mu(U - X)^{-1}e$ i $z = \mu X^{-1}e$ de forma que obtenim

$$\begin{aligned} c + \mu Qx - z + w - A^T y &= 0 \\ Ax - b &= 0 \end{aligned}$$

Si comparem amb les condicions equivalents corresponents al problema quadràtic

$$\begin{aligned} \min_x \quad & c^T x + \frac{1}{2} x^T Q x \\ \text{subjecte a} \quad & Ax = b \\ & 0 \leq x \leq u \end{aligned} \tag{3.13}$$

que són

$$\begin{aligned} c + Qx - z + w - A^T y &= 0 \\ Ax - b &= 0 \end{aligned}$$

veiem que l'única diferència està en el paràmetre de barrera μ que acompanya al terme Qx en la infactibilitat dual en el cas regularitzat.

El conjunt d'equacions d'optimalitat KKT del problema regularitzat queda, doncs:

$$c + \mu Qx - z + w - A^T y = 0 \quad (3.14a)$$

$$Ax - b = 0 \quad (3.14b)$$

$$(U - X)We = \mu e \quad (3.14c)$$

$$XZe = \mu e \quad (3.14d)$$

$$(z, w) > 0 \quad (3.14e)$$

$$u > x > 0 \quad (3.14f)$$

A efectes pràctics veiem que per a implementar un algorisme amb regularització quadràtica de la funció de barrera per a PL podem usar un algorisme per a programació quadràtica tenint en compte la modificació en la condició (3.14a) de la factibilitat dual. La linealització de (3.14a)–(3.14d) aplicant el mètode de Newton ens proporciona les següents equacions:

$$\begin{bmatrix} \mu Q & -A^T & -I & I \\ A & & & \\ -W & & & -X \\ Z & & X & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta x \\ \Delta y \\ \Delta z \\ \Delta w \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} c + \mu Qx^k - z^k + w^k - A^T y^k \\ Ax^k - b \\ (U - X_k)W_k e - \mu e \\ X_k Z_k e - \mu e \end{bmatrix} \quad (3.15a)$$

$$= - \begin{bmatrix} r_c \\ r_b \\ r_w \\ r_{xz} \end{bmatrix} \quad (3.15b)$$

$$(z, w) > 0 \quad (3.15c)$$

$$u > x > 0 \quad (3.15d)$$

3.2.1 Regularització de punt proximal

Malgrat que la regularització quadràtica presentada en la secció anterior és sobre la que treballem de forma completa en aquesta memòria (això és: teoremes de convergència i com-

plexitat, algorismes i resultats computacionals) hem decidit implementar també una segona regularització del tipus de punt proximal [37][55] a fi i efecte de comparar els resultats computacionals obtinguts amb totes dues regularitzacions. En aquesta secció formulem la regularització de punt proximal, i en el següent capítol es veurà la implementació pràctica.

Donat el problema primal amb fites superiors (3.8), amb funció de barrera (3.9), considerem la barrera amb regularització proximal:

$$F_P(x; \mu) = -\mu \left(\sum_i \ln x_i + \sum_i \ln(u_i - x_i) \right) + \frac{1}{2}(x - x^k)^T Q_P (x - x^k) \quad (3.16)$$

En l'apartat 3.1.2 hem vist que la regularització de punt proximal usada en [50] prenia $Q_P = \alpha^k I + \mu^k X_k^{-2}$; en el nostre cas prenem $Q_P = \mu^k Q$ on Q és una matriu diagonal positiva. Podem per tant expressar $F_P(x; \mu^k)$ com

$$F_P(x; \mu) = -\mu \left(\sum_i \ln x_i + \sum_i \ln(u_i - x_i) - \frac{1}{2}(x - x^k)^T Q (x - x^k) \right) \quad (3.17)$$

El problema que resolem queda, doncs,

$$\begin{aligned} \min_x B_P(x, \mu) &= c^T x - \mu \left(\sum_i \ln x_i + \sum_i \ln(u_i - x_i) - \frac{1}{2}(x - x^k)^T Q (x - x^k) \right) \\ \text{subjecte a } Ax &= b \end{aligned} \quad (3.18)$$

La funció de Lagrange corresponent és

$$\mathcal{L}(x, y) = c^T x - \mu \left(-\frac{1}{2}(x - x^k)^T Q (x - x^k) + \sum \ln x_i + \sum_i \ln(u_i - x_i) \right) - y(Ax - b)$$

Les condicions de primer ordre d'òptim són

$$\begin{aligned} \nabla_x \mathcal{L}(x, y) &= c - \mu (-Q(x - x^k) + X^{-1}e - (U - X)^{-1}e) - A^T y = 0 \\ \nabla_y \mathcal{L}(x, y) &= Ax - b = 0 \end{aligned}$$

Les equacions KKT del problema regularitzat proximal seran:

$$F(x, y, z, w) = \begin{bmatrix} c + \mu Q(x - x^k) - z + w - A^T y \\ Ax - b \\ (U - X)W e - \mu e \\ XZ e - \mu e \end{bmatrix} = 0 \quad (3.19)$$

$$(x, w) > 0 \quad (3.20)$$

$$u > x > 0 \quad (3.21)$$

La matriu Jacobiana de (3.19) és

$$\nabla F(x, y, z, w) = \begin{bmatrix} \mu Q & -A^T & -I & I \\ A & & & \\ -W & & & -X \\ Z & & X & \end{bmatrix}$$

Les equacions de Newton per a la passa $(\Delta x, \Delta y, \Delta z, \Delta w)$ des del punt $(x^{(k)}, y^{(k)}, z^{(k)}, w^{(k)})$ fins el punt $(x, y, z) = (x^{(k)}, y^{(k)}, z^{(k)}, w^{(k)}) + (\Delta x, \Delta y, \Delta z, \Delta w)$ són:

$$\nabla F(x^{(k)}, y^{(k)}, z^{(k)}, w^{(k)})(\Delta x, \Delta y, \Delta z, \Delta w) = -F(x^{(k)}, y^{(k)}, z^{(k)}, w^{(k)}),$$

és a dir:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \mu Q & -A^T & -I & I \\ A & & & \\ -W & & & -X \\ Z & & X & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta x \\ \Delta y \\ \Delta z \\ \Delta w \end{bmatrix} &= - \begin{bmatrix} c + \mu Q(x^{(k)} - x^{(k)}) - z^{(k)} + w^{(k)} - A^T y^{(k)} \\ Ax^{(k)} - b \\ (U - X^{(k)})W^{(k)} e - \mu e \\ X^{(k)}Z^{(k)} e - \mu e \end{bmatrix} \\ &= - \begin{bmatrix} c - z^{(k)} + w^{(k)} - A^T y^{(k)} \\ Ax^{(k)} - b \\ (U - X^{(k)})W^{(k)} e - \mu e \\ X^{(k)}Z^{(k)} e - \mu e \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} r_c \\ r_b \\ r_w \\ r_{xz} \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (3.22)$$

Observem que degut a la cancel·lació del terme $\mu Q_k(x^{(k)} - x^{(k)})$ el residu $(r_c, r_b, r_w, r_{xz})^T$ és igual que al cas lineal, però la Jacobiana és com la del cas de regularització quadràtica de la secció anterior. Aquesta regularització de punt proximal queda com una barreja del cas lineal (pel terme de residu) i del cas regularització quadràtica (per a la matriu de la Jacobiana). La taula 3.1 resumeix les diferències entre les Jacobianes i els residus de les formulacions lineal, quadràtica, lineal amb regularització quadràtica i lineal amb regularització proximal, totes elles amb fites superiors a les variables primals.

Taula 3.1: Jacobiana i residu de cada formulació

| Formulació | Jacobiana | Residu |
|-----------------------------------|---|--|
| Lineal | $\begin{bmatrix} 0 & A^T & 1_n & -1_n \\ A & & & \\ Z & & X & \\ -W & & & U - X \end{bmatrix}$ | $\begin{bmatrix} c - z^{(k)} + w^{(k)} - A^T y^{(k)} \\ Ax^{(k)} - b \\ (U - X^{(k)})W^{(k)}e - \mu e \\ X^{(k)}Z^{(k)}e - \mu e \end{bmatrix}$ |
| Quadràtic | $\begin{bmatrix} -Q & A^T & 1_n & -1_n \\ A & & & \\ Z & & X & \\ -W & & & U - X \end{bmatrix}$ | $\begin{bmatrix} c + Qx^{(k)} - z^{(k)} + w^{(k)} - A^T y^{(k)} \\ Ax^{(k)} - b \\ (U - X^{(k)})W^{(k)}e - \mu e \\ X^{(k)}Z^{(k)}e - \mu e \end{bmatrix}$ |
| Lineal, regularització quadràtica | $\begin{bmatrix} \mu Q & -A^T & -I & I \\ A & & & \\ -W & & & -X \\ Z & & X & \end{bmatrix}$ | $\begin{bmatrix} c + \mu Qx^{(k)} - z^{(k)} + w^{(k)} - A^T y^{(k)} \\ Ax^{(k)} - b \\ (U - X^{(k)})W^{(k)}e - \mu e \\ X^{(k)}Z^{(k)}e - \mu e \end{bmatrix}$ |
| Lineal, regularització proximal | $\begin{bmatrix} \mu Q & -A^T & -I & I \\ A & & & \\ -W & & & -X \\ Z & & X & \end{bmatrix}$ | $\begin{bmatrix} c - z^{(k)} + w^{(k)} - A^T y^{(k)} \\ Ax^{(k)} - b \\ (U - X^{(k)})W^{(k)}e - \mu e \\ X^{(k)}Z^{(k)}e - \mu e \end{bmatrix}$ |

3.3 Convergència a l'òptim del mètode de punt interior clàssic de Fiacco-McCormick

Mostrarem ara que la barrera regularitzada (3.10) verifica l'esquema clàssic de punt interior de Fiacco-McCormick, de forma que l'algorisme de punt interior aplicat a la funció (3.10) serà convergent. En la secció següent veurem també un teorema sobre l'existència del camí central regularitzat. Seguirem les notacions originals emprades en [23], capítol 3.

En el que segueix es treballa amb l'optimització del problema

$$\min_x f(x) \text{ subjecte a } g_i(x) \geq 0, \quad i = 1, \dots, m \quad (3.23)$$

Enunciem a continuació les condicions i els teoremes en forma abreujada, mostrant només els resultats que ens interessa usar en el nostre context, per a posteriorment mostrar que la barrera (3.10) verifica les condicions imposades.

Sigui I una funció escalar d' x amb dues propietats:

1. $I(x)$ és contínua en la regió $R^0 = \{x | g_i(x) > 0, \quad i = 1, \dots, m\}$

2. Si $\{x^{(k)}\}$ és qualsevol seqüència infinita de punts en R^0 convergent a x_B de forma que $g_i(x_B)=0$ per al menys una i , llavors $\lim_{k \rightarrow \infty} I(x^{(k)}) = +\infty$

Sigui també una funció escalar $s(r)$ d'una variable r amb les següents propietats:

1. Si $r_1 > r_2 > 0$, llavors $s(r_1) > s(r_2) > 0$
2. Si $\{r_k\}$ és una seqüència infinita de punts tals que $\lim_{k \rightarrow \infty} r_k = 0$, llavors $\lim_{k \rightarrow \infty} s(r_k) = 0$

Amb aquestes definicions podem enunciar el teorema 8 de [23]:

Teorema 3.3.1 (Convergència a conjunts compactes de mínims locals per a algorismes de punt interior) *Si*

1. les funcions f, g_1, \dots, g_m són contínues,
2. la funció $U = f(x) + s(r)I(x)$ és una funció de minimització de punt interior sense restriccions, això és, I i s satisfan les propietats 1 i 2 enunciades anteriorment,
3. el conjunt de valors $\{x \in A^*\}$ tals que $v = f(x)$ és un mínim local d' f és un conjunt aïllat, compacte i no buit,
4. al menys un punt d' A^* està en la clausura d' R^0 ,
5. $\{r_k\}$ és una seqüència estrictament decreixent tal que $\lim_{k \rightarrow \infty} r_k = 0$,

llavors la seqüència de mínims de $U = f(x) + s(r)I(x)$ convergeix al conjunt compacte de mínims A^* del problema (3.23)

Enunciem també el teorema 12 de [23]:

Teorema 3.3.2 *Si*

1. les funcions f, g_1, \dots, g_m tenen derivades de 1r i 2n ordre
2. $I(g) = \sum_{i=1}^m I_i(g_i)$ és una funció 2 cops diferenciable de les $g_i > 0$ amb les següents propietats:
 - (a) si $\{g_i^k = g_i(x^{(k)}) > 0\}$ és una seqüència infinita de punts llavors $\lim_{k \rightarrow \infty} I_i(g_i^k) = +\infty$
 - (b) si $g_i^0 > 0$ llavors $\partial I_i(g_i^0)/\partial g_i < 0$, $\partial I_i^2(g_i^0)/\partial g_i^2 > 0$, i $\partial I_i^2/\partial g_i^2$ és una funció monòtona decreixent de g_i

llavors existeix una trajectòria aïllada i derivable de mínims $x(r)$ de la funció $U = f(x) + s(r)I(x)$ que convergeixen a x^* , solució de (3.23)

Per a veure que (3.10) verifica les condicions exposades, l'escrivim com

$$F(x) = \sum_{i=1}^n G_i(x) + H_i(x), \quad G_i(x) = \frac{1}{2}q_i x_i^2 - \ln x_i, \quad H_i(x) = -\ln(u_i - x_i) \quad (3.24)$$

on q_i són els termes de la diagonal de Q . Si definim les restriccions $g_i(x) = x_i \geq 0$, $h_i(x) = u_i - x_i \geq 0$ llavors les seves barreres són $G_i(x)$ i $H_i(x)$, respectivament. Identifiquem $r = \mu$, $s(r) = s(\mu) = \mu$, $I(x) = F(x)$, $f(x) = c^T x$. Tenim que

1. $G_i(x)$ és contínua en $\{x : g_i(x) > 0\}$, i $H_i(x)$ és contínua en $\{x : h_i(x) > 0\}$
2. $G_i(x) \rightarrow \infty$ quan $g_i(x) \rightarrow 0$ i $H_i(x) \rightarrow \infty$ quan $h_i(x) \rightarrow 0$

Com el problema de minimització (3.12) és convex, es verifiquen les condicions de convergència del conjunt de mínims de (3.12) al mínim de (3.8) segons el teorema 3.3.1.

D'altra banda les barreres $G_i(g_i(x)) = G_i(x_i)$ i $H_i(h_i(x)) = H_i(u_i - x_i)$ verifiquen:

1. són funcions dues vegades derivables de $g_i(x)$, $h_i(x)$, respectivament
2. $\partial G_i(g_i)/\partial g_i = q_i x_i - 1/x_i < 0 \Leftrightarrow q_i < 1/x^2$. Com $x < u$ aquesta condició es verificarà sempre que $q_i < 1/u_i^2$, és a dir, per a valors petits de Q .
3. $\partial H_i(h_i)/\partial h_i = -1/h_i < 0$
4. $\partial^2 G_i(g_i)/\partial g_i^2 = q_i + 1/x_i^2 > 0$, $\partial^2 H_i(h_i)/\partial h_i^2 = 1/h_i^2 > 0$
5. $\partial^2 G_i(g_i)/\partial g_i^2$ i $\partial H_i(h_i)/\partial h_i$ són funcions monòtones decreixents de g_i i h_i respectivament

En aquestes condicions el teorema 12 de [23] ens assegura l'existència de la trajectòria formada per als mínims $x(\mu)$ del problema

$$\min_x c^T x + \mu F(x)$$

i a més a més tenim que $\lim_{\mu \rightarrow 0} x(\mu) = x^*$, solució del problema (3.8).

3.4 Existència del camí central primal-dual del problema regularitzat

Els algorismes de seguiment del camí (*path-following*) segueixen una trajectòria de punts propers al camí central C . Sense pèrdua de generalitat, en aquest apartat treballarem amb un problema lineal amb regularització quadràtica sense fites superiors, per al qual les equacions de C seran simplement les (3.14) eliminant les variables f, w :

$$\begin{aligned} c + \mu Qx - z - A^T y &= 0 \\ Ax - b &= 0 \\ XZe &= \mu e \\ (x, z) &> 0 \end{aligned} \tag{3.25}$$

Anem a mostrar ara que aquesta trajectòria de punts C està ben definida, això és: per a cada $\mu > 0$ existeix una solució de (3.25) que és única. L'argumentació segueix la demostració d'existència del camí central primal-dual per problemes lineals de [60, pàgines 36-40].

Donat el problema lineal estàndard (2.1) definim els conjunts de punts factibles primals-duals \mathcal{F} i el conjunt de punts estrictament factibles primals-duals \mathcal{F}^0 :

$$\mathcal{F} = \{(x, y, z) \mid Ax = b, A^T y + z - \mu Qx = c, (x, z) \geq 0\} \tag{3.26}$$

$$\mathcal{F}^0 = \{(x, y, z) \mid Ax = b, A^T y + z - \mu Qx = c, (x, z) > 0\} \tag{3.27}$$

Necessitem un Lema previ:

Lema 3.4.1 *Suposem que $\mathcal{F}^0 \neq \emptyset$. Llavors per cada $K \geq 0$ el conjunt*

$$\{(x, z) \mid (x, y, z) \in \mathcal{F} \text{ per algún } y, \text{ i a més a més } x^T z \leq K\}$$

està afitat.

Demostració: Sigui $(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z})$ un vector qualsevol d' \mathcal{F}^0 i (x, y, z) qualsevol vector d' \mathcal{F} tal que $x^T z \leq K$. Com $A\bar{x} = b$ i $Ax = b$ tindrem que $A(\bar{x} - x) = 0$. De forma semblant també tindrem que $A^T(\bar{y} - y) + (\bar{z} - z) - \mu Q(\bar{x} - x) = 0$. Aquestes dues equacions impliquen que

$$\begin{aligned}
(\bar{x} - x)^T (\bar{z} - z) &= (\bar{x} - x)^T (-A^T (\bar{y} - y) + \mu Q (\bar{x} - x)) \\
&= -(\bar{x} - x)^T A^T (\bar{y} - y) + \mu (\bar{x} - x)^T Q (\bar{x} - x) \\
&= 0 \cdot (\bar{y} - y) + \mu (\bar{x} - x)^T Q (\bar{x} - x) \\
&= \mu (\bar{x} - x)^T Q (\bar{x} - x),
\end{aligned}$$

i reorganitzen els termes,

$$\bar{x}^T z + \bar{z}^T x = \bar{x}^T \bar{z} + x^T z - \mu (\bar{x} - x)^T Q (\bar{x} - x).$$

Com $x^T z \leq K$ i $\mu (\bar{x} - x)^T Q (\bar{x} - x) \geq 0$ doncs suposem que Q és definida positiva, obtenim

$$\begin{aligned}
\bar{x}^T z + \bar{z}^T x &\leq K + \bar{x}^T \bar{z} - \mu (\bar{x} - x)^T Q (\bar{x} - x) \Rightarrow \\
\bar{x}^T z + \bar{z}^T x &\leq K + \bar{x}^T \bar{z}
\end{aligned} \tag{3.28}$$

La quantitat $\xi = \min_{i=1, \dots, n} \min(\bar{x}_i, \bar{z}_i)$ és un nombre positiu, doncs $(\bar{x}, \bar{z}) > 0$; utilitzant-lo en (3.28) obtenim

$$\xi e^T (x + z) \leq K + \bar{x}^T \bar{z},$$

que implica

$$0 \leq x_i \leq \frac{1}{\xi} (K + \bar{x}^T \bar{z}), \quad 0 \leq z_i \leq \frac{1}{\xi} (K + \bar{x}^T \bar{z}), \quad i = 1, 2, \dots, n$$

i queda provada l'afirmació. \square

Per provar l'existència i unicitat del camí central regularitzat definim un nou conjunt H^0 com

$$H^0 = \{(x, z) \mid (x, y, z) \in \mathcal{F}^0 \text{ per algun } y \in \mathbb{R}^m\}$$

Definim també la funció de barrera següent:

$$f_\mu = \frac{1}{\mu} x^T z - \sum_{i=1}^n \log(x_i z_i) \tag{3.29}$$

Teorema 3.4.1 *Enunciem les següents propietats de la funció f_μ :*

1. f_μ pren valors arbitràriament grans quan (x, z) s'atansa a la frontera d' H^0 , és a dir, quan qualsevol dels valors x_j, z_j s'atansen a zero.
2. f_μ és estrictament convexa en H^0

3. f_μ està fitada inferiorment.

4. Donat un $\mu > 0$, i qualsevol nombre κ , tots els punts (x, z) del conjunt de nivell $\mathcal{L}_\kappa = \{(x, z) \in H^0 \mid f_\mu(x, z) \leq \kappa\}$ per a la funció $f_\mu(x, z)$ satisfan

$$x_i \in [M_l, M_u], \quad z_i \in [M_l, M_u], \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad (3.30)$$

per certs nombres positius M_l i M_u , i per tant els punts (x, z) del conjunt de nivell \mathcal{L}_κ estan continguts en subconjunts compactes.

Demostració:

La propietat 1 és immediata. Per veure la propietat 2 usem $(x, y, z) \in \mathcal{F}^0 \Rightarrow A^T y + z - \mu Qx = c \Rightarrow x^T (A^T y + z - \mu Qx) = x^T c \Rightarrow x^T z = c^T x - x^T A^T y + \mu x^T Qx$, i per tant el primer terme de (3.29) és igual a la suma del terme lineal $c^T x - x^T A^T y$ més el terme quadràtic $\mu x^T Qx$, on $x > 0$, de forma que (3.29) és igual a la suma de funcions estrictament convexes, que és una funció estrictament convexa.

Per demostrar la propietat 3 definim la funció real de variable real $g(t) = t - \log t - 1$ per poder reescriure f_μ com

$$f_\mu(x, z) = \sum_{j=1}^n g\left(\frac{x_j z_j}{\mu}\right) + n - n \log \mu \quad (3.31)$$

La funció $g(t)$, estrictament convexa en el domini $(0, \infty)$, pren valors no negatius i tendeix a ∞ quan $t \rightarrow 0$ o bé $t \rightarrow \infty$. Com $g(t) \geq 0$ tenim que

$$f_\mu(x, z) \geq n - n \log \mu = n(1 - \log \mu),$$

que prova l'afirmació.

La propietat 4 es demostra observant que (3.31) implica que $f_\mu(x, z) \leq \kappa$ si i només si

$$\sum_{j=1}^n g\left(\frac{x_j z_j}{\mu}\right) \leq \bar{\kappa}$$

on $\bar{\kappa} = \kappa - n + n \log \mu$. Si ara prenem un valor particular de l'índex $j = i$ tindrem

$$g\left(\frac{x_i z_i}{\mu}\right) \leq \bar{\kappa} - \sum_{j \neq i} g\left(\frac{x_j z_j}{\mu}\right) \leq \bar{\kappa},$$

on l'última desigualtat és certa degut a que $g(t) \geq 0$. Llavors, tenint en compte que $g(t) \rightarrow \infty$ quan $t \rightarrow 0$ o bé $t \rightarrow \infty$, existirà un nombre M tal que

$$\frac{1}{M} \leq x_i z_i \leq M, \quad i = 1, 2, \dots, n$$

Si sumem els termes d'aquesta expressió obtenim

$$x^T z = \sum_{i=1}^n x_i z_i \leq nM. \quad (3.32)$$

Si usem ara el Lema 3.4.1 tindrem que existirà un nombre M_u tal que $x_i \in (0, M_u]$ i $z_i \in (0, M_u]$ per tot $i = 1, 2, \dots, n$. Llavors, usant (3.32), tindrem que $x_i \geq 1/(Mz_i) \geq 1/(MM_u)$ per tot i ; per z_i obtenim el mateix resultat. L'expressió (3.30) es compleix si fem $M_l = 1/(MM_u)$. \square

El següent teorema estableix que per qualsevol $\mu > 0$ la barrera f_μ definida en (3.29) assoleix el seu mínim en H^0 , que aquest mínim és únic, i que d'això es deriva que les equacions (3.25) tenen una única solució.

Teorema 3.4.2 Si $F^0 \neq \emptyset$ i $\mu > 0$, llavors f_μ té un mínim en H^0 únic, i (3.25) té solució única.

Demostració:

S'ha provat en el teorema 3.4.1 que cada conjunt de nivell $\mathcal{L}_\kappa = \{(x, z) \in H^0 \mid f_\mu(x, z) \leq \kappa\}$ de la funció f_μ està contingut en un compacte, la qual cosa implica que f_μ assoleix un mínim en el seu domini H^0 , i també s'ha provat que f_μ és estrictament convexa, per la qual cosa el mínim serà únic. A continuació veurem que aquest mínim proporciona els valors (x, z) que resolen (3.25).

Sigui el problema de minimització amb restriccions lineals

$$\min f_\mu(x, z) \text{ subjecte a } Ax = b, A^T y + z - \mu Qx = c, (x, z) > 0 \quad (3.33)$$

La Lagrangiana del problema és

$$\mathcal{L}(x, y, z) = f_\mu(x, z) + v(Ax - b) + w(A^T y + z - \mu Qx - c)$$

Obtenim les condicions KKT derivant la Lagrangiana i igualant a zero:

$$\begin{aligned} \frac{d\mathcal{L}}{dx} &= \frac{df_\mu}{dx} + A^T v - \mu Qw = \frac{1}{\mu} Ze - X^{-1}e + A^T v - \mu Qw = 0 \\ \frac{d\mathcal{L}}{dy} &= Aw = 0 \\ \frac{d\mathcal{L}}{dz} &= \frac{df_\mu}{dz} + w = \frac{1}{\mu} Xe - Z^{-1}e + w = 0 \end{aligned} \quad (3.34)$$

Combinant la primera amb la tercera igualtat obtenim

$$\begin{aligned} \frac{1}{\mu}Ze - X^{-1}e + A^T v - \mu Q(Z^{-1}e - \frac{1}{\mu}Xe) &= 0 \iff \\ A^T v = X^{-1}e - \frac{1}{\mu}Ze + \mu Q(Z^{-1}e - \frac{1}{\mu}Xe). \end{aligned} \quad (3.35)$$

Combinant la segona amb la tercera,

$$A(Z^{-1}e - \frac{1}{\mu}Xe) = 0.$$

L'anterior igualtat implica que

$$(Z^{-1}e - \frac{1}{\mu}Xe)^T A^T v = 0$$

Usant aquest resultat en la igualtat (3.35)

$$\begin{aligned} (Z^{-1}e - \frac{1}{\mu}Xe)^T (X^{-1}e - \frac{1}{\mu}Ze + \mu Q(Z^{-1}e - \frac{1}{\mu}Xe)) &= 0 \iff \\ (Z^{-1}e - \frac{1}{\mu}Xe)^T (X^{-1}e - \frac{1}{\mu}Ze) + (Z^{-1}e - \frac{1}{\mu}Xe)^T \mu Q(Z^{-1}e - \frac{1}{\mu}Xe) &= 0 \end{aligned} \quad (3.36)$$

Per al primer sumand d'aquesta última expressió podem usar la igualtat $(X^{-\frac{1}{2}} Z^{\frac{1}{2}})(X^{\frac{1}{2}} Z^{-\frac{1}{2}}) = I$ per a obtenir

$$\begin{aligned} (Z^{-1}e - \frac{1}{\mu}Xe)^T (X^{-1}e - \frac{1}{\mu}Ze) &= \\ (Z^{-1}e - \frac{1}{\mu}Xe)^T (X^{-\frac{1}{2}} Z^{\frac{1}{2}})(X^{\frac{1}{2}} Z^{-\frac{1}{2}})(X^{-1}e - \frac{1}{\mu}Ze) &= \\ (Z^{-\frac{1}{2}} X^{-\frac{1}{2}} e - \frac{1}{\mu} X^{\frac{1}{2}} Z^{\frac{1}{2}})^T (Z^{-\frac{1}{2}} X^{-\frac{1}{2}} e - \frac{1}{\mu} X^{\frac{1}{2}} Z^{\frac{1}{2}})^T &= \\ \left\| (ZX)^{-1/2} e - \frac{1}{\mu} (ZX)^{1/2} e \right\|_2^2 &\geq 0 \end{aligned}$$

on $\| \cdot \|_2$ és la norma euclídea. En quan al segon sumand de (3.36), com μQ és una matriu diagonal positiva, serà

$$(Z^{-1}e - \frac{1}{\mu}Xe)^T \mu Q(Z^{-1}e - \frac{1}{\mu}Xe) =$$

$$\left\| Z^{-1}e - \frac{1}{\mu}Xe \right\|_{\mu Q}^2 \geq 0$$

on $\| \cdot \|_{\mu Q}$ és la norma definida per a la mètrica μQ . Llavors per a verificar la igualtat (3.36) caldrà que es verifiquin les dues igualtats següents:

$$\begin{aligned} \left\| Z^{-1}e - \frac{1}{\mu}Xe \right\|_{\mu Q}^2 &= 0 \\ \left\| (ZX)^{-1/2}e - \frac{1}{\mu}(ZX)^{1/2}e \right\|_2^2 &= 0. \end{aligned}$$

De la primera igualtat $Z^{-1}e = \frac{1}{\mu}Xe \Leftrightarrow XZe = \mu e$ i de la segona obtenim també $(ZX)^{-1/2}e = \frac{1}{\mu}(ZX)^{1/2}e \Leftrightarrow \mu = ZXe$. Per a aquests valors tindrem un mínim del problema (3.33), que sabem que és únic, i a més a més veiem que aquests components (x, z) conjuntament amb el valor d' y donat per la condició de factibilitat $A^T y + z - \tau Q = c$ del problema (3.33) satisfan les equacions (3.34), tal com s'ha enunciat. \square

3.5 Convergència dels algorismes de seguiment del camí regularitzats

Els mètodes de seguiment del camí generen seqüències de punts $\{x^{(k)}\}$ que romanen dins d'un entorn del camí central. Hem vist en els apartats anteriors que el camí central regularitzat està ben definit, això és: cada punt x_μ del camí central existeix i és únic. En aquest apartat provarem la convergència d'un algorisme de punt interior de seguiment del camí regularitzat utilitzant la teoria de les funcions i barreres auto-concordants (*self-concordant barriers*) així com alguns resultats de l'Optimització Estructural (*Structural Optimization*, veure [43]). En el següent apartat presentarem les definicions i propietats necessàries sense demostracions, adreçant al lector interessat en els detalls a la referència.

3.5.1 Funcions i barreres auto-concordants

Definició 3.5.1 (Funció auto-concordant) Considerem una funció convexa $f(x) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ de classe $C^3(\text{dom } f)$ amb un domini obert, i notem per $f_d(x)$ la derivada direccional d' f en la direcció $d \in \mathbb{R}^n$. Considerem també les derivades direccionals d'ordre 2 i 3:

$$f_d''(x) = d^T f''(x) d = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n (\partial^2 f(x) / \partial x_i \partial x_j) d_i d_j$$

$$f_d''(x) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n (\partial^2 f(x) / \partial x_i \partial x_j \partial x_k) d_i d_j d_k$$

Direm que la funció f és *auto-concordant* (self-concordant) si existeix una constant $M_f \geq 0$ tal que la desigualtat entre derivades direccionals $d^T f$

$$\left| f_d'''(x) \right| \leq M_f f_d''(x)^{3/2} \quad (3.37)$$

es verifica per a tot $x \in \text{dom } f$ i per a tota direcció $d \in \mathbb{R}^n$. En particular, quan $M_f = 2$ diem que f és una funció *auto-concordant estàndard*.

La següent proposició, que es correspon amb [43, Corolari 4.1.2] afirma que podem transformar qualsevol funció auto-concordant en auto-concordant estàndard amb un canvi d'escala.

Proposició 3.5.1 *Sigui f una funció auto-concordant amb constant M_f i sigui $\kappa > 0$ un nombre real positiu qualsevol. Llavors la funció $g(x) = \kappa f(x)$ és també auto-concordant amb constant $M_g = \frac{1}{\sqrt{\kappa}} M_f$.*

Quan s'aplica el mètode de Newton de resolució de sistemes d'equacions no lineals al problema de minimitzar una funció auto-concordant les direccions de descens generades proporcionen la convergència quadràtica de l'algorisme a l'òptim [43]. L'extensió d'aquesta propietat als algorismes de seguiment del camí central ens porta a la definició de funció de barrera auto-concordant:

Definició 3.5.2 (Barrera auto-concordant) *Sigui $F(x) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ una funció auto-concordant estàndard. Direm que F és una barrera ν -auto-concordant per al conjunt $\text{dom } F$ si es verifica*

$$\sup_{d \in \mathbb{R}^n} \left[2F_d'(x) - F_d''(x) \right] \leq \nu, \quad x \in \text{dom } F \quad (3.38)$$

Si la hessiana $F''(x)$ te inversa, tenim la definició equivalent:

$$F'(x)^T \left(F''(x) \right)^{-1} F'(x) \leq \nu, \quad x \in \text{dom } F \quad (3.39)$$

El valor ν s'anomena paràmetre de la barrera.

La següent proposició ([43, Teorema 4.2.2]) ens diu que la suma de barreres auto-concordants és també una barrera auto-concordant.

Proposició 3.5.2 *Siguin $\{F_i\}$ barreres auto-concordants amb paràmetres ν_i , $i = 1, 2, \dots, n$. Llavors la funció $F(x) = \sum_{i=1}^n F_i$ és una barrera auto-concordant per al conjunt convex $\text{Dom } F = \bigcap_{i=1}^n \text{Dom } F_i$ amb paràmetre $\nu = \sum_{i=1}^n \nu_i$.*

Usarem aquesta propietat en la propera secció per reduir l'estudi de convergència de la funció de barrera regularitzada en \mathbb{R}^n al d'una barrera en \mathbb{R} .

3.5.2 Les Barreres regularitzades són Barreres Auto-Concordants

En aquest apartat demostrarem que la funció de barrera regularitzada (3.10) és una barrera auto-concordant tal com s'ha definit en la Definició 3.5.1.

Expressem (3.10) com a suma de barreres:

$$F_Q(x; \mu) = \sum_{i=1}^n F_{q_i}(x_i; \mu),$$

$$\text{amb } F_{q_i}(x_i; \mu) = -\mu\left(-\frac{1}{2}q_i x_i^2 + \ln x_i + \ln(u_i - x_i)\right), \quad 1 \leq i \leq n, \quad (3.40)$$

on hem usat $Q = \text{diag}(q)$, $q = [q_1 \ q_2 \ \dots \ q_n]^T \in \mathbb{R}_+^n$. Provant que les $F_{q_i}(x_i; \mu)$ són barreres auto-concordants en el seu domini $D_i = \{x_i \mid 0 < x_i < u_i\}$ per tot $1 \leq i \leq n$, la proposició 3.5.2, ens permet afirmar que $F_Q(x; \mu)$ també serà barrera auto-concordant en el domini $\bigcap_{i=1}^n D_i = \{x \mid 0 < x < u\}$.

Considerem, doncs, la barrera en \mathbb{R}

$$F_q(x) = -\ln x + \frac{1}{2}qx^2 - \ln(u - x) \quad (3.41)$$

on q és un nombre real positiu. Mostrarem a continuació que $F_q(x)$ és una funció auto-concordant.

Proposició 3.5.3 *$F_q(x)$ és una funció auto-concordant*

Demostració: *Definim la següent partició de la funció $F_q(x)$:*

$$F_q(x) = F_1(x) + F_2(x) + F_3(x)$$

on

$$F_1(x) = -\ln x, \quad F_2(x) = -\ln(u - x), \quad F_3(x) = \frac{1}{2}qx^2$$

Els dominis de les funcions $F_1(x)$, $F_2(x)$, $F_3(x)$ són, respectivament, $\{x \mid x > 0\}$, $\{x \mid x < u\}$, \mathbb{R} . És un resultat conegut que les barreres logarítmiques $F_1(x)$, $F_2(x)$ i la funció quadràtica convexa $F_3(x)$ són funcions auto-concordants amb constants $\nu_1 = \nu_2 = 2$, $\nu_3 = 0$ (veure

[43]). Llavors, per [43, Teorema 4.1.1] tenim que la suma de funcions auto-concordants $F_1(x) + F_2(x) + F_3(x)$ és també funció auto-concordant amb una constant igual al màxim de les constants de totes les funcions sumades. Per tant $F_q(x)$ és una funció auto-concordant en el domini $\text{dom } F_1 \cap \text{dom } F_2 \cap \text{dom } F_3 = \{0 < x < u\}$ amb constant $\nu = \max\{2, 2, 0\} = 2$. \square

La següent proposició mostra que la suma de les barreres logarítmiques $F_1(x)$, $F_2(x)$ és una barrera auto-concordant.

Proposició 3.5.4 $F(x) = F_1(x) + F_2(x) = -\ln x - \ln(u-x)$ és una barrera auto-concordant de paràmetre $\nu = 1$.

Demostració: Apliquem la definició (3.39)

$$\begin{aligned} F'(x) &= -\frac{1}{x} + \frac{1}{u-x} \\ F''(x) &= \frac{1}{x^2} + \frac{1}{(u-x)^2} \\ \frac{(F'(x))^2}{F''(x)} &= \frac{\left(-\frac{1}{x} + \frac{1}{u-x}\right)^2}{\frac{1}{x^2} + \frac{1}{(u-x)^2}} \cdot \frac{x^2(u-x)^2}{x^2(u-x)^2} = \frac{(2x-u)^2}{(u-x)^2 + x^2}, \end{aligned}$$

com $(2x-u)^2 - ((u-x)^2 + x^2) = 2x(x-u) \leq 0$ resulta que $(F'(x))^2/F''(x) \leq 1 = \nu$. \square

Amb aquests resultats previs estem en condicions de provar que (3.41) és una barrera auto-concordant.

Proposició 3.5.5 La barrera (3.41) és una barrera auto-concordant en el seu domini $\{x \mid 0 < x < u\}$, i el paràmetre de barrera és $\nu \leq qu^2 + 1$.

Demostració: Expressem (3.41) com $F_q(x) = F(x) + \frac{1}{2}qx^2$ on $F(x) = F_1(x) + F_2(x) = -\ln x - \ln(u-x)$; llavors $F'_q(x) = F'(x) + qx$; $F''_q(x) = F''(x) + q$. Prenent la definició (3.38) i utilitzant la Proposició 3.5.4,

$$\begin{aligned} \sup_{d \in \mathbb{R}} \left[2F'_q(x)d - F''_q(x)d^2 \right] &= \sup_{d \in \mathbb{R}} \left[2F'(x)d + 2qxd - F''(x)d^2 - qd^2 \right] \leq \\ &= \sup_{d \in \mathbb{R}} \left[2qxd - qd^2 \right] + \sup_{d \in \mathbb{R}} \left[2F'(x)d - F''(x)d^2 \right] \leq \\ &= qx^2 + 1 \leq \\ &= qu^2 + 1 \leq \nu. \quad \square \end{aligned}$$

Un cop tenim provat que la barrera regularitzada en \mathbb{R} és auto-concordant, és immediat veure que també ho serà en \mathbb{R}^n :

Proposició 3.5.6 *La barrera regularitzada en \mathbb{R}^n*

$$F_q(x) = - \sum_{i=1}^n (\ln x_i + \frac{1}{2} q_i x_i^2 - \ln(u_i - x_i)) \quad (3.42)$$

és una barrera auto-concordant.

Demostració: Només cal aplicar [43, teorema 4.2.2] per a veure que (3.42) és també auto-concordant amb paràmetre de barrera $\nu = \sum_{i=1}^n \nu_i$ \square .

La Proposició 3.5.5 proporciona una fita superior que prenem com a primera aproximació per el valor de paràmetre ν de la barrera (3.41). És possible obtenir fites més acurades i per tant millors valors per ν si fem suposicions sobre els valors del terme de regularització q , tal com estableix la següent proposició.

Proposició 3.5.7 *Es verifiquen les següents afirmacions pel paràmetre de barrera ν (3.41):*

- per a $0 \leq q \leq \frac{1}{u^2}$ el paràmetre de barrera és $\nu = 1$
- per a $q \geq \frac{1}{u^2}$ el paràmetre de barrera és $\nu = qu^2$

Demostració: Usarem la Definició 3.39 que estableix que el terme

$$T = \left[F_q''(x) \right]^{-1} \left(F_q'(x) \right)^2 = \frac{\left(-\frac{1}{x} + qx + \frac{1}{u-x} \right)^2}{\frac{1}{x^2} + q + \frac{1}{(u-x)^2}} \quad (3.43)$$

està afitat per ν en el domini $\{0 < x < u\}$. Considerem primer el cas $0 \leq q \leq \frac{1}{u^2} \Rightarrow qu^2 < 1 \Leftrightarrow 0 \leq qx^2 \leq 1 \Rightarrow -1 \leq qx^2 - 1 \leq 0$. Obtenim:

$$T = \frac{x^2 \left(-\frac{1}{x} + qx + \frac{1}{u-x} \right)^2}{x^2 \left(\frac{1}{x^2} + q + \frac{1}{(u-x)^2} \right)} = \frac{\left((-1 + qx^2) + \frac{x}{u-x} \right)^2}{\left(1 + qx^2 + \frac{x^2}{(u-x)^2} \right)} \leq \frac{\max \left\{ (qx^2 - 1)^2, \left(\frac{x}{u-x} \right)^2 \right\}}{1 + qx^2 + \frac{x^2}{(u-x)^2}} < 1 = \nu$$

Per a valors mes grans de q tals que $q > \frac{1}{u^2}$ definim els nombres reals positius $\alpha = qu^2$, $\beta = x/u$, $\alpha \geq 1$, $\beta \in (0, 1)$, per poder expressar T com

$$T = \frac{\left(-\frac{1}{\beta u} + \alpha \frac{1}{u^2} \beta u + \frac{1}{u - \beta u} \right)^2}{\frac{1}{\beta^2 u^2} + \alpha \frac{1}{u^2} + \frac{1}{(u - \beta u)^2}} = \frac{\left(-\frac{1}{\beta u} + \alpha \frac{1}{u} \beta + \frac{1}{u(1-\beta)} \right)^2}{\frac{1}{\beta^2 u^2} + \alpha \frac{1}{u^2} + \frac{1}{u^2(1-\beta)^2}} = \frac{\left(-\frac{1}{\beta} + \alpha \beta + \frac{1}{1-\beta} \right)^2}{\frac{1}{\beta^2} + \alpha + \frac{1}{(1-\beta)^2}} \quad (3.44)$$

Provarem a continuació que (3.44) és menor o igual que $qu^2 = \alpha$. Com $\alpha \geq 1$, $\beta \in (0, 1)$

tenim que

$$\begin{aligned}
T &= \frac{\left(-\frac{1}{\beta} + \alpha\beta + \frac{1}{1-\beta}\right)^2}{\frac{1}{\beta^2} + \alpha + \frac{1}{(1-\beta)^2}} \leq \frac{\left(-\frac{1}{\beta} + \alpha + \frac{1}{1-\beta}\right)^2}{\frac{1}{\beta^2} + \alpha + \frac{1}{(1-\beta)^2}} = \\
&= \frac{\left(-\frac{1}{\beta} + \alpha + \frac{1}{1-\beta}\right)^2}{\frac{1}{\beta^2} + \alpha + \frac{1}{(1-\beta)^2}} \cdot \frac{(1-\beta)^2 \beta^2}{(1-\beta)^2 \beta^2} = \\
&= \frac{\left(-\frac{1}{\beta} + \alpha + \frac{1}{1-\beta}\right)^2}{\frac{1}{\beta^2} + \alpha + \frac{1}{(1-\beta)^2}} \cdot \frac{(1-\beta)^2 \beta^2}{(1-\beta)^2 + \alpha(1-\beta)^2 \beta^2 + \beta^2} = \\
&= \frac{(\alpha(1-\beta)\beta + 2\beta - 1)^2}{\alpha(1-\beta)^2 \beta^2 + (2\beta^2 - 2\beta + 1)} \tag{3.45}
\end{aligned}$$

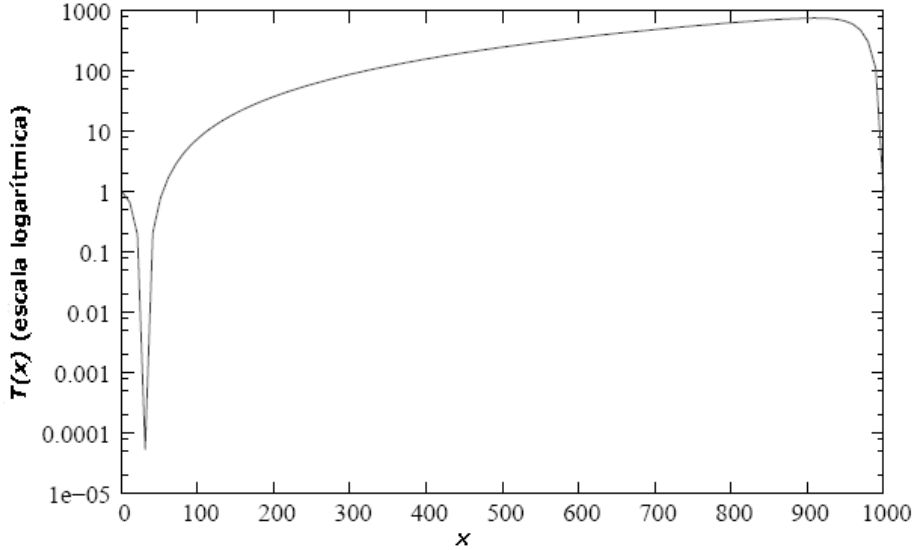
Volem veure que $T \leq \alpha$. El terme $(2\beta^2 - 2\beta + 1)$ del denominador és positiu per tot β , doncs $2\beta^2 - 2\beta + 1 = 0$ no té solucions reals, la seva derivada $4\beta - 2$ és negativa en $(-\infty, 1/2)$, positiva en $(1/2, \infty)$ i s'anula en $\beta = 1/2$, de forma que el valor mínim del terme és $(2 \cdot (1/2)^2 - 2 \cdot (1/2) + 1) = 1/2 > 0$. Per tant el numerador i el denominador de (3.45) són positius, i podem expressar la desigualtat $T \leq \alpha$ com

$$\begin{aligned}
(\alpha(1-\beta)\beta + 2\beta - 1)^2 &\leq \alpha(\alpha(1-\beta)^2 \beta^2 + (2\beta^2 - 2\beta + 1)) \Leftrightarrow \\
2\alpha(1-\beta)\beta(2\beta - 1) + (2\beta - 1)^2 &\leq \alpha(2\beta^2 - 2\beta + 1) \Leftrightarrow \\
\alpha(2\beta^2 - 2\beta + 1) - 2\alpha(1-\beta)\beta(2\beta - 1) - (2\beta - 1)^2 &\geq 0 \Leftrightarrow \\
\alpha(1 - 4\beta^2 + 4\beta^3) - (2\beta - 1)^2 &\geq 0 \Leftrightarrow \\
(1 - 4\beta^2 + 4\beta^3) - (2\beta - 1)^2 &\geq 0
\end{aligned}$$

En l'última implicació hem usat $\alpha \geq 1$. Operant, tenim que $(1 - 4\beta^2 + 4\beta^3) - (2\beta - 1)^2 = 4\beta^3 - 8\beta^2 + 4\beta = 4\beta(\beta - 1)^2$ que efectivament resulta ser més gran que zero per $\beta \in (0, 1)$ □.

El fet de que per a $q \rightarrow 0$ obtenim el paràmetre $\nu = 1$ es pot interpretar com una mena de continuïtat de la regularització quadràtica: en el límit de regularitzacions molt petites el paràmetre de la barrera regularitzada s'atansa al de la barrera estàndard no regularitzada; per el cas $0 \leq q \leq \frac{1}{u^2}$ prenem el valor 1 no com a fita superior del paràmetre de barrera, sinò com el seu valor. En canvi per el cas $q \geq \frac{1}{u^2}$, el valor resultant per el paràmetre de barrera, qu^2 , que normalment prendrà valors superiors a 1, el prenem com una fita superior del paràmetre ν .

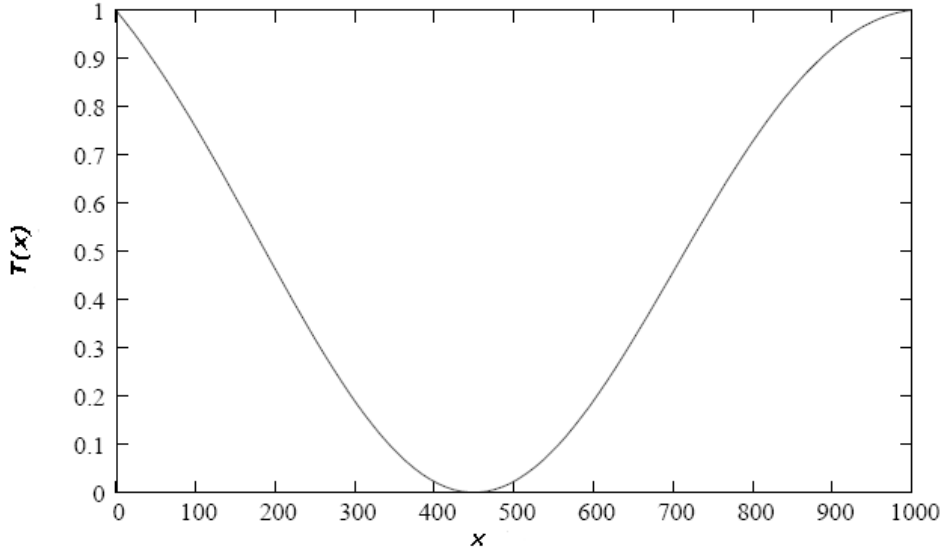
Les figures (3.1) i (3.2) mostren els valors que pren l'expressió (3.43) en els casos $q > 1/u^2$ i $q < 1/u^2$ respectivament, per a un únic valor de la fita $u = 1000$. En el primer cas els valors de T queden per sota del valor $qu^2 = 1000u^2/u^2 = 1000$ mentre que en el segon cas

Figura 3.1: Valors de (3.43) per a $u = 1000$, $q = 1000/u^2$ 

queden per sota del valor 1.

3.5.3 Complexitat afegida pel terme de regularització

En [43, Teorema 4.2.2] es mostra que un algorisme de seguiment del camí primal-dual que utilitzi una barrera auto-concordant de paràmetre ν acabarà en un nombre d'iteracions màxim de l'ordre de $\mathcal{O}(\sqrt{\nu} \cdot \ln 1/\epsilon)$ on ϵ és la precisió exigida a la solució. D'altra banda, en [43, Lema 4.3.1] es demostra que el valor mínim del paràmetre ν per a qualsevol barrera auto-concordant en \mathbb{R}^n és n . Hem vist en l'apartat anterior que aquest valor mínim de ν s'aconsegueix per a valors "petits" de Q , la qual cosa indica que la eficiència en quan a nombre d'iteracions de punt interior de l'algorisme regularitzat és igual al de l'algorisme estàndard per a valors suficientment petits de Q . D'altra banda hem vist que el paràmetre ν per a valors $q > \frac{1}{u^2}$ depèn del producte qu^2 que pot prendre valors molt grans i en conseqüència degradarà el comportament de l'algorisme. En els següents capítols mostrarem que, en la pràctica, si bé és cert que el nombre d'iteracions dels algorismes tendeix a augmentar segons Q creix, aquest augment no és tant crític com semblen indicar els raonaments teòrics exposats. Aquest fet no contradiu la teoria, doncs el que ens proporciona aquesta són fites, no valors exactes, i per tant el que sí podem afirmar és que és probable que es puguin aconseguir fites més ajustades al comportament real dels algorismes.

Figura 3.2: Valors de (3.43) per a $u = 1000$, $q = 0.9/u^2$ 

3.6 Regularització de problemes lineals generals

3.6.1 Motivació

Malgrat que aquesta tesi té com a objecte principal el desenvolupament de nous algorismes especialitzats i les seves implementacions per a resoldre problemes lineals d'optimització que en la seva formulació presenten una matriu de restriccions amb estructura diagonal en blocs, la teoria formal que hem desenvolupat en aquest capítol permet plantejar l'aproximació quadràtica de problemes lineals en termes generals, dintre del context de mètodes de punt interior per a programació lineal. En aquesta secció hem aplicat la nova tècnica de regularització quadràtica a un algorisme de punt interior per a problemes lineals generals, i això ens ha servit per a fer un estudi empíric del comportament de l'algorisme regularitzat, comprovant la teoria enunciada i els resultats proporcionats per als teoremes.

3.6.2 Implementació

Respecte als valors que es prenen per a la matriu de regularització Q , no tenim a priori cap estimació, només sabem que els seus valors no han de ser massa grans. La elecció que hem fet és heurística, intentant que el valor del terme quadràtic $x^T Q x$ sigui del mateix ordre de magnitud que la funció objectiu $c^T x$, prenent el valor $Q = qI$, on I és la matriu identitat en $\mathbb{R}^{n \times n}$ i $q \in \mathbb{R}$ és

$$q = \delta \left(\frac{\sum_{i=1}^n |c_i|}{\sum_{i=1}^n x_i^{(0)}} \right) \Rightarrow x^T Q x = q x^T I x = \delta \left(\frac{\sum_{i=1}^n |c_i|}{\sum_{i=1}^n x_i^{(0)}} \right) \sum_{i=1}^n (x_i)^2 \quad (3.46)$$

El paràmetre $\delta \in \mathbb{R}^+$ ens permet provar diferents valors de la regularització per a cada problema, i $x^{(0)} \in \mathbb{R}^n$ és el punt inicial que pren l'algorisme IP. Donat que el terme quadràtic es multiplica per el paràmetre de barrera μ , el qual en les primeres iteracions pot prendre valors grans hem introduït un nou ajust d'escala en (3.46), resultant

$$q = \frac{1}{\mu^0} \delta \left(\frac{\sum_{i=1}^n |c_i|}{\sum_{i=1}^n x_i^{(0)}} \right) \quad (3.47)$$

on μ^0 és el valor inicial del paràmetre de barrera, que és $\sum_{i=1}^n x_i^{(0)} z_i^{(0)} / n$. D'aquesta forma els valors successius que pren el terme $\mu^{\frac{1}{2}} x^T Q x$ de regularització són

$$\mu^k \left(\frac{1}{2} (x^{(k)})^T Q_k x^{(k)} \right) = \frac{\mu^k}{\mu^0} \delta \left(\frac{\sum_{i=1}^n |c_i|}{\sum_{i=1}^n x_i^{(0)}} \right) \sum_{i=1}^n (x_i^{(k)})^2$$

Per a implementar la regularització quadràtica s'ha usat un codi acadèmic implementat en "C" per a problemes quadràtics del tipus de seguiment del camí primal-dual. Aquest codi, al que anomenarem IP, resol les equacions KKT en la versió anomenada equacions normals [60, pàgina 210] utilitzant factoritzacions esparses de Cholesky, implementades en el paquet d'en Ng-Peyton [45]. Inclou també el càlcul de direccions de descens amb correccions de segon ordre usant una variant de les correccions de segon ordre de Mehrotra [60, capítol 10] semblant a la implementada en el codi PCx [20]. Aquest codi s'ha especialitzat de forma que tracta un problema lineal com si sigués quadràtic, usant la matriu Q que acabem d'establir, multiplicada per al paràmetre de barrera μ . L'algorisme (3.1) dóna un esquema general del tractament.

3.6.3 Resultats computacionals

Hem resolt un subconjunt de la col·lecció Netlib de problemes lineals estàndard variant el paràmetre δ des de 10^{-12} fins a 10^4 en passes de 10. En la taula (3.2) veiem la comparació entre l'algorisme no regularitzat IP i la millor execució de la versió regularitzada; es mostren per a cada instància el nombre de variables (n), de restriccions (m), el nombre d'iteracions de punt interior de l'algorisme IP estàndard (IP) i de l'algorisme regularitzat (RIP), el valor (q) que pren inicialment el factor (3.47) amb la millor δ , i el valor de la funció objectiu en l'òptim (f^*). En la columna "RIP" estan ressaltats en negreta els casos on RIP ha estat superior a IP.

En l'Apartat 3.5.3 hem previst que a mesura que $Q \rightarrow 0$ l'algorisme regularitzat s'ha d'aproximar al no regularitzat, de forma que prenent el paràmetre δ apropiat, RIP ha de

Algorisme 3.1 Regularització quadràtica d'un problema lineal generalInicialitzar $(x^{(0)}, y^{(0)}, z^{(0)})$; $k = 0$ **Mentre** $(x^{(k)}, y^{(k)}, z^{(k)})$ no sigui l'òptim **fer**

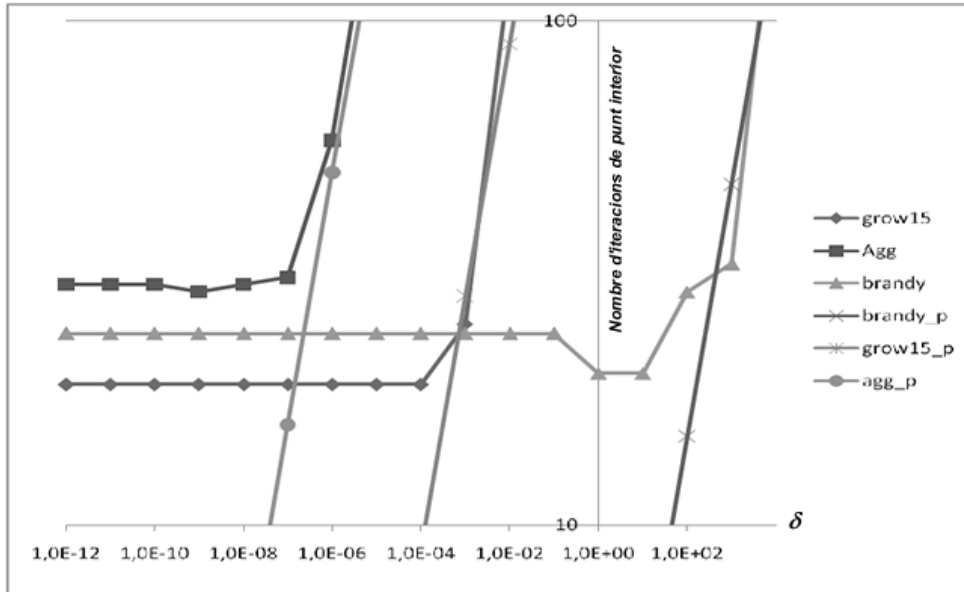
- resoldre les equacions (3.14a)– (3.14d) per obtenir $(\Delta x^{(k)}, \Delta y^{(k)}, \Delta z^{(k)})$ aplicant les correccions de 2n ordre
- calcular les llargades de passa màximes α_p, α_d tals que $x^{(k)} + \alpha_p \Delta x^{(k)} > 0$, $z + \alpha_d \Delta z^{(k)} > 0$
- $(x^{(k+1)}, y^{(k+1)}, z^{(k+1)}) = (x^{(k)}, y^{(k)}, z^{(k)}) + (\alpha_p \Delta x^{(k)}, \alpha_d \Delta y^{(k)}, \alpha_d \Delta z^{(k)})$
- actualitzar el paràmetre de barrera μ_k , el paràmetre de centrat σ_k , i la matriu $Q_\mu = \mu_k q I$ on q es pren de (3.47)
- $k = k + 1$

Fi_Mentre

Taula 3.2: Resultats amb els problemes Netlib, resolts sense i amb regularització

| Instància | n | m | IP | RIP | q | f^* |
|-----------|-------|------|----|-----------|----------|-----------|
| Adlittle | 138 | 56 | 15 | 14 | 4.98e-03 | 2.25e+05 |
| Afiro | 51 | 27 | 10 | 10 | 2.3e-05 | -4.65E+02 |
| Agg | 615 | 488 | 30 | 29 | 8.4e-11 | -3.60e+07 |
| Bandm | 472 | 305 | 21 | 20 | 4.5e-04 | -1.59E+02 |
| Beaconfd | 295 | 173 | 13 | 13 | 1.7e-05 | 3.36E+04 |
| Blend | 114 | 74 | 15 | 14 | 3.4e-02 | -3.08E+01 |
| Bore3d | 333 | 233 | 16 | 16 | 3.4e-06 | 1.37E+03 |
| Brandy | 303 | 182 | 24 | 20 | 6.6e-05 | 1.52E+03 |
| Degen3 | 2604 | 1503 | 22 | 22 | 6.1e-05 | -9.87e+02 |
| E226 | 472 | 223 | 24 | 22 | 4.5e-02 | -1.88E+01 |
| Etamacro | 734 | 400 | 28 | 27 | 4.8e-08 | -7.56E+02 |
| Fit2d | 10524 | 25 | 24 | 24 | 4.5e-05 | -6.85E+04 |
| Grow15 | 645 | 300 | 19 | 19 | 2.7e-11 | -1.07E+08 |
| Kb2 | 68 | 43 | 19 | 19 | 1.0e-06 | -1.75E+03 |
| Maros-r7 | 9408 | 3136 | 18 | 18 | 1.0e-07 | 1.50E+06 |
| Recipe | 178 | 87 | 11 | 11 | 1.0e-03 | -2.67E+02 |
| Sc105 | 163 | 104 | 12 | 11 | 6.1e-05 | -5.22E+01 |
| Wood1p | 2595 | 244 | 24 | 20 | 0.3854 | 1.44E+00 |

Figura 3.3: Predicció del comportament de la regularització segons els valors de (3.46) (escales logarítmiques)



comportar-se com a mínim igual de bé que IP. Observem en la taula (3.2) que efectivament això és veríficat, doncs en cap cas IP supera el rendiment de RIP. Fins i tot tenim que en 9 instàncies de les 18, un 50% dels casos, RIP ha estat lleugerament superior. Recordem que el propòsit principal d'aplicar la regularització quadràtica és millorar un algorisme especialitzat per a problemes amb una estructura especial de la matriu de restriccions, i en aquest capítol només hem pretès provar la nova tècnica i les argumentacions teòriques fetes anteriorment, així que el fet de que RIP sigui superior a IP no era un resultat esperat. El fonament teòric d'aquest fet considerem que queda fora de l'àmbit d'estudi d'aquesta memòria. De totes formes cal tenir en compte que s'han aconseguit aquests resultats variant manualment el paràmetre δ . En total s'han fet 17 execucions de cada instància de la taula (3.2).

En la Secció 3.5.3 dèiem que la complexitat d'un algorisme de punt interior de seguiment del camí regularitzat ha de ser de l'ordre de $\mathcal{O}(\sqrt{\nu} \cdot \ln 1/\epsilon)$, i que quan $q > 1/u^2$, ν és de l'ordre de qu^2 per a un problema unidimensional, i de $q \sum_{i=1}^n u_i^2$ per a un problema en \mathbb{R}^n . Tenint em compte l'expressió (3.46) per als valors de q , tenim que la complexitat en funció del paràmetre δ serà $\mathcal{O}(k\sqrt{\delta})$, on k és una constant que depèn del problema i de la precisió de l'algorisme.

Un altre previsió de la teoria desenvolupada era que, a mesura que Q augmenta, el nombre d'iteracions de punt interior també augmentarà. Aquest punt també s'ha verificat empíricament. Per confirmar-ho, s'han resolt alguns dels problemes de la taula (3.2) amb diversos δ per veure com afecta al nombre d'iteracions de punt interior. S'han triat tres instàncies que representin comportaments variats de la regularització: en la primera ("grow15") RIP obté

el mateix nombre d'iteracions que IP amb una $q = 2.7 \cdot 10^{-11}$ molt petita, en el segon (“agg”) RIP avantatge a IP en només una iteració, també amb una $q = 8.4 \cdot 10^{-11}$ molt petita, i en la tercera (“brandy”) RIP avantatja a IP en 4 iteracions usant una $q = 6.6 \cdot 10^{-5}$ que és 6 ordres de magnitud superior als anteriors. S'observa que en les tres instàncies el nombre d'iteracions roman pràcticament constant en un interval més o menys ampli de valors de δ , dependent de la instància, i a partir d'una certa δ les iteracions primer presenten un mínim local per a després incrementar-se ràpidament. En el cas de la instància “grow15” el mínim local no es presenta perquè RIP no aconsegueix cap millora respecte a IP. En tots els casos per a $\delta = 10^4$ el nombre d'iteracions ha estat superior a 200, que és el nombre màxim permès tant en IP com en RIP.

En la Figura 3.3 hem reproduït el comportament d'alguns problemes afegint les prediccions teòriques segons la fórmula iteracions = $k\sqrt{\delta}$ on el paràmetre k depèn de cada instància. Per a cada un dels tres problemes tenim una recta identificada amb el nom de la instància i el sufix “-p”. Observem que en el rang de valors de δ per als quals les iteracions creixen amb Q , la predicció teòrica s'ajusta bé al comportament observat.

D'altre banda per a valors $q < 1/u^2$ esperem obtenir un comportament semblant al de l'algorisme no regularitzat. Aquest comportament es correspon amb el rang de valors petits de ν per al qual efectivament observem en la Figura 3.3 que la regularització no afecta significativament al nombre d'iteracions. El valor de certa δ_c crítica a partir del qual les iteracions creixen es relacionaria llavors amb el valor $q > 1/u^2$. En certes instàncies, a més a més, abans de la δ_c podem tenir una δ_* tal que obtenim un mínim d'iteracions que és millor que el de l'algorisme no regularitzat.

Capítol 4

Regularització dels problemes angulars en blocs

En aquest capítol presentarem una categoria de problemes que presenten una estructura especial en la seva formulació: aquella en la que la matriu de restriccions té una estructura diagonal en blocs, i mostrem també els algorismes especialitzats que exploten aquesta estructura per a aconseguir més eficiència en la seva resolució que no pas els algorismes d'ús general. A continuació mostrarem formalment que la regularització quadràtica de la funció de barrera presentada en el capítol anterior aplicada a un algorisme especialitzat de punt interior aconsegueix millorar encara més les prestacions computacionals, establint els teoremes adients. En el següent capítol es veuran els detalls de les implementacions realitzades així com els resultats computacionals.

4.1 Problemes amb estructura angular en blocs

Un problema d'optimització amb estructura angular en blocs és aquell en el que intervenen simultàniament k conjunts de variables (blocs), de forma que cada conjunt té els seu propi vector de costos i de restriccions, i a més hi han unes restriccions mútues que lliguen tots els k conjunts entre sí (“*linking constraints*”). Les restriccions mútues són les responsables de que tinguem un únic problema i no pas k problemes independents. Típicament els problemes que permeten aquesta formulació tenen un elevat nombre de variables i restriccions, doncs de fet equivalen a k problemes simultanis.

La formulació que usarem per als problemes angulars en blocs és la següent:

$$\min \sum_{i=0}^k (c^{iT} x^i + x^{iT} Q_i x^i) \quad (4.1)$$

$$\text{subjecte a } \begin{bmatrix} N_1 & & & & & \\ & N_2 & & & & \\ & & \ddots & & & \\ & & & N_k & & \\ L_1 & L_2 & \cdots & L_k & I & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x^1 \\ x^2 \\ \vdots \\ x^k \\ x^0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b^1 \\ b^2 \\ \vdots \\ b^k \\ b^0 \end{bmatrix} \quad (4.2)$$

$$0 \leq x^i \leq u^i \quad i = 0, \dots, k \quad (4.3)$$

Els vectors $x^i \in \mathbb{R}^{n_i}$, $i = 1, \dots, k$ són les variables de cada bloc. Cada matriu $N_i \in \mathbb{R}^{m_i \times n_i}$ i $L_i \in \mathbb{R}^{l \times n_i}$, $i = 1, \dots, k$ defineix les restriccions de cada x^i i les restriccions mútues de totes les x^1, \dots, x^k , respectivament; aquestes últimes tenen la forma general $\sum_{i=1}^k L_i x^i \leq b^0$. Introduint el vector x^0 per contenir les folgues de les restriccions mútues resulta $\sum_{i=1}^k L_i x^i + x^0 = b^0$. Els vectors $b^i \in \mathbb{R}^{m_i}$, $i = 1, \dots, k$ són els termes independents de les variables x^i i el vector $b^0 \in \mathbb{R}^l$ és el terme independent de les restriccions d'acoblament. Les fites superiors per a cada grup de variables estan definides en els vectors u^i , $i = 0, \dots, k$. La formulació presentada inclou termes quadràtics en la funció objectiu, fins i tot inclou també costos lineals c^0 i quadràtics Q^0 per a les variables de folga x^0 . Ens restringirem al cas en el que les matrius Q^i $i = 0, \dots, k$ són diagonals definides positives.

Diverses categories de problemes permeten una formulació d'aquest tipus, com ara:

- *Fluxos multiarticle* (“*multicommodity flows*”): són problemes d'optimització de fluxos en una xarxa on diversos productes independents entre sí (els articles) comparteixen un mateix canal de transmissió (la xarxa). Considerem que cada “bloc” de (4.1) és un article. Al formular aquests problemes cal assignar variables per als fluxos de cada article, de forma que el nombre total de variables queda multiplicat pel nombre d'articles que tractem. La formulació clàssica d'un problema de fluxos multiarticle coincideix amb (4.1) considerant una xarxa de m nodes, n arcs i k articles, quan fem $Q_i = 0$, $i = 1, \dots, k$ (fluxos lineals), $N_1 = N_2 = \dots = N_k = N$ on N és la matriu d'incidència arc-node del graf dirigit que descriu l'estructura de la xarxa i $L_1 = L_2 = \dots = L_k = I$ de forma que l'última restricció expressada per (4.1) és la que imposa que la suma de fluxos de tots els articles no sobrepassi la capacitat de l'arc: $\sum_{i=1}^k x^i + x^0 = b^0 \Leftrightarrow \sum_{i=1}^k x^i \leq b^0$. Els vectors u^i representen les capacitats individuals de cada article en els arcs, mentre que els vectors b^i representen les injeccions o extraccions de cada article en cada node de la xarxa.
- *Màxim flux concurrent* (“*maximum concurrent flow*”): equival al problema de congestió mínima (“*minimum congestion problem*”)[6], i tant un com altre es donen en aplicacions

pràctiques de xarxes de telecomunicacions. El problema de congestió mínima és de fet un problema minimax (“*min-max problem*”): troba el mínim dels màxims increments relatius en les capacitats dels arcs de la xarxa tals que fan que el problema sigui factible, això és, que tots els fluxos multiarticle poden ser enviats des dels orígens fins les destinacions. Aquest problema minimax es pot transformar en un problema lineal que té estructura angular en blocs [16].

- *Protecció de dades de taules estadístiques*: és fonamental per als Instituts d'Estadística oficials, que recullen dades poblacionals i les publiquen, per tal de garantir la privacitat de les dades de qualsevol individu. Les taules de dades s'obtenen creuant dos o més variables com ara professió, estudis i edat. El producte cartesià dels valors que prenen aquestes variables produeixen un conjunt de caselles. Per a cada casella la taula informa de la freqüència d'ocurrència dels valors, o bé informa d'alguna magnitud per a un altre variable. Per a aquestes dades tabulades, les dades individuals es poden identificar directament des de caselles que contenen freqüències petites. També es poden fer identificacions indirectes manipulant relacions entre valors de caselles i els totals de files i columnes de la taula [19]. Hi han diverses tècniques per a protegir les dades; una de recent és l'anomenada *minimum distance controlled tabular adjustment* introduïda en [15, 19], que introdueix pertorbacions als valors confidencials de les taules, pertorbacions que s'obtenen a través d'un problema d'optimització, fent petits ajustos a les caselles de forma que els totals de files i columnes no variïn respecte a les dades originals; és a dir es busca minimitzar la pertorbació necessària per a protegir les caselles confidencials. La formulació d'aquests problemes en taules 3-dimensionals té estructura angular en blocs [14].

4.2 Estat de l'art

En aquest apartat presentem els algorismes especialitzats existents actualment per a resoldre els problemes amb estructura angular en blocs, i detallem la formulació d'un d'ells: el de punt interior primal-dual de seguiment del camí, que serà el que utilitzarem per a aplicar la regularització quadràtica.

Per als problemes lineals de fluxos multiarticle podem distingir dos famílies de mètodes especialitzats: els basats en el mètode símplex i els basats en mètode de punt interior per a programació lineal. Històricament els primers mètodes especialitzats han caigut dintre de la primera categoria, dels quals podem mencionar els mètodes de particionament del problema original en $k + 1$ problemes de cost mínim en xarxes uniarticle [24] [54] i els mètodes de particionament primal, que particionen la matriu bàsica del mètode símplex per tal d'explotar l'estructura del problema multiarticle [35]. Més modernament s'han fet nous intents d'especialitzar algorismes basats en símplex de programació lineal i de programació

en xarxes per a fluxos multiarticle [18] [46].

En quan als mètodes de punt interior, durant anys no va haver cap implementació que sigués significativament més eficient que els mètodes símplex especialitzats, fins l'aparició d'una estratègia basada en resoldre les equacions relacionades amb les restriccions dels blocs amb factoritzacions de Cholesky per una banda i les equacions relacionades amb les restriccions mútues amb un mètode del gradient conjugat preconditionat per l'altre banda [11], on el preconditionador està dissenyat de forma que exploti l'estructura del problema; anomenarem IPM a l'algorisme resultant d'aplicar aquesta tècnica. Per a certs problemes de fluxos multiarticle el mètode de punt interior IPM descrit en [11] supera en prestacions als millors codis especialitzats basats en símplex [13]. D'altre banda ha estat reconegut com el mètode de punt interior més eficient per a cert tipus de problemes de fluxos multiarticle [9]. El mètode original s'ha ampliat per tal de resoldre problemes quadràtics de fluxos multiarticle [12] i problemes quadràtics amb estructura angular en blocs [16]; anomenarem QIPM a aquest últim algorisme. Com ja s'ha comentat en la introducció d'aquesta memòria, va ser l'observació del millor comportament de QIPM amb els problemes quadràtics que no pas amb els lineals el fet empíric que ha estat el punt de partida d'aquesta tesi. En la següent secció descriurem aquest mètode especialitzat.

4.3 Mètode especialitzat de punt interior

A continuació presentem les equacions Karush-Kuhn-Tucker d'optimalitat per al problema (4.1), seguidament mostrem les equacions normals i com l'algorisme especialitzat les resol combinant factoritzacions de matrius amb el mètode del gradient conjugat preconditionat de forma que s'aprofiti l'estructura del problema. També es presenten resultats computacionals que mostren el millor comportament del preconditionador en els problemes quadràtics que no pas en els lineals.

4.3.1 Resolució de les equacions KKT d'optimalitat

El problema (4.1) pot expressar-se de forma més compacte com

$$\begin{aligned} \min \quad & c^T x + \frac{1}{2} x^T Q x \\ \text{subjecte a} \quad & Ax = b \\ & 0 \leq x \leq u \end{aligned} \tag{4.4}$$

on $c, x, u \in \mathbb{R}^n$, $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $b \in \mathbb{R}^m$, $n = \sum_{i=0}^k n_i$, $m = \sum_{i=0}^k m_i$. Aquesta formulació coincideix amb la de la Secció 2.9; reproduïm aquí les equacions normals presentades en la Secció 2.9.1 del capítol 2:

$$(A\Theta A^T)\Delta y = r_b + A\Theta r = g \quad (4.5a)$$

$$\Delta x = \Theta(A^T \Delta y - r) \quad (4.5b)$$

$$\Theta = (Q + X^{-1}Z + (U - X)^{-1}W)^{-1} \quad (4.5c)$$

$$\Delta z = (U - X)^{-1}(r_{uw} + W\Delta x) \quad (4.5d)$$

$$\Delta w = (U - X)^{-1}(r_{uw} + W\Delta x) \quad (4.5e)$$

$$r_c = c - (A^T y + z - w - Qx) \quad (4.5f)$$

$$r_b = b - Ax \quad (4.5g)$$

$$r_{xz} = \mu e - XZe \quad (4.5h)$$

$$r_{uw} = \mu e - (U - X)We \quad (4.5i)$$

$$r = r_c - X^{-1}r_{xz} + (U - X)^{-1}r_{uw} \quad (4.5j)$$

Fins aquí no hem usat l'estructura del problema (4.1), que ara anem a aprofitar.

La matriu $A\Theta A^T$ de l'equació (4.5a) es pot expressar, tenint en compte (4.2), com

$$\begin{aligned} A\Theta A^T &= \begin{bmatrix} N_1\Theta_1N_1^T & & & N_1\Theta_1L_1^T \\ & \ddots & & \vdots \\ & & N_k\Theta_kN_k^T & N_k\Theta_kL_k^T \\ L_1\Theta_1N_1^T & \cdots & L_k\Theta_kN_k^T & \Theta_0 + \sum_{i=1}^k L_i\Theta_iL_i^T \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} B & C \\ C^T & D \end{bmatrix} \end{aligned}$$

on hem definit les matrius

$$B = \begin{bmatrix} N_1 \Theta_1 N_1^T & & \\ & \ddots & \\ & & N_k \Theta_k N_k^T \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{\tilde{n} \times \tilde{n}}, \quad \tilde{n} = \sum_{i=1}^k n_i \quad (4.6)$$

$$C = \begin{bmatrix} N_1 \Theta_1 L_1^T \\ \vdots \\ N_k \Theta_k L_k^T \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{\tilde{n} \times l} \quad (4.7)$$

$$D = (\Theta_0 + \sum_{i=1}^k L_i \Theta_i L_i^T) \in \mathbb{R}^{l \times l} \quad (4.8)$$

$$F_i = U_i - X_i > 0 \quad (4.9)$$

$$\Theta_i = (Q_i + F_i^{-1} W_i + X_i^{-1} Z_i)^{-1} > 0 \quad (4.10)$$

Llavors (4.5a) es pot escriure, particionant adequadament Δy i $g = r_b + A\Theta r$, com

$$\begin{bmatrix} B & C \\ C^T & D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta y_1 \\ \Delta y_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_1 \\ g_2 \end{bmatrix} \quad (4.11)$$

$$\Downarrow \quad (4.12)$$

$$B\Delta y_1 + C\Delta y_2 = g_1 \quad (4.13)$$

$$C^T \Delta y_1 + D\Delta y_2 = g_2 \quad (4.14)$$

Eliminant Δy_1 del primer grup d'equacions de (4.11) obtenim

$$B\Delta y_1 = (g_1 - C\Delta y_2) \Rightarrow \quad (4.15)$$

$$C^T(B^{-1}(g_1 - C\Delta y_2)) + D\Delta y_2 = g_2 \Leftrightarrow$$

$$(D - C^T B^{-1} C)\Delta y_2 = (g_2 - C^T B^{-1} g_1) \quad (4.16)$$

Les equacions (4.15) estan relacionades amb les restriccions de cada x^i mentre que les (4.16) estan associades a les restriccions mútues de totes les x^1, \dots, x^k .

4.3.2 Resolució de les equacions normals

L'algorisme especialitzat [11, 16] resol les equacions lineals (4.15) usant factoritzacions de Cholesky de cada bloc diagonal $N_i \Theta_i N_i^T$ de la matriu del sistema B definida en (4.6), mentre que per a les equacions (4.16) usa el mètode del gradient conjugat preconditionat (abreujadament PCG) per a sistemes d'equacions lineals. Aquesta és una diferència significativa

respecte a altres mètodes de punt interior basats en PCG els quals resolen tot el conjunt d'equacions en la forma de sistema augmentat (2.44) o en la de equacions normals (4.15),(4.16), mentre que en [11] només s'utilitza PCG per les equacions associades a les restriccions mútues.

Com és sabut, el mètode del gradient conjugat per a sistemes lineals $Ax = b$ s'aplica a sistemes amb matrius A simètriques i definides positives, i es pot accelerar la seva convergència usant un preconditionador: una matriu M tal que el sistema $M^{-1}Ax = M^{-1}b$ estigui millor condicionat que el sistema original. Per tal de reduir el nombre d'iteracions és desitjable que M^{-1} sigui una bona aproximació a la inversa A^{-1} en el sentit de que el radi espectral ρ de $I - M^{-1}A$ sigui petit. En [11] es demostra que $D - C^T B^{-1}C$ efectivament és simètrica definida positiva i que la seva inversa és exactament igual a

$$(D - C^T B^{-1}C)^{-1} = \left(\sum_{i=0}^{\infty} (D^{-1} (C^T B^{-1}C))^i \right) D^{-1} \quad (4.17)$$

Llavors la inversa aproximada M^{-1} es forma truncant la sèrie (4.17) prenent només els h primers termes. Com la velocitat de convergència de la sèrie (4.17) depèn del radi espectral de $D^{-1} (C^T B^{-1}C)$, com menor sigui aquest radi menys termes caldrà prendre en el truncament de la sèrie per a obtenir un preconditionador eficient. En [11, Teorema 1] es prova que aquest radi cau sempre en l'interval $[0, 1)$, altrament la sèrie (4.17) no seria convergent.

La implementació de l'algorisme especialitzat pren $h = 0$ o $h = 1$, és a dir:

$$\begin{aligned} M^{-1} &= D^{-1} && \text{si } h = 0 \\ M^{-1} &= (I + D^{-1} (C^T B^{-1}C)) D^{-1} && \text{si } h = 1 \end{aligned}$$

Notem que l'última expressió pot expressar-se en forma simètrica:

$$M^{-1} = D^{-1/2} (I - D^{-1/2} C^T B^{-1} C D^{-1/2})^{-1} D^{-1/2};$$

de la mateixa forma podem expressar la sèrie (4.17) en forma simètrica com

$$D^{-1/2} \left(\sum_{i=0}^{\infty} (D^{-1/2} (C^T B^{-1}C) D^{-1/2})^i \right) D^{-1/2}.$$

L'Algorisme 4.1 mostra esquemàticament la seqüència de passes; no utilitza les correccions de segon ordre de l'Algorisme 2.2 de la Secció 2.7, sinó que segueix l'estructura de l'Algorisme 2.1 de seguiment del camí pur. Això és degut a l'utilització del mètode de gradient conjugat preconditionat dintre de cada iteració de punt interior, que resta efectivitat a les correccions de segon ordre doncs aquestes necessiten calcular dues passes en cada iteració, la de Newton i també la anomenada passa de correcció [60, pàgina 14]. La dimensió

Algorisme 4.1 QIPM: Mètode especialitzat per a problemes amb estructura angular en blocs

Preprocés: detecció i eliminació de restriccions mútues inactives

Avaluar el punt inicial (x, y, z, w)

Mentre no òptim **fer**

- Resoldre (4.16) iterativament usant gradient conjugat preconditionat per obtenir Δy_2
- Resoldre (4.15) usant factorització de Cholesky per obtenir Δy_1
- Obtenir $\Delta x, \Delta z, \Delta w$ usant (4.5b,4.5d,4.5e)
- Calcular la llargada de passa α
- $(x, y, z, w) = (x, y, z, w) + \alpha (\Delta x, \Delta z, \Delta w)$, amb α tal que $x, z, w > 0$
- Si (x, y, z, w) és prou proper a l'òptim **llavors** detectar i eliminar restriccions mútues inactives **Fi_Si**

Fi_Mentre

del sistema (4.16) és l , el nombre de restriccions mútues; si es detecten restriccions mútues inactives, com es va proposar per primer cop en [30], es podrà reduir aquesta dimensió i per tant el nombre d'iteracions de gradient conjugat. L'algorisme QIPM inclou una rutina de desactivació que només actua quan estem a prop de l'òptim, condició que s'estima usant la diferència relativa entre les funcions objectius primal i dual:

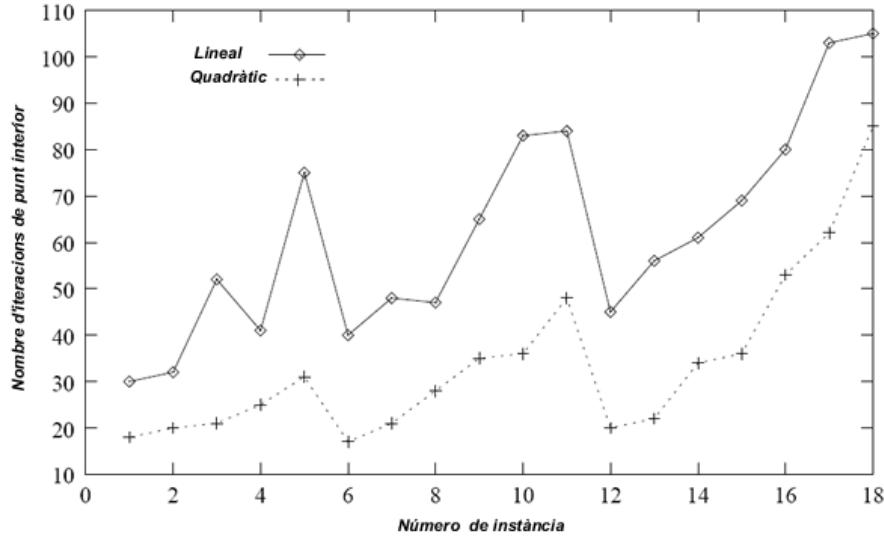
$$\frac{|(c^T x + \frac{1}{2}x^T Qx) - (b^T y - \frac{1}{2}x^T Qx - u^T w)|}{1 + |(c^T x + \frac{1}{2}x^T Qx)|} < 1$$

4.3.3 Efecte dels termes quadràtics

Com s'ha comentat en la introducció, aquesta memòria de tesi ha tingut com a origen l'observació experimental d'un millor comportament computacional dels problemes de fluxos multiarticle en xarxes quan en la seva funció objectiu hi figuren termes quadràtics. Aquest fet es va observar en [12], on es va conjecturar que aquest comportament podia ser degut a un millor comportament del preconditionador (4.17) en els problemes quadràtics.

En la Figura 4.1 es compara el nombre d'iteracions de punt interior de l'Algorisme 4.1 per a algunes instàncies dels problemes Mnetgen [1], un generador de problemes lineals multiarticle; per a cada instància lineal es genera una instància quadràtica afegint el terme

Figura 4.1: Nombre d'iteracions de punt interior (font:[12])



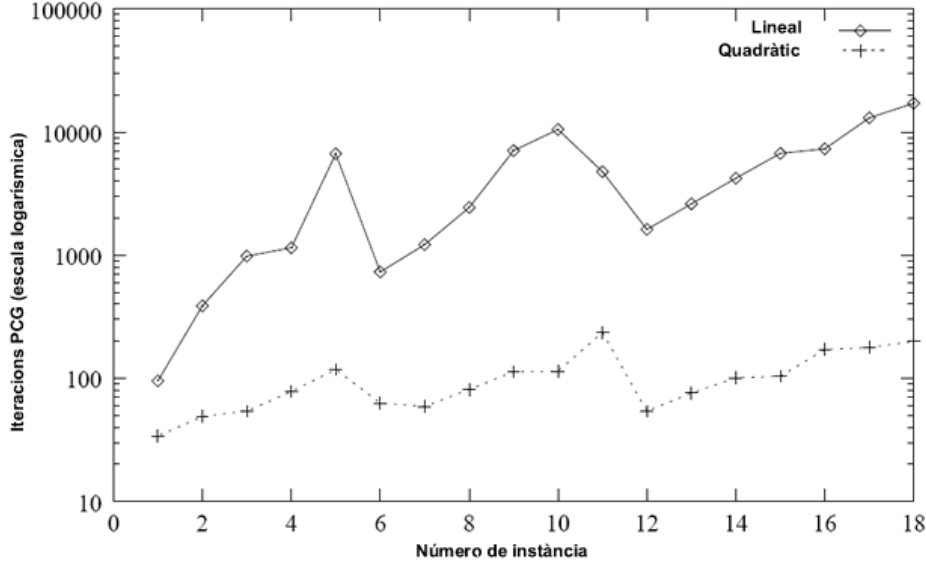
$\sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^n q_j^i (x_j^i)^2$ a la funció objectiu lineal, on els coeficients q_j^i s'obtenen aleatòriament d'una distribució uniforme definida en $[0, C]$ on

$$C = \sqrt{\left| \frac{\sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^n c_j^i}{kn} \right|}.$$

S'observa clarament una disminució del nombre d'iteracions de punt interior en els problemes quadràtics. Usant les mateixes instàncies Mnetgen per mostrar les iteracions de gradient conjugat preconditionat en els casos lineal i quadràtic i aplicant l'escala logarítmica per a les iteracions obtenim la Figura 4.2, on es veu que la millora de comportament del model quadràtic respecte al lineal és molt més significativa .

Això sembla indicar que l'origen d'aquest millor comportament del model quadràtic respecte al lineal està en la resolució del sistema (5.7), i per tant que el preconditionador és més eficient en el cas quadràtic. Precisant més, sabem que la eficiència del preconditionador (4.17) depèn del radi espectral de la matriu $D^{-1} (C^T B^{-1} C)$, el qual provarem a continuació que és menor quan usem models quadràtics.

Figura 4.2: Nombre d'iteracions de PCG per a alguns problemes Mnetgen (font [12])



4.4 Reducció del radi espectral

En la secció 3.2 i següents s'ha realitzat la primera de les aportacions d'aquest treball: la formulació de la regularització quadràtica de la funció de barrera. Ara presentem la segona aportació: explicar formalment el comportament empíric observat mostrant que efectivament els termes quadràtics en la funció objectiu (4.1) redueixen el radi espectral del preconditionador (4.17), confirmant així la conjectura realitzada en [12]. Distingirem diversos casos, començant pel més general.

4.4.1 El cas general $N_i \in \mathbb{R}^{m_i \times n_i}$, $L_i \in \mathbb{R}^{l \times n_i}$

El següent resultat ens proporciona una fita per al radi espectral de $D^{-1}(C^T B^{-1} C)$ per a un problema primal amb estructura angular en blocs, tant si la funció objectiu és lineal com si és quadràtica.

Teorema 4.4.1 *Si sigui A la matriu de restriccions del problema (4.1), de forma que les matrius $N_i \in \mathbb{R}^{m_i \times n_i}$, $i = 1, \dots, k$ siguin de rang complert, i al menys una de les matrius $L_i \in \mathbb{R}^{l \times n_i}$ també ho sigui. Si les matrius B, C, D, Θ són les definides en (4.6), (4.7), (4.8), (4.10), llavors el radi espectral ρ de $D^{-1}(C^T B^{-1} C)$ està afitat per*

$$0 \leq \rho \leq \max_{j \in \{1, \dots, l\}} \frac{\gamma_j}{\left(\frac{u_j}{v_j}\right)^2 \Theta_{0j} + \gamma_j} < 1 \quad (4.18)$$

on u és el vector propi de $D^{-1}(C^T B^{-1} C)$ corresponent al valor propi ρ (o bé un qualsevol

dels corresponents vectors propis, si la multiplicitat de ρ és més gran que 1); $\gamma_j, v_j, 1 \leq j \leq l$ són els valors i vectors propis, respectivament, de la matriu $\sum_{i=1}^k L_i \Theta_i L_i^T$; $V = [v_1, \dots, v_l]$, $v = V^T u$, i abusant de la notació suposem que per a $v_j = 0$, $(u_j/v_j)^2 = +\infty$.

Demostració. Els valors propis λ de $D^{-1}(C^T B^{-1} C)$ verifiquen $D^{-1}(C^T B^{-1} C)u = \lambda u \Leftrightarrow (C^T B^{-1} C)u = \lambda D u$ per algun vector propi u . Usant les definicions (4.6), (4.7), (4.8) de B, C, D obtenim

$$\begin{aligned}
(C^T B^{-1} C)u &= \lambda D u \\
&\Leftrightarrow \\
\left(\sum_{i=1}^k L_i \Theta_i N_i^T (N_i \Theta_i N_i^T)^{-1} N_i \Theta_i L_i^T \right) u &= \lambda \left(\Theta_0 + \sum_{i=1}^k L_i \Theta_i L_i^T \right) u \\
&\Leftrightarrow \\
(1 - \lambda) \left(\Theta_0 + \sum_{i=1}^k L_i \Theta_i L_i^T \right) u &= \left(\Theta_0 + \sum_{i=1}^k L_i \Theta_i L_i^T \right) u - \left(\sum_{i=1}^k L_i \Theta_i N_i^T (N_i \Theta_i N_i^T)^{-1} N_i \Theta_i L_i^T \right) u \\
&\Leftrightarrow \\
(1 - \lambda) u^T \left(\Theta_0 + \sum_{i=1}^k L_i \Theta_i L_i^T \right) u &= u^T \Theta_0 u + \sum_{i=1}^k u^T L_i \Theta_i (L_i^T - N_i^T (N_i \Theta_i N_i^T)^{-1} N_i \Theta_i L_i^T) u \\
&\Leftrightarrow \\
(1 - \lambda) u^T \left(\Theta_0 + \sum_{i=1}^k L_i \Theta_i L_i^T \right) u &= u^T \Theta_0 u + \sum_{i=1}^k u^T L_i \Theta_i^{\frac{1}{2}} \left(I - \Theta_i^{\frac{1}{2}} N_i^T (N_i \Theta_i N_i^T)^{-1} N_i \Theta_i^{\frac{1}{2}} \right) \Theta_i^{\frac{1}{2}} L_i^T u \\
&\Leftrightarrow \\
(1 - \lambda) u^T \left(\Theta_0 + \sum_{i=1}^k L_i \Theta_i L_i^T \right) u &= u^T \Theta_0 u + \sum_{i=1}^k u^T L_i \Theta_i^{\frac{1}{2}} P_i \Theta_i^{\frac{1}{2}} L_i^T u. \tag{4.19}
\end{aligned}$$

En l'última igualtat hem definit $P_i = I - \Theta_i^{\frac{1}{2}} N_i^T (N_i \Theta_i N_i^T)^{-1} N_i \Theta_i^{\frac{1}{2}}$ $i = 1, \dots, k$, que és un operador de projecció ortogonal sobre l'espai nul de $N_i \Theta_i^{1/2}$: notem que P_i verifica

- P_i és idempotent:

$$\begin{aligned}
P_i^2 &= 1_n + \Theta_i^{\frac{1}{2}} N_i^T (N_i \Theta_i N_i^T)^{-1} \{ (N_i \Theta_i N_i^T) (N_i \Theta_i N_i^T)^{-1} \} N_i \Theta_i^{\frac{1}{2}} - 2 \Theta_i^{\frac{1}{2}} N_i^T (N_i \Theta_i N_i^T)^{-1} N_i \Theta_i^{\frac{1}{2}} \\
&= 1_n - \Theta_i^{\frac{1}{2}} N_i^T (N_i \Theta_i N_i^T)^{-1} N_i \Theta_i^{\frac{1}{2}} = P_i
\end{aligned}$$

- Donat un vector $v \in \mathbb{R}^n$ qualsevol, $w = P_i v$ la imatge $N_i \Theta_i^{1/2} w$ és

$$N_i \Theta_i^{\frac{1}{2}} v - \left\{ N_i \Theta_i^{\frac{1}{2}} \Theta_i^{\frac{1}{2}} N_i^T (N_i \Theta_i N_i^T)^{-1} \right\} N_i \Theta_i^{\frac{1}{2}} v = N_i \Theta_i^{\frac{1}{2}} v - 1_n N_i \Theta_i^{\frac{1}{2}} v = 0$$

- P_i és simètric

Com a conseqüència es verifica que $v^T P_i v \geq 0$ per a $v \in \mathbb{R}^n$ qualsevol.

Si definim ara $w^i = \Theta_i^{\frac{1}{2}} L_i^T u$ i usant-ho en (4.19) obtenim

$$1 - \lambda = \frac{u^T \Theta_0 u + \sum_{i=1}^k (w^i)^T P_i w^i}{u^T \left(\Theta_0 + \sum_{i=1}^k L_i \Theta_i L_i^T \right) u} \geq \frac{u^T \Theta_0 u}{u^T \Theta_0 u + u^T \left(\sum_{i=1}^k L_i \Theta_i L_i^T \right) u}$$

En l'última desigualtat hem usat la propietat $w^T P_i w \geq 0$. Aquesta desigualtat equival a

$$\lambda \leq \frac{u^T \left(\sum_{i=1}^k L_i \Theta_i L_i^T \right) u}{u^T \Theta_0 u + u^T \left(\sum_{i=1}^k L_i \Theta_i L_i^T \right) u}. \quad (4.20)$$

$\sum_{i=1}^k L_i \Theta_i L_i^T \in \mathbb{R}^{l \times l}$ és simètrica, Θ_i és definida positiva per (4.10), i com hem suposat que al menys una de les matrius $L_i \in \mathbb{R}^{l \times n_i}$ és de rang complet, també serà definida positiva. Per tant els seus valors propis γ_j , $j = 1, \dots, l$ seran valors reals positius.

Siguin v_j , $j = 1, \dots, l$ els seus corresponents vectors propis, i definim $\Pi = \text{diag}(\gamma_1, \dots, \gamma_l)$, $V = [v_1, \dots, v_l]$, $v = V^T u$, $\mathcal{L} = \{j \in \{1, \dots, l\} : v_j \neq 0\}$, $\mathcal{L}^0 = \{1, \dots, l\} \setminus \mathcal{L}$. Expressant $\sum_{i=1}^k L_i \Theta_i L_i^T = V \Pi V^T$, podem escriure (4.20) com

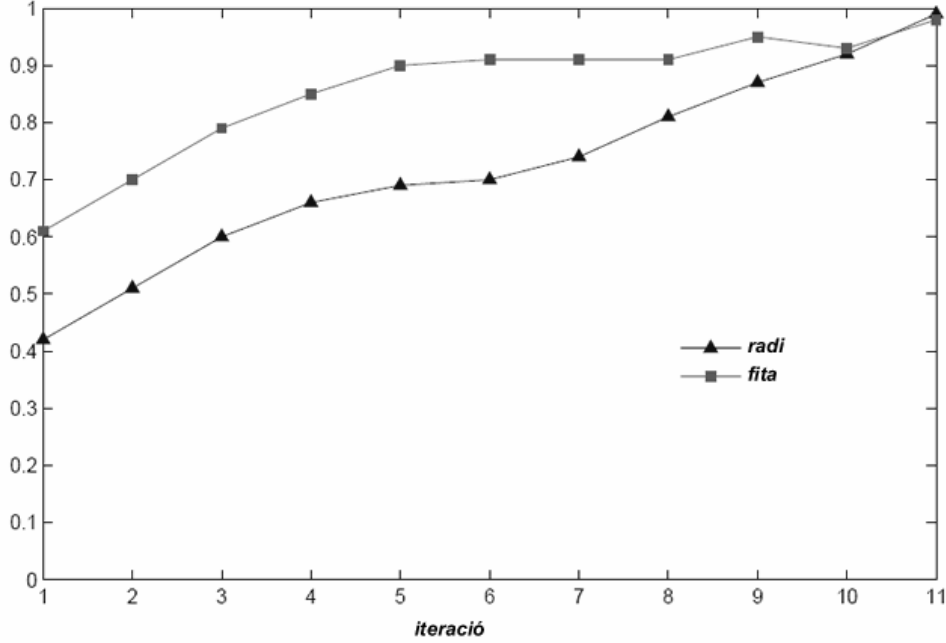
$$\begin{aligned} \lambda &\leq \frac{V \Pi V^T}{u^T \Theta_0 u + V \Pi V^T} = \frac{\sum_{j \in \mathcal{L}} \gamma_j v_j^2}{\sum_{j \in \mathcal{L}} (u_j^2 \Theta_{0j} + \gamma_j v_j^2) + \sum_{j \in \mathcal{L}^0} (u_j^2 \Theta_{0j})} \leq \frac{\sum_{j \in \mathcal{L}} \gamma_j v_j^2}{\sum_{j \in \mathcal{L}} (u_j^2 \Theta_{0j} + \gamma_j v_j^2)} \Leftrightarrow \\ &\lambda \leq \frac{\sum_{j \in \mathcal{L}} \gamma_j v_j^2}{\sum_{j \in \mathcal{L}} \left(\left(\frac{u_j}{v_j} \right)^2 \Theta_{0j} + \gamma_j \right) v_j^2} \end{aligned} \quad (4.21)$$

Usem ara la notació $\alpha_j^2 = \left(\left(\frac{u_j}{v_j} \right)^2 \Theta_{0j} + \gamma_j \right) v_j^2$ per a $j \in \mathcal{L}$ en (4.21) obtenim

$$\lambda \leq \frac{\sum_{j \in \mathcal{L}} \gamma_j v_j^2}{\sum_{j \in \mathcal{L}} \alpha_j^2} = \frac{\sum_{j \in \mathcal{L}} \frac{\gamma_j}{\left(\frac{u_j}{v_j} \right)^2 \Theta_{0j} + \gamma_j} \alpha_j^2}{\sum_{j \in \mathcal{L}} \alpha_j^2} \leq \frac{\sum_{j \in \mathcal{L}} \left(\max_{j \in \mathcal{L}} \frac{\gamma_j}{\left(\frac{u_j}{v_j} \right)^2 \Theta_{0j} + \gamma_j} \right) \alpha_j^2}{\sum_{j \in \mathcal{L}} \alpha_j^2} = \max_{j \in \mathcal{L}} \frac{\gamma_j}{\left(\frac{u_j}{v_j} \right)^2 \Theta_{0j} + \gamma_j} \quad (4.22)$$

Abusant de la notació, considerem que per als índexs $j \in \mathcal{L}^0$ tenim que $\left(\frac{u_j}{v_j} \right)^2 = +\infty$ i

Figura 4.3: Evolució del radi espectral de $D^{-1}(C^T B^{-1}C)$ i de la seva fita (4.18), problema PDS1



$\gamma_j / \left(\left(\frac{u_j}{v_j} \right)^2 \Theta_{0j} + \gamma_j \right) = 0$; com $\lambda \geq 0$ veiem que aquest conjunt d'índexs no proporcionen el màxim, i per tant podem concloure que (4.22) és equivalent a (4.18), tal com volíem provar. \square

La Figura 4.3 mostra l'evolució del radi espectral de $D^{-1}(C^T B^{-1}C)$ i de la fita (4.18) per les 11 primeres iteracions en l'execució de l'algorisme que incorpora regularització quadràtica, descrit en el proper capítol, per al problema PDS1, una instància dels problemes de fluxos multiarticle PDS [10]. S'observa que el radi espectral s'atansa a 1 progressivament, incrementant el nombre d'iteracions de gradient conjugat preconditionat conforme l'algorisme s'atansa a l'òptim. Això és així per que la matriu $\Theta = (Q + X^{-1}Z + (U - X)^{-1}W)^{-1}$ esdevé mal condicionada conforme les iteracions s'atansen a la solució degut a la condició de complementaritat $\mu e - XZe = 0$, i per tant $D^{-1}(C^T B^{-1}C)^{-1}$ també estarà mal condicionada, la qual cosa proporciona valors del radi espectral molt propers a 1.

Usant la fita (4.18) mostrarem a continuació que el radi espectral de $D^{-1}(C^T B^{-1}C)$ considerat com una funció de la matriu $Q = \text{diag}(Q_1, \dots, Q_k)$, $Q_i = \text{diag}(q_i)$, $1 \leq i \leq k$, $q_i \in \mathbb{R}^{n_i}$ dels costos quadràtics de les variables, excloent les folgues, tendeix a 0 quan els elements del vector q_i tendeix a ∞ (abusant de la notació, escriurem: $q_i \rightarrow \infty$).

Taula 4.1: Problema quadràtic angular en blocs de grans dimensions variant $Q = \beta 1_n$

| instància | β | CPLEX-11 | | QIPM | | | f^* |
|------------------|---------|----------|-------|------|-----|-----|-------------|
| | | it | CPU | it | PCG | CPU | |
| CTA-100-100-1000 | 0.01 | 7 | 29939 | 10 | 36 | 66 | -2.6715e+08 |
| CTA-100-100-1000 | 0.1 | 7 | 31328 | 9 | 40 | 61 | -2.6715e+09 |
| CTA-100-100-1000 | 1 | 8 | 33367 | 8 | 38 | 56 | -2.6715e+10 |
| CTA-100-100-1000 | 10 | 9 | 35220 | 7 | 37 | 51 | -2.6715e+11 |

Proposició 4.4.1 *Suposem que es verifiquen les condicions del Teorema 4.4.1. Llavors es verifica que*

$$\lim_{Q_i \rightarrow \infty} \rho = 0, \quad i = 1, \dots, k \quad (4.23)$$

Demostració: *En cada iteració de punt interior les variables (x, z, f, w) són positives i estan afitades superiorment, de forma que existirà un ε , amb $0 < \varepsilon < 1$, tal que per $i = 1, \dots, k$ tindrem $\varepsilon < x_i < 1/\varepsilon$, $\varepsilon < z_i < 1/\varepsilon$, $\varepsilon < f_i < 1/\varepsilon$, $\varepsilon < w_i < 1/\varepsilon$ [29]. Llavors, usant (4.10), $\lim_{q_i \rightarrow \infty} \Theta_i = 0 \Rightarrow \lim_{q_i \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^k L_i \Theta_i L_i^T = 0$, $i = 1, \dots, k$. Els valors propis γ_j , $j = 1, \dots, l$ de $\sum_{i=1}^k L_i \Theta_i L_i^T$ satisfaran $\lim_{q_i \rightarrow \infty} \gamma_j = 0$, $i = 1, \dots, k$, $j = 1, \dots, l$. Usant (4.21), $\Pi = \text{diag}(\gamma_1, \dots, \gamma_l)$, i considerant que els vectors propis u, v_1, \dots, v_l descrits al Teorema 4.4.1 són unitaris, $v = V^T u$ on $V = [v_1, \dots, v_l]$ també serà un vector unitari, llavors obtenim que*

$$\lim_{q_i \rightarrow \infty} \lambda \leq \lim_{q_i \rightarrow \infty} \frac{v^T \Pi v}{u^T \Theta_0 u + v^T \Pi v} = 0$$

Com, pel Teorema 4.4.1, el radi espectral verifica $\rho \in [0, 1)$, podem afirmar que (4.23) efectivament és compleix. \square

La Proposició 4.4.1 ens diu que afegint un terme quadràtic a l'objectiu d'un problema lineal del tipus descrit en la Secció 4.1, per valors q_i , $i = 1, \dots, k$ prou grans, podem atansar el radi espectral de la matriu $D^{-1}(C^T B^{-1} C)$ a zero tot el que vulguem, i per tant obtindrem una millora de qualitat del preconditionador. Això confirma la conjectura que teníem pendent de provar respecte al millor comportament de l'algorisme especialitzat amb problemes quadràtics.

Una altra confirmació experimental la dona la resolució d'un problema multiarticle sense terme lineal en la funció objectiu, és a dir que és quadràtic pur. La Taula 4.1 proporciona els detalls de la resolució de la instància CTA-100-100-1000 d'un conjunt de problemes de protecció estadística de dades [14] utilitzant com a terme quadràtic $\frac{1}{2}x^T(\beta Q)x$, usant $Q = I$ i variant el paràmetre β . La instància CTA-100-100-1000 és molt gran: el problema primal té 10.000.000 de variables i 210.000 restriccions. Les columnes "it" proporcionen el nombre d'iteracions de punt interior, i la columna "PCG" proporciona el nombre total d'iteracions de

gradient conjugat preconditionat que ha necessitat l'algorisme especialitzat. Les columnes "CPU" proporcionen el temps de CPU en segons, usant un servidor Dell PowerEdge 6950 amb quatre processadors Opteron 8222 de doble nucli a 3.0 GHz, sense usar la possibilitat de computació paral·lela. La columna " f^* " proporciona l'objectiu òptim, que és pot veure que és consistent amb el factor d'escala β . La tolerància del mètode PCG ha estat de 10^{-8} per totes les execucions. La Taula 4.1 mostra que el nombre d'iteracions de punt interior en el cas de l'algorisme especialitzat QIPM decreix quan augmentem β , just al contrari del que succeeix amb el solver CPLEX, mentre que les iteracions de PCG no augmenten amb β . La mateixa tendència s'observa en el temps de CPU, mentre que les iteracions de gradient conjugat són independents de β . L'algorisme especialitzat és molt més eficient que CPLEX-11 tant en temps de CPU com en requeriments de memòria: 1.2 Gb de RAM per QIPM, mentre que CPLEX-11 va necessitar 15 Gb. Tant CPLEX-11 com QIPM van arribar a l'òptim en tots els problemes, amb diferències relatives en la funció objectiu de l'ordre de 10^{-11} .

D'altra banda, quan afegim un terme quadràtic a la funció de barrera d'un problema lineal, hem establert en la Secció 3.5.3 que només té sentit usar valors de Q petits per tal de no incrementar excessivament el nombre d'iteracions de punt interior. En la següent proposició mostrarem que, sota certes condicions, la fita (4.18) del radi espectral per un problema lineal es redueix quan afegim costos quadràtics $Q_i = \text{diag}(q_i)$, $i = 1, \dots, k$ a la funció objectiu, fins i tot si els q_i són petits. Una reducció en la fita no implica necessàriament una reducció en el radi espectral, no obstant, donat que tant el radi espectral com la seva fita s'atansen a 1 en les iteracions finals de l'algorisme de punt interior, si la reducció en la fita és prou significativa llavors sí que esperem obtenir una reducció en el radi espectral.

Necessitarem un resultat previ respecte a la reducció dels valors propis de la matriu $\sum_{i=1}^k L_i \Theta_i L_i^T$ quan afegim el terme quadràtic a la funció objectiu lineal, que expressem en forma de lema.

Lema 4.4.1 *Siguin $\hat{\gamma}_j$ i γ_j , $j = 1, \dots, l$ els j -èsims màxims valors propis de $\sum_{i=1}^k L_i \hat{\Theta}_i L_i^T$ i de $\sum_{i=1}^k L_i \Theta_i L_i^T$ respectivament, on Θ està definida en (4.10) i representem per $\hat{\Theta}_i$ el valor de Θ en el cas lineal (és a dir, quan $Q = 0$, en la definició (4.10)). Llavors $\hat{\gamma}_j > \gamma_j$.*

Demostració: Donat que $\Theta_i = (Q_i + F_i^{-1}W_i + X_i^{-1}Z_i)^{-1} > 0$, $\hat{\Theta}_i = (F_i^{-1}W_i + X_i^{-1}Z_i)^{-1} > 0$, $i = 1, \dots, k$, on totes les matrius Q_i, F_i, W_i, X_i, Z_i són diagonals, amb $Q_i > 0$, definim $E_i = Q_i \Theta_i \hat{\Theta}_i > 0$; llavors tindrem que

$$\begin{aligned} \Theta_i + E_i &= \Theta_i \left(I + Q_i \hat{\Theta}_i \right) = \Theta_i \left(\hat{\Theta}_i \hat{\Theta}_i^{-1} + Q_i \hat{\Theta}_i \right) = \Theta_i \hat{\Theta}_i \left(\hat{\Theta}_i^{-1} + Q_i \right) \\ &= \Theta_i \hat{\Theta}_i \left(F_i^{-1}W_i + X_i^{-1}Z_i + Q_i \right) = \Theta_i \hat{\Theta}_i \Theta_i^{-1} = \hat{\Theta}_i. \end{aligned}$$

Per tant

$$\sum_{i=1}^k L_i \hat{\Theta}_i L_i^T = \sum_{i=1}^k L_i \Theta_i L_i^T + \sum_{i=1}^k L_i E_i L_i^T. \quad (4.24)$$

Les tres matrius $\sum_{i=1}^k L_i \hat{\Theta}_i L_i^T$, $\sum_{i=1}^k L_i \Theta_i L_i^T$ i $\sum_{i=1}^k L_i E_i L_i^T$ són definides positives. El teorema mínim de Courant-Fischer (veure, per exemple, [28, Teorema 8.1.2]) estableix que, per una matriu simètrica $M \in \mathbb{R}^{n \times n}$ amb valors propis $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n$, i denotant per S un subespai genèric de \mathbb{R}^n , es verifica que el seu j -èsim valor propi més gran és:

$$\lambda_j = \max_{\dim(S)=j} \min_{0 \neq y \in S} \frac{y^T M y}{y^T y} \quad j = 1, \dots, n. \quad (4.25)$$

Per el cas $M = \sum_{i=1}^k L_i \hat{\Theta}_i L_i^T$ aplicant (4.24) tenim que

$$\frac{y^T M y}{y^T y} = \frac{y^T \left(\sum_{i=1}^k L_i \hat{\Theta}_i L_i^T \right) y}{y^T y} > \frac{y^T \left(\sum_{i=1}^k L_i \Theta_i L_i^T \right) y}{y^T y}$$

Llavors, per (4.25), ha de ser $\hat{\gamma}_j > \gamma_j$ \square .

Ara estem en condicions de provar que els termes quadràtics redueixen la fita (4.18) del radi espectral; tenim la següent proposició.

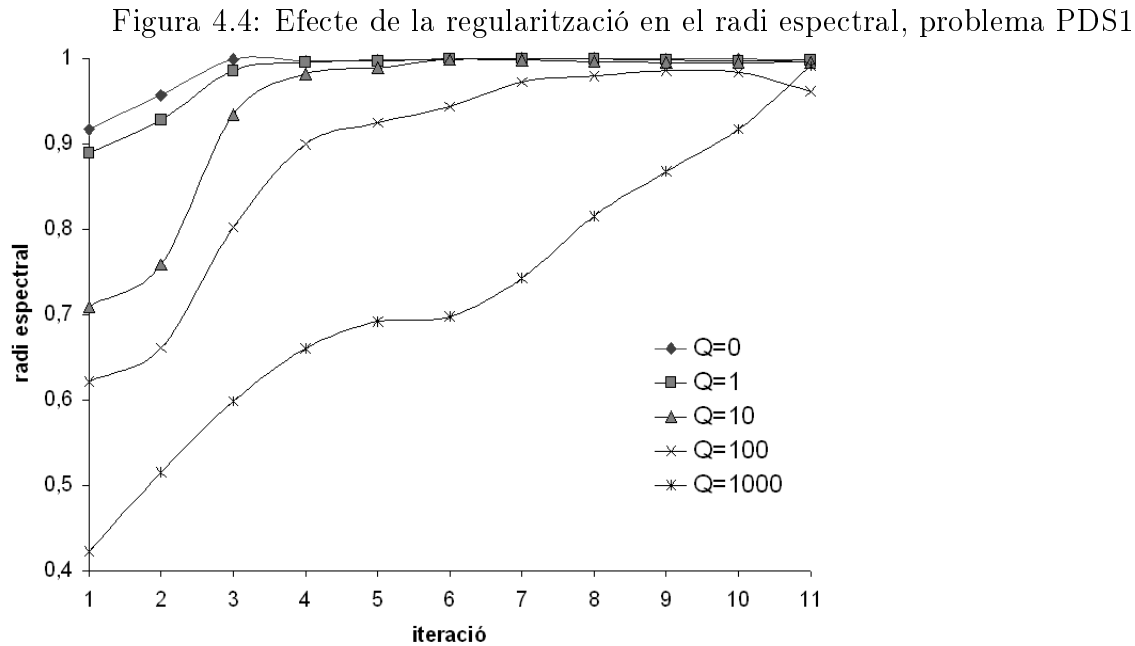
Proposició 4.4.2 *Suposem que es verifiquen les hipòtesis de la Proposició 4.4.1, i considerem un problema lineal i un de quadràtic obtingut afegint costos quadràtics $Q_i > 0$, $i = 1, \dots, k$ a les variables de bloc x^1, \dots, x^k del problema lineal, però no a les variables x^0 de les folgues de les restriccions d'acoblament. Suposem que $\hat{u}_j/\hat{v}_j \leq u_j/v_j$, on les variables amb "barret" simbolitzen les del problema lineal i les que no el porten representen les del problema quadràtic. Llavors la fita (4.18) és més petita per al problema quadràtic que no pas per al lineal.*

Demostració: Per (4.18) la fita del radi espectral ρ de $D^{-1} (C^T B^{-1} C)$ del problema quadràtic és

$$\rho \leq \max_{j \in \{1, \dots, l\}} \frac{\gamma_j}{\left(\frac{u_j}{v_j} \right)^2 \Theta_{0j} + \gamma_j} < 1$$

on γ_j és el j -èsim valor propi de $\sum_{i=1}^k L_i \Theta_i L_i^T$. Nombrent per $\hat{\gamma}_j$ el j -èsim valor propi de $\sum_{i=1}^k L_i \hat{\Theta}_i L_i^T$ corresponent al problema lineal, tenim pel Lema 4.4.2 que $\hat{\gamma}_j = \gamma_j + \varepsilon_j$ per a algun $\varepsilon_j > 0$. Com hem suposat que $\hat{u}_j/\hat{v}_j \leq u_j/v_j$ tindrem

$$\frac{\hat{\gamma}_j}{\left(\frac{\hat{u}_j}{\hat{v}_j} \right)^2 \Theta_{0j} + \hat{\gamma}_j} \geq \frac{\hat{\gamma}_j}{\left(\frac{u_j}{v_j} \right)^2 \Theta_{0j} + \hat{\gamma}_j} = \frac{\gamma_j + \varepsilon_j}{\left(\frac{u_j}{v_j} \right)^2 \Theta_{0j} + \gamma_j + \varepsilon_j} > \frac{\gamma_j}{\left(\frac{u_j}{v_j} \right)^2 \Theta_{0j} + \gamma_j}$$



L'última desigualtat es compleix doncs $\varepsilon_j \left(\frac{u_j}{v_j}\right)^2 \Theta_{0j} > 0$. \square

En la proposició anterior s'ha fet la suposició $\hat{u}_j/\hat{v}_j \leq u_j/v_j$ sense justificar-la; en el cas general no té perquè complir-se, però en les següents seccions veurem que sí que es verifica per a una classe important de problemes. Un altre restricció que s'ha fet ha estat afegir el terme quadràtic a les variables dels blocs, però no a les variables de folga; en la següent secció justificarem aquesta elecció. D'altra banda la proposició estableix que la fita del radi espectral ρ es redueix afegint un terme quadràtic, però no assegura res sobre el radi espectral en sí. Donat que ρ pren valors en l'interval $(0, 1)$, quan s'atansa a 1 una reducció de la fita implica una reducció del radi i per tant millorem el preconditionador, però quan el radi es clarament inferior a 1 no serà cert que qualsevol Q redueixi el radi espectral. Per exemple, considerem un problema fictici que segueix la formulació (4.4) prenent $k = 1$ i sense fites superiors a les variables (i per tant no calen les variables u , f i w)

$$\begin{aligned} \min_{x_1} \quad & c^T x_1 + x_1^T Q_1 x_1 \\ \text{subjecte a} \quad & N x_1 = b_1 \\ & L_1 x_1 + x_0 = b_0 \\ & x_0, x_1 \geq 0 \end{aligned}$$

on les variables i coeficients del problema prenen els següents valors:

$L_1 = I$ (un únic article, $x \in \mathbb{R}^5$)

$x_0 = [4, 65\ 0, 704\ 0, 7206\ 3, 5957\ 3, 8952]^T$ (folgues de les restriccions mútues)

$x_1 = [1, 8289\ 7, 8537\ 0, 2577\ 4, 074\ 9, 0643]^T$ (variables de bloc)

$z_0 = z_1 = [1\ 1\ 1\ 1\ 1]^T$ (variables duals)

$Q = \text{diag}([1, 108\ 0, 0111\ 1, 747\ 0, 0122\ 0, 0182])$, (terme de regularització)

$N_1 = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 1 & 5 \\ 2 & 4 & 8 & 8 & 32 \end{bmatrix}$ (no és una matriu arc-node de xarxa, però sí te rang complet per files).

Els valors que proporcionem no es donaran mai en un problema real: les folgues de les restriccions d'acoblament no són necessàries doncs només tenim un únic article; només serveixen per confirmar el que estem dient sobre el radi espectral. Si anomenem Q_1 al terme de regularització de les variables de bloc i Q_0 al de les variables de folga, el radi espectral ρ de $D^{-1}(C^T B^{-1} C)$ resulta ser $\rho = 0,8484$ quan $Q_1 = Q_0 = 0$, mentre que per $Q_1 = Q_0 = Q$ obtenim $\rho = 0,8736$ i per $Q_1 = Q, Q_0 = 0$ resulta $\rho = 0,8632$. En els problemes reals, no obstant, hem observat que, fins i tot quan el radi és lluny de 1, afegir un terme quadràtic pot reduir el radi ρ , com s'observa en la Figura 4.4, que mostra l'evolució del radi espectral per a les primeres 11 iteracions de la versió regularitzada del problema multiarticle PDS1 utilitzant diferents matrius inicials Q . El valor $Q = 0$ correspon al problema lineal estàndard PDS1.

4.4.2 El cas de fites superiors generalitzades (GUB)

4.4.2.1 Definició de fites GUB

Sovint els problemes lineals presenten un conjunt de restriccions generals i un altre conjunt de restriccions que són fites superiors per a unes sumes parcials de les variables, de forma que cada variable apareix en com a molt una d'aquestes sumes parcials. Aquestes sumes parcials afitades s'anomenen fites superiors generalitzades (*GUB: Generalized Upper Bounds*, veure, per exemple, [21, capítol 9]). En la pràctica, les restriccions GUB són molt més nombroses que la resta de restriccions. Anem a definir de forma més precisa aquestes restriccions per després poder-les relacionar amb la regularització de problemes angulars en bloc.

Considerem un problema lineal amb $m + p$ restriccions d'igualtat amb les següents propietats:

1. Cada variable té com a molt un coeficient no nul en les últimes p restriccions.
2. Tots aquests coeficients no nuls són positius.
3. Els últims p termes constants (termes a la dreta) són positius.

Podem escalar les variables de forma que tots els coeficients en les últimes p equacions i també tots els termes constants siguin 1. Aquesta és la forma estàndard de les restriccions GUB.

A més a més si algunes de les últimes p restriccions són desigualtats les podem convertir en igualtats introduint variables de folga.

Definició 4.4.1 *Conjunt de fites superiors generalitzades (conjunt GUB, Generalized Upper Bounds):* Per $i = 1, \dots, p$, sigui S_i el i -èsim conjunt GUB, això és, el conjunt d'índexs de les variables amb un coeficient igual a 1 en la fila $(m + i)$. Siguí S_0 el conjunt d'índexs que corresponen a les variables que només tenen coeficients nuls en les files $m + 1$ fins $m + p$. Aquestes definicions impliquen que cada índex j de variable pertany a un i només un conjunt S_i per $i = 0, 1, \dots, p$.

Un problema lineal amb fites superiors generalitzades es pot expressar com:

$$\begin{aligned} \min_x \quad & \sum_{j \in S_0} c_j x_j + \sum_{i=1}^p \sum_{j \in S_i} c_j x_j \\ \text{subjecte a} \quad & \sum_{j \in S_0} \begin{bmatrix} A_{\cdot j} \\ 0 \end{bmatrix} x_j + \sum_{i=1}^p \sum_{j \in S_i} \begin{bmatrix} A_{\cdot j} \\ e_i \end{bmatrix} x_j = \begin{bmatrix} b \\ e \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (4.26)$$

$$x \geq 0 \quad (4.27)$$

on e_i $i = 1, \dots, p$ són vectors de la mateixa dimensió que x , que té un 1 en la posició i i zeros en la resta, $b = (b_1, b_2, \dots, b_m)^T$, i $e = (1, \dots, 1)^T$. La notació $\sum_j A_{\cdot j}$ indica que el sumatori es realitza variant j per totes les files de la matriu A .

4.4.2.2 Fites GUB i problemes amb estructura angular en blocs

Si permetem que en (4.26) els coeficients en les últimes p equacions i els termes constants siguin diferents d'1, és a dir, substituint els vectors e_i i e per altres més generals ω_i i b_0 que representen la ponderació amb pesos de les p igualtats, obtenim la formulació que anomenem de fites GUB ponderades (*weighted GUB*):

$$\sum_{j \in S_0} \begin{bmatrix} A_{\cdot j} \\ 0 \end{bmatrix} x_j + \sum_{i=1}^p \sum_{j \in S_i} \begin{bmatrix} A_{\cdot j} \\ \omega_i \end{bmatrix} x_j = \begin{bmatrix} b \\ b^0 \end{bmatrix}. \quad (4.28)$$

Considerem ara el cas particular del problema primal amb estructura angular en blocs (4.1) en el qual les matrius L_i , $i = 1, \dots, k$ són matrius diagonals quadrades semi definides positives en $\mathbb{R}^{n \times n}$, totes amb el mateix nombre de columnes, i per tant tenim $n_i = n = l$, $i = 1, \dots, k$. Llavors identificant el nombre p de igualtats de (4.28) amb k , i les matrius $\Omega_i = \text{diag}(\omega_i) = L_i$, les restriccions d'acoblament de (4.1) es corresponen amb la formulació de les restriccions de fita superior generalitzades ponderades (4.28). Si addicionalment fem que $L_i = I$, $i = 1, \dots, k$, les restriccions d'acoblament esdevenen $\sum_{i=1}^k x^i \leq b^0$, la formulació (4.1) representa a la important classe de problemes d'optimització de fluxos multiarticle en

xarxes, que al seu torn coincideix amb l'estructura de les fites superiors generalitzades en la seva versió estàndard (4.26).

4.4.2.3 Reducció del radi espectral en les fites GUB

Si L_i és diagonal, llavors $\sum_{i=1}^k L_i \Theta_i L_i^T$ també ho serà, i els seus valors propis seran $\gamma_j = \sum_{i=1}^k \Theta_{ij} W_{ij}^2$, amb vectors propis $v_j = e_j$, $j = 1, \dots, n$ i $V = [v_1, \dots, v_n] = 1_n$. Llavors $v = V^T u = u$, la relació u_j/v_j serà igual a 1 per tot $j = 1, \dots, n$ i la fita (4.18) pren una forma més simple:

$$\rho \leq \max_{j \in \{1, \dots, l\}} \frac{\sum_{i=1}^k \Theta_{ij} L_{ij}^2}{\Theta_{0j} + \sum_{i=1}^k \Theta_{ij} L_{ij}^2} < 1 \quad (4.29)$$

A més la suposició $\hat{u}_j/\hat{v}_j \leq u_j/v_j$ de la proposició (4.4.2) es complirà sempre, doncs ara es redueix a $\hat{u}_j/\hat{v}_j = u_j/v_j = 1$. Per tant la fita (4.29) es redueix quan afegim un terme quadràtic $Q_i > 0$, $i = 1, \dots, k$ a un problema lineal, fins i tot si Q és petita. En el cas de que les restriccions amb fites superiors generalitzades afectin només a algunes variables $i \in \mathcal{L} \subseteq \{1, \dots, n\}$, només caldrà definir $L_{ij} = 0$ per a tot $j \in \mathcal{L}$ per tal de que (4.29) continuï essent vàlida.

4.4.3 El cas de fluxos multiarticle

Si considerem ara el cas de restriccions GUB estàndard, $L_i = I$, $i = 1, \dots, k$, la fita (4.29) queda reduïda a

$$\rho \leq \max_{j \in \{1, \dots, l\}} \frac{\sum_{i=1}^k \Theta_{ij}}{\Theta_{0j} + \sum_{i=1}^k \Theta_{ij}} < 1 \quad (4.30)$$

Si addicionalment fem $N_i = N \in \mathbb{R}^{m \times n}$ on N és la matriu d'incidència arc-node d'un graf, llavors obtenim un problema de fluxos multiarticle; en particular, les restriccions d'acoblament de (4.1) representen les restriccions de capacitat mútua dels articles. En aquest cas típic, la mateixa topologia de xarxa és compartida per tots els articles.

4.4.3.1 Regularització de les variables de folga

En la Proposició 4.4.2 hem restringit a les variables de bloc l'ús de la regularització. En aquest apartat estudiem l'efecte de la regularització de les variables de les folgues de les restriccions d'acoblament.

Suposem que $j \in \{1, \dots, l\}$ és l'índex tal que proporciona el màxim en (4.30). Els components de la matriu Θ_{ij} , $i = 0, \dots, k$ són

$$\Theta_{ij} = \frac{1}{Q_{ij} + X_{ij}^{-1}Z_{ij}} \quad (4.31)$$

En el cas no regularitzat, $Q_{ij} = 0$. Suposem que afegim un terme quadràtic constant $Q_{ij} = \delta$. Com el radi espectral ρ d'una matriu és una funció contínua dels seus components, podem definir la funció $\rho(\delta)$ i, fixant j en (4.30), la fita superior del radi espectral també serà una funció contínua de δ

$$f(\delta) = \frac{\sum_{i=1}^k \frac{1}{\delta+t_i}}{\frac{1}{\delta+t_0} + \sum_{i=1}^k \frac{1}{\delta+t_i}} \quad (4.32)$$

on $t_i = X_{ij}^{-1}Z_{ij}$, $i = 0, \dots, k$.

Per estudiar la variació de la fita del radi espectral amb la regularització, fem la derivada de la funció $f(\delta)$ per obtenir

$$f'(\delta) = \frac{\frac{1}{(\delta+t_0)^2} \sum_{i=1}^k \frac{(t_i-t_0)}{(\delta+t_i)^2}}{\left(\frac{1}{\delta+t_0} + \sum_{i=1}^k \frac{1}{\delta+t_i}\right)^2}. \quad (4.33)$$

Si considerem el cas trivial $k = 1$ l'expressió (4.33) ens diu que $f'(\delta) < 0$ quan $t_0 > t_1$, i llavors podem obtenir una reducció del radi espectral quan afegim el terme de regularització quadràtica. En canvi si $t_0 < t_1$ la fita augmenta, i podem esperar que també ho faci el radi espectral. Per últim, si $t_0 = t_1$ no obtindrem cap resultat en regularitzar.

Considerem ara la regularització de només les variables corresponents als blocs, excloent les variables de folga. La fita superior ara vindrà donada per

$$f_0(\delta) = \frac{\sum_{i=1}^k \frac{1}{\delta+t_i}}{\frac{1}{t_0} + \sum_{i=1}^k \frac{1}{\delta+t_i}}. \quad (4.34)$$

Procedim com abans, la derivada de $f_0(\delta)$ és

$$f'_0(\delta) = \frac{\frac{-1}{t_0} \sum_{i=1}^k \frac{1}{(\delta+t_i)^2}}{\left(\frac{1}{t_0} + \sum_{i=1}^k \frac{1}{\delta+t_i}\right)^2}. \quad (4.35)$$

Veiem que l'expressió (4.35) és sempre negativa per qualsevol valor δ i per tant $f_0(\delta)$ és una funció decreixent. Això serà cert no només per la component j -èsima associada amb el màxim de (4.30) sinó per a totes les components. Per tant, si no regularitzem les variables de folga sempre obtindrem una reducció del radi espectral, mentre que si regularitzem totes les variables la fita només es reduirà en certes condicions particulars.

D'altra banda si regularitzem només les variables de folga, excloent les variables dels blocs, obtindrem una fita superior com ara

$$f_1(\delta) = \frac{\sum_{i=1}^k \frac{1}{t_i}}{\frac{1}{\delta+t_0} + \sum_{i=1}^k \frac{1}{t_i}} \quad (4.36)$$

que té per derivada

$$f_0'(\delta) = \frac{\sum_{i=1}^k \frac{1}{t_i}}{\frac{1}{(\delta+t_0)^2} \left(\frac{1}{\delta+t_0} + \sum_{i=1}^k \frac{1}{t_i} \right)^2} > 0 \quad (4.37)$$

resultant en un creixement de la fita superior per qualsevol valor del paràmetre δ . Com a conclusió veiem que l'opció més segura, en quan a la reducció de la fita (4.30), és només regularitzar les variables de bloc i no les variables de folga. Aquesta afirmació tindrà una confirmació experimental en el proper capítol.

4.4.4 El cas amb $N \in \mathbb{R}^{n \times n}$

Quan la matriu de xarxa és quadrada i no singular i per tant invertible, i les L_i $i = 1, \dots, k$ són diagonals, llavors (4.29) proporciona el valor exacte del radi espectral en comptes de només una fita. En efecte,

$$\begin{aligned} D^{-1}(C^T B^{-1} C) &= \left(\Theta_0 + \sum_{i=1}^k L_i \Theta_i L_i^T \right)^{-1} \left(\sum_{i=1}^k L_i \Theta_i N_i^T (N_i \Theta_i N_i^T)^{-1} N_i \Theta_i L_i^T \right) \\ &= \left(\Theta_0 + \sum_{i=1}^k L_i \Theta_i L_i^T \right)^{-1} \left(\sum_{i=1}^k L_i \Theta_i L_i^T \right). \end{aligned}$$

Per tant $D^{-1}(C^T B^{-1} C)$ és una matriu diagonal amb component j -èsima

$$\left(\Theta_{0j} + \sum_{i=1}^k \Theta_{ij} L_{ij}^2 \right)^{-1} \left(\sum_{i=1}^k \Theta_{ij} L_{ij}^2 \right) < 1,$$

i el radi espectral serà

$$\rho = \max_{j \in \{1, \dots, n\}} \frac{\sum_{i=1}^k \Theta_{ij} L_{ij}^2}{\Theta_{0j} + \sum_{i=1}^k \Theta_{ij} L_{ij}^2} < 1.$$

Malgrat aquest resultat no és de interès pràctic, doncs els problemes amb matrius de restriccions quadrades només tenen un únic punt factible i no són problemes reals, com a cas límit sí és interessant veure que la fita (4.29) esdevé un valor exacte.

4.5 Regularitzacions proximal i quadràtica

En la Secció 3.2.1 ja s'ha dit que, en el cas general de programació lineal, l'única diferència en les equacions KKT d'optimalitat per a les barreres estàndard, de regularització proximal i de regularització quadràtica està en les infactibilitats duals. En el cas actual de problemes angulars en blocs això és manté: la matriu Θ definida en (4.10) pren els següents valors per les barreres estàndard, amb regularització proximal i amb regularització quadràtica, respectivament:

$$\Theta = ((U - X)^{-1}W + X^{-1}Z)^{-1}, \quad (4.38)$$

$$\Theta_P = (Q_P + (U - X)^{-1}W + X^{-1}Z)^{-1}, \quad (4.39)$$

$$\Theta_Q = (\mu Q + (U - X)^{-1}W + X^{-1}Z). \quad (4.40)$$

on el terme de regularització quadràtica proximal és $Q_P = \mu Q$ i per tant $\Theta_P = \Theta_Q = (\mu Q + (U - X)^{-1}W + X^{-1}Z)$. Malgrat l'algorisme de punt proximal no necessita el paràmetre μ per assegurar l'aproximació successiva del problema regularitzat quadràtic al lineal, s'ha decidit incloure'l per tal de comparar els comportaments dels algorismes de regularització quadràtica i de regularització quadràtica proximal en les mateixes condicions. D'altra banda l'àlgebra del mètode de punt interior és la mateixa en les tres variants. L'Algorisme 4.2 mostra l'esquema de procés que usen tots dos mètodes, el de regularització proximal i el de regularització quadràtica.

Algorisme 4.2 RIPM: Mètode especialitzat regularitzat per a problemes lineals amb estructura angular en blocs

Paràmetres: precisió de la rutina de gradient conjugat: pgtol ; factor d'escalat: δ ; vector de regularització: q

Preprocés: detecció i eliminació de restriccions mútues inactives

- obtenir un punt inicial interior primal-dual $p_0 = (x^{(0)}, y^{(0)}, z^{(0)}, w^{(0)})$
- calcular el paràmetre de barrera inicial μ_0
- inicialitzar la matriu de regularització $Q^{(0)} = (\delta/\mu_0) \text{diag}(q)$
- $k = 0$

Mentre (p_k no sigui òptim) **fer**

- $k = k + 1$; $Q^{(k)} = \mu_k Q^{(0)}$
- Resoldre (4.16) usant gradient conjugat preconditionat amb precisió pgtol per obtenir Δy_2
- Resoldre (4.15) usant factorització de Cholesky per obtenir Δy_1
- Obtenir $\Delta x, \Delta z, \Delta w$ usant (4.5b,4.5d,4.5e)
- actualitzar $p_k = p_{k-1} + d_k$, amb $d_k = (\Delta x, \Delta y, \Delta z, \Delta w)$
- Si p_k és prou proper a l'òptim **llavors** detectar i eliminar restriccions mútues inactives **Fi_Si**
- actualitzar el paràmetre de barrera μ_k

Fi_Mentre

Capítol 5

Experiència computacional amb problemes angular en blocs

En aquest capítol aplicarem el mètode de regularització quadràtica de la barrera logarítmica en un algorisme de punt interior especialitzat per resoldre problemes d'optimització amb estructura angular en blocs, tal com s'han descrit en la Secció 4.1. A diferència del capítol anterior aquest té un fort caràcter empíric, que ens permetrà la confirmació experimental de la teoria exposada. Es resolen problemes lineals dintre de les categories de fluxos multiarticle, de congestió mínima en una xarxa de transport (o equivalentment, de màxim flux concurrent) i de fluxos multiarticle no orientats. Per a cada família de problemes usarem les dues regularitzacions que hem presentat en aquesta memòria: la regularització quadràtica presentada en la secció 3.2 i la de punt proximal de la Secció 3.2.1, comparant els resultats amb els proporcionats per la versió no regularitzada de l'algorisme. La regularització de punt proximal, tal com ja s'ha esmentat en la Secció 3.6 on regularitzàvem els problemes lineals generals, s'utilitza només amb l'objectiu de comparar les prestacions de les dues regularitzacions. El capítol s'estructura de la següent forma: per a cada cada família de problemes donem la seva formulació i aplicacions principals, detallem les instàncies dels problemes que usarem per fer les proves computacionals, expliquem la implementació de l'algorisme de punt interior usat per l'optimització prestant especial atenció als seus paràmetres configurables i valorem els resultats obtinguts.

5.1 Problemes lineals de xarxes multiarticle

Els problemes d'optimització de fluxos multiarticle són una generalització del problema clàssic de fluxos en xarxes en els que k productes independents entre sí (els articles) comparteixen un mateix canal de transmissió (la xarxa) amb unes limitacions de capacitats de transmissió, de forma que cal trobar l'enrutament òptim de tots els fluxos a mínim cost. En el model clàs-

sic, se suposa que per a cada article, el flux es pot enviar per qualsevol ruta de la xarxa des del seu origen fins la destinació. Entre els camps on els models de fluxos multiarticle han estat aplicats amb èxit trobem el de la planificació d'operacions i les telecomunicacions. Dintre del primer tipus trobem problemes com ara els denominats problemes PDS (Patient Distribution System) [10], que són problemes lineals desenvolupats durant els anys 80 i consisteixen en un model logístic per a l'evacuació de pacients d'una zona amb un conflicte militar. També tenim els problemes d'assignació de serveis a un conjunt de vols d'una companyia aèria [48] o els d'assignació de personal a ferrocarrils [58], que són problemes d'optimització entera. En el camp de telecomunicacions els problemes de xarxes són fortament multiarticle: cada article representa el conjunt de missatges (dades o veu) que han de ser enviats entre cada parell de nodes emissor/receptor, i per tant el nombre d'articles acostuma a ser molt elevat.

Per realitzar les proves computacionals hem usat quatre tipus de problemes: els esmentats PDS, els problemes Mnetgen, els Tripart i els Gridgen. Els problemes Mnetgen s'han obtingut a partir de la versió d'en A. Frangioni [13] del generador Mnetgen (Ali i Kennington [1]), que es pot obtenir de <http://www.di.unipi.it/di/groups/optimize/Data/MMCF.html>. En aquestes instàncies la ràtio nombre d'arcs/nombre de nodes és de 8, el 80% dels arcs tenen capacitats mútues, un 30% dels arcs tenen costos associats elevats i un 90% dels arcs tenen capacitats individuals per a cada article.

El darrer conjunt es compon dels problemes Tripart i del problema Gridgen1. Aquestes instàncies s'han obtingut amb el generador Tripartite, i amb una variant per a fluxos multiarticle del generador Gridgen. Aquests generadors van ser dissenyats per produir instàncies multiarticle difícils de resoldre per usar-les en algorismes d'aproximació [7]. L'estructura d'aquestes instàncies és similar a la dels problemes de telecomunicacions del món real: tenen un node origen i un de destí per article. Són problemes que estan considerats com difícils o molt difícils [13]. Es poden obtenir de http://www-eio.upc.es/~jcastro/mmcent_data.html. Els problemes Gridgen (Y. Lee and J. Orlin) són problemes de transport uniarticle en una xarxa amb mínim cost; les versions multiarticle s'han obtingut a partir del meta-generador Dimacs2pprn [17], el qual transforma el problema original en un altre multiarticle.

5.1.1 Instàncies dels problemes

La Taula 5.1 mostra les següents característiques del problemes usats en les proves computacionals: k és el nombre d'articles, m' i n' són el nombre de nodes i d'arcs de la xarxa respectivament, n i m són el nombre de variables i de restriccions, f^* és l'òptim de la funció objectiu, i les tres últimes columnes mostren el nombre d'iteracions de punt interior (*it*), d'iteracions de gradient conjugat preconditionat (*PCG*) i el temps total de procés (*CPU*) quan resolem els problemes usant l'Algorisme 4.1.

Taula 5.1: Característiques del problemes multiarticle

| Instància | k | m' | n' | n | m | f^* | QIPM | | |
|------------|-----|------|-------|--------|--------|----------|------|-------|------|
| | | | | | | | it. | PCG | CPU |
| pds1 | 11 | 126 | 372 | 4464 | 1758 | 2.908e10 | 41 | 513 | 0.09 |
| pds5 | 11 | 686 | 2325 | 27900 | 9871 | 2.805e10 | 62 | 1093 | 1.66 |
| pds10 | 11 | 1399 | 4792 | 57504 | 20181 | 2.673e10 | 78 | 1647 | 7.25 |
| pds15 | 11 | 2125 | 7756 | 93072 | 31131 | 2.518e10 | 90 | 2696 | 21.9 |
| pds20 | 11 | 2857 | 10858 | 130296 | 42285 | 2.832e10 | 107 | 4718 | 56.5 |
| pds25 | 11 | 3554 | 13580 | 162960 | 52674 | 2.262e10 | 114 | 3648 | 74.6 |
| pds30 | 11 | 4223 | 16148 | 193776 | 62601 | 2.139e10 | 119 | 4063 | 111 |
| 32-32-12 | 32 | 32 | 486 | 16038 | 1510 | 8.056e5 | 39 | 1300 | 0.44 |
| 64-64-12 | 64 | 64 | 511 | 33215 | 4607 | 4.624e6 | 54 | 1118 | 1.49 |
| 128-64-12 | 64 | 128 | 1171 | 76115 | 9363 | 1.927e7 | 79 | 4048 | 13.2 |
| 256-64-12 | 256 | 64 | 2320 | 150190 | 18030 | 9.2250e7 | 131 | 87698 | 617 |
| 256-256-12 | 256 | 256 | 2204 | 566428 | 67740 | 3.979e8 | 119 | 4758 | 164 |
| tripart1 | 16 | 192 | 2096 | 35632 | 5168 | 6.348e7 | 58 | 1976 | 1.7 |
| tripart2 | 16 | 768 | 8432 | 143344 | 20720 | 3.870e8 | 87 | 4092 | 17.3 |
| tripart3 | 20 | 1200 | 16380 | 343980 | 40380 | 2.694e8 | 90 | 6978 | 62.4 |
| tripart4 | 35 | 1050 | 24815 | 893340 | 61565 | 1.775e7 | 133 | 14660 | 265 |
| gridgen1 | 320 | 1025 | 3072 | 986112 | 331072 | 622e12 | 242 | 96877 | 7400 |

5.1.2 Formulació

En formular aquests problemes cal assignar variables per als fluxos de cada article, de forma que el nombre total de variables queda multiplicat pel nombre d'articles que tractem. La formulació d'un problema lineal de fluxos multiarticle considerant una xarxa de m nodes, n arcs i k articles és:

$$\min \sum_{i=1}^k (c^i)^T x^i \quad (5.1a)$$

$$\text{subjecte a } \begin{bmatrix} N & & & & 0 \\ & N & & & 0 \\ & & \ddots & & \vdots \\ & & & N & 0 \\ I & I & I & I & I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x^1 \\ x^2 \\ \vdots \\ x^k \\ x^0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b^1 \\ b^2 \\ \vdots \\ b^k \\ b^0 \end{bmatrix} \quad (5.1b)$$

$$0 \leq x^i \leq u^i \quad i = 0, \dots, k \quad (5.1c)$$

on els vectors x^i , $i = 1, \dots, k$ representen els fluxos per a cada article mentre que x^0

són les folgues de les restriccions de capacitat mútua. $N \in \mathbb{R}^{m \times n}$ és la matriu arc-node del graf dirigit que representa la xarxa, que considerem de rang complert, i I representa la matriu identitat en $\mathbb{R}^{n \times n}$, c^i i u^i són vectors en \mathbb{R}^n que representen respectivament els costos i les capacitats dels arcs per a cada article. Finalment, els vectors $b^i \in \mathbb{R}^m$ representen les injeccions o extraccions de cada article en cada node de la xarxa, mentre que la restricció expressada per l'última equació (5.1b) és la que imposa que la suma de fluxos de tots els articles no sobrepassi la capacitat de l'arc: $\sum_{i=1}^k x^i + x^0 = b^0$, $x^0 \geq 0 \Rightarrow \sum_{i=1}^k x^i \leq b^0$.

La formulació (5.1b) coincideix amb la (4.1) donada en la secció 4.1, quan fem $Q_i = 0$, $i = 1, \dots, k$ (fluxos lineals), $N_1 = N_2 = \dots = N_k = N$ i $L_1 = L_2 = \dots = L_k = I$.

5.1.3 Descripció de la implementació usada

Com a punt de partida s'ha pres la implementació de l'Algorisme 4.1 de punt interior especialitzat per problemes de flux multiarticle quadràtics descrita en [11, 12], que anomenem QIPM. A partir d'aquesta implementació s'han preparat dues versions: RIPM, que aplica la regularització quadràtica, i PIPM que aplica la regularització proximal. Estan escrites principalment en C, amb l'única excepció de les rutines de factorització de Cholesky que estan en Fortran. Els paràmetres que s'han tingut en compte en les proves computacionals han estat tres:

1. el valor de la matriu de regularització, que sempre pren la forma d'una matriu diagonal definida positiva $Q^{(k)} = \mu_k (\delta/\mu_0) \text{diag}(q)$, on $k = 0, 1, \dots$ és el comptador d'iteracions, $\text{diag}(q)$ representa la matriu diagonal formada prenent els elements del vector $q \in \mathbb{R}_+^{kn+n}$
2. la precisió per a la rutina de gradient conjugat, que anomenem *pcgtol*
3. el nombre de termes del preconditionador (4.17), que anomenem *m_pw_prec*.

Aquest últim paràmetre *m_pw_prec*, explicat en la Secció 4.3.2, pren per defecte el valor zero, i només l'hem variat quan l'algorisme ha tingut problemes de convergència. El valor de la matriu de regularització $Q^{(k)}$ és el paràmetre que més influència té en els resultats, i depèn a la seva vegada dels dos paràmetres δ (factor d'escalat) i q (vector de regularització). Degut al desconeixement de quins valors poden ser els millors per $Q^{(k)}$, triem valors heurístics pel vector q , i usem el factor d'escalat δ per ajustar empíricament la seva magnitud, el qual hem vist en la Secció 3.5.3 que no ha de ser massa gran per tal d'evitar un increment excessiu del nombre d'iteracions de punt interior. Per aquest motiu en les proves computacionals per a cada possible elecció del vector q s'ha variat el paràmetre δ en un rang ampli de valors, no només per trobar el millor valor sinó també per verificar els resultats teòrics: esperem que per a valors de δ propers a zero l'algorisme regularitzat es comporti igual que el no regularitzat, mentre que per a valors creixents de δ l'eficiència de l'algorisme ha d'empitjorar

progressivament. Veurem en les següents seccions que efectivament es verifica aquesta predicció. En RIPM i en PIPM es dona valor a Q després d'obtenir el punt inicial p_0 , i per tant en el seu càlcul no s'utilitza la regularització; això assegura que el punt inicial obtingut serà el mateix que en l'algorisme no regularitzat. L'experiència ha mostrat que aquesta elecció és la més eficient. D'altra banda el paràmetre de tolerància $pcgtol$ de la rutina de gradient conjugat preconditionat (PCG) determina la precisió requerida per resoldre el sistema (5.7) i per tant afecta al nombre d'iteracions de PCG requerides. Donar valors baixos a aquest paràmetre resulta en un menor nombre d'iteracions PCG, però també proporciona solucions menys acurades que poden augmentar el nombre requerit d'iteracions de punt interior per arribar a l'òptim. En canvi valors alts del paràmetre $pcgtol$ proporcionen solucions més acurades i per tant probablement necessitem menys iteracions de punt interior però a canvi la rutina PCG farà més iteracions. En la pràctica per a quasi bé tots els problemes resolts el valor que es pren per defecte en la versió no regularitzada QIPM, $pcgtol = 10^{-2}$, és el que ha donat millors resultats, reservant el valors més exactes $pcgtol < 10^{-2}$ només en aquells casos en que la convergència de l'algorisme ho ha necessitat. A continuació expliquem quins han estat els valors triats pel vector q de regularització i quina és la idea que ens ha motivat a usar-los.

5.1.3.1 Eleccions de la matriu de regularització

La primera elecció és la més simple: fer que q sigui el vector unitat $(1, \dots, 1)^T$; la motivació ha estat comparar els resultats obtinguts amb les altres eleccions que usen algun tipus d'heurística.

La segona elecció ve donada per l'estructura de la matriu Θ definida en (2.45):

$$\Theta = (Q + X^{-1}Z + (U - X)^{-1}W)^{-1}. \quad (5.2)$$

La idea ha estat donar al terme Q una magnitud semblant a la resta de termes de la matriu Θ , això és: $Q \approx X^{-1}Z + (U - X)^{-1}W$, llavors l'elecció del vector q depèn dels valors inicials de les variables x, z, u, w : $q_i = z_i^{(0)}/x_i^{(0)} + w_i^{(0)}/(u_i - x_i^{(0)})$.

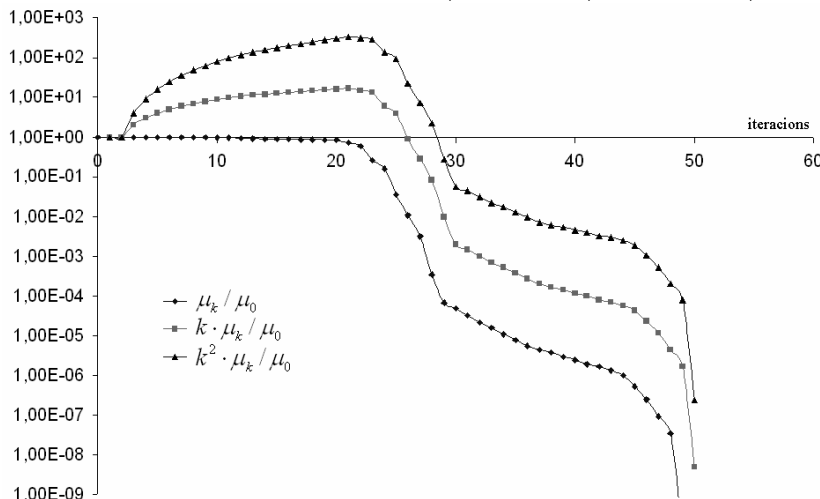
Un altre elecció ha estat prendre el valor invers de l'elecció anterior, sense tenir en compte les fites u : $q_i = x_i^{(0)}/z_i^{(0)}$. Llavors com més s'atansa a la frontera $x = 0$ el valor inicial d'una variable primal $x_i^{(0)}$ més la seva corresponent q_i esdevé negligible, mentre que per valors grans d' $x_i^{(0)}$ també tindrem valors grans de regularització. En els algorismes QIPM, RIPM i PIPM la rutina d'inicialització proporciona un punt $(x^{(0)}, y^{(0)}, z^{(0)}, w^{(0)})$ tal que, per les variables primals només es contempla que estiguin lluny de les fites, mentre que per les variables duals es prenen valors tals que la factibilitat dual $c - (A^T y^{(0)} + z^{(0)} - w^{(0)} - Qx^{(0)})$ és zero: $z^{(0)} = Qx^{(0)} - c$, $y^{(0)} = 0$, $w^{(0)} = x^{(0)}$, de forma que obtenim $q_i = x_i^{(0)}/(Qx_i^{(0)} - c)$. En la pràctica, per una àmplia varietat de problemes, aquesta estratègia ha mostrat ser més

eficient que l'anterior.

Altre heurística seguida ha vingut motivada pel resultat teòric establert en la Proposició 3.5.7 que afirma que per $0 \leq q \leq \frac{1}{u^2}$ el paràmetre de la barrera auto-concordant pren el valor 1, la qual cosa assegura una convergència del mateix ordre que per l'algorisme no regularitzat. Llavors prenem $q_i = 1/u_i^2$ i donant valors petits al paràmetre δ d'escalat en $Q^{(0)} = \delta \cdot \text{diag}(q)$ assegurem que es verifiqui la condició.

L'última heurística que hem considerat està basada en l'evolució del paràmetre de barrera μ_k iteració a iteració; la regularització quadràtica inicialment converteix un problema lineal en un de quadràtic que, a mesura que es redueix el paràmetre de la barrera μ_k , s'aproxima més i més al problema lineal original. Típicament, en les primeres iteracions de punt interior el paràmetre de barrera μ_k pràcticament no varia; quan les infactibilitats primal i dual s'han reduït suficientment, llavors comença també a reduir-se ràpidament la μ_k . En l'algorisme regularitzat tindrem per tant una Q pràcticament constant en les primeres iteracions que després es reduirà ràpidament, de forma que la millora del preconditionador que volem aconseguir amb la regularització es pot perdre massa aviat, quan encara estem lluny de l'òptim. Per esmorteir aquesta reducció massa prematura hem modificat l'expressió $Q^{(k)} = \mu_k (\delta/\mu_0) \text{diag}(q)$ afegint el comptador d'iteracions, de forma que ens quedi $Q^{(k)} = k \cdot \mu_k (\delta/\mu_0) \text{diag}(q)$. La Figura 5.1 mostra en l'eix d'abcisses les iteracions de punt interior i en el d'ordenades els valors de μ_k/μ_0 , $k \cdot \mu_k/\mu_0$ i també de $k^2 \cdot \mu_k/\mu_0$ en escala logarítmica pel problema multiarticle PDS1, resolt amb l'algorisme RIPM, prenent $q = (1, \dots, 1)$. El descens de magnitud de Q és també ràpid, però mantenint valors significativament superiors durant tota l'execució.

Figura 5.1: Evolució de μ_k/μ_0 , $k \cdot \mu_k/\mu_0$ i $k^2 \cdot \mu_k/\mu_0$ en PDS1, algorisme RIPM



5.1.3.2 Finalització de l'algorisme i verificació de l'òptim

Teòricament el valor final del paràmetre de barrera μ quan arribem a l'òptim ha de ser exactament zero. En la pràctica no és així, i obtenim sempre valors propers però no iguals a zero: degut a l'ús del mètode de gradient conjugat per a resoldre el sistema lineal (4.16) en teoria tindrem convergència exacte en com a molt n iteracions, essent n la dimensió del vector de variables primal x , però a la realitat degut a errors numèrics computacionals no podem exigir una solució exacte, i ens hem de conformar amb unes toleràncies no nul·les. Els algorismes QIPM, RIPM i PIPM s'aturen quan les infactibilitats primal i dual i el gap dual relatiu (2.37) de la iteració actual

$$\frac{|(c^T x + \frac{1}{2} x^T Q x) - (b^T y - \frac{1}{2} x^T Q x - u^T w)|}{1 + |(c^T x + \frac{1}{2} x^T Q x)|} \quad (5.3)$$

són menor que una tolerància que per defecte pren el valor de 10^{-6} . Això implica que el terme quadràtic $(\mu_k/\mu_0) x^{(k)T} Q^{(k)} x^{(k)}$ de regularització tampoc serà nul quan aturem l'algorisme, i depenent del valor de $Q^{(k)}$ pot representar una pertorbació important i fer que el valor òptim de la funció objectiu regularitzada difereixi significativament del valor que obtindríem sense regularitzar. Per aquest motiu en RIPM i en PIPM hem afegit un control addicional sobre el valor de l'òptim: el quocient entre els termes lineal i quadràtic en la funció objectiu primal

$$\frac{x^T Q x}{c^T x} \quad (5.4)$$

ha de ser menor que una tolerància, que també hem fixat en 10^{-6} .

5.1.4 Estudi empíric del comportament de la regularització

En aquesta secció resollem els problemes de la Taula 5.1 variant de forma empírica els valors de la matriu de regularització tal com s'ha explicat en la Secció 5.1.3.1 així com el paràmetre $pcgtol$ (tolerància del mètode de gradient conjugat preconditionat). S'han combinat els quatre tipus de matriu de regularització, amb 10 valors diferents del paràmetre $\delta \in \{10^{-8}, 10^{-7}, \dots, 10^0, 10^1\}$ i amb els valors 10^{-2} i 10^{-3} del paràmetre $pcgtol$, usant per a cada problema els dos algorismes RIPM i PIPM, la qual cosa ha implicat fer un total de 160 execucions de cada instància de la Taula 5.1 excepte del problema Gridgen1, un total de 2560 execucions. L'objectiu ha estat esbrinar quin és el millor algorisme, RIPM o PIPM, i amb quina combinació de paràmetres. El problema Gridgen1, el més complex dels problemes de prova, no s'ha usat en aquesta sèrie d'execucions degut a que cada una de les proves efectuades hauria consumit massa temps; una vegada obtinguts els millors paràmetres sí que el resoldrem més endavant, en la Secció 5.1.4.9. Totes les execucions amb problemes lineals de xarxes multiarticle s'han efectuat en una màquina SUN Fire V20Z server de 367 Mflops

de capacitat de procés amb dos processadors AMD Opteron a 2.46 GHz (no s'han aprofitat les seves possibilitats de computació paral·lela) i 8 GB de memòria RAM.

5.1.4.1 Regularització amb $Q = (\mu/\mu_0)\delta I$

La primera elecció pren $q = (1, \dots, 1)^T$. Obtenim els resultats de la Taula 5.2, que mostra els millors valors pels paràmetres δ i $pcgtol$, el nombre d'iteracions de punt interior ($iter$) i de gradient conjugat preconditionat ($iterGC$) i el temps de CPU en segons per als dos algorismes de regularització. En tots els problemes PDS tant RIPM com PIPM avantatgen a la versió no regularitzada QIPM (veure la Taula 5.1), especialment en les instàncies més grans, PDS25 i PDS30. En els problemes Mnetgen PIPM es mostra lleugerament superior a RIPM; en la instància 256-64-12 QIPM és mostra poc eficient, mentre que RIPM i PIPM són iguals, emprant ambdós de l'ordre de 21 vegades menys iteracions de gradient conjugat que QIPM. En canvi en la instància 256-256-12 els resultats de tots tres algorismes és pràcticament idèntic. Per als problemes tripart la regularització es mostra especialment efectiva en les instàncies més grans: en tripart3 tant RIPM com PIPM estalvien un 60% de iteracions de PCG i un 25% de temps de CPU, mentre que en tripart4 RIPM és mostra clarament superior, usant 3,5 vegades menys de iteracions de PCG i un 60% de temps de CPU.

Taula 5.2: Fluxos multiarticle amb regularització $Q = (\mu/\mu_0)\nu I$

| instància | Regularització quadràtica (RIPM) | | | | | Regularització proximal (PIPM) | | | | |
|------------|----------------------------------|-----------|--------|----------|------|--------------------------------|-----------|--------|----------|------|
| | ν | $pcgtol$ | $iter$ | $iterGC$ | CPU | ν | $pcgtol$ | $iter$ | $iterGC$ | CPU |
| pds1 | 10^{-1} | 10^{-2} | 38 | 463 | 0.08 | 10^{-2} | 10^{-2} | 39 | 489 | 0.08 |
| pds5 | 10^{-1} | 10^{-2} | 59 | 965 | 1.54 | 10^{-1} | 10^{-2} | 56 | 863 | 1.42 |
| pds10 | 10^{-2} | 10^{-2} | 76 | 1601 | 7.13 | 10^{-3} | 10^{-2} | 77 | 1536 | 6.84 |
| pds15 | 10^{-2} | 10^{-2} | 86 | 2304 | 19.0 | 10^{-1} | 10^{-2} | 89 | 2481 | 19.4 |
| pds20 | 10^{-1} | 10^{-2} | 105 | 4333 | 49.7 | 10^{-3} | 10^{-2} | 107 | 3877 | 47.2 |
| pds25 | 1 | 10^{-2} | 105 | 2374 | 55.6 | 1 | 10^{-2} | 108 | 2882 | 67.7 |
| pds30 | 10^{-1} | 10^{-2} | 113 | 3050 | 92.0 | 10^{-2} | 10^{-2} | 111 | 2808 | 89.6 |
| 32-32-12 | 10^{-1} | 10^{-2} | 48 | 2309 | 0.66 | 1 | 10^{-2} | 37 | 1213 | 0.42 |
| 64-64-12 | 10^{-1} | 10^{-2} | 63 | 1445 | 1.87 | 10^{-2} | 10^{-2} | 48 | 700 | 1.14 |
| 128-64-12 | 10^{-1} | 10^{-2} | 70 | 3793 | 12.3 | 10^{-1} | 10^{-2} | 66 | 2632 | 9.19 |
| 256-64-12 | 10^{-2} | 10^{-3} | 62 | 3762 | 34.7 | 10^{-2} | 10^{-3} | 62 | 3964 | 35.9 |
| 256-256-12 | 10^{-1} | 10^{-2} | 115 | 3820 | 165 | 10^{-1} | 10^{-2} | 113 | 3905 | 165 |
| tripart1 | 10^{-3} | 10^{-2} | 74 | 3711 | 2.78 | 10^{-1} | 10^{-2} | 63 | 2682 | 2.07 |
| tripart2 | 10^{-1} | 10^{-3} | 67 | 2894 | 11.8 | 10^{-1} | 10^{-2} | 72 | 2368 | 10.9 |
| tripart3 | 10^{-1} | 10^{-2} | 97 | 5233 | 47.2 | 10^{-2} | 10^{-2} | 83 | 5490 | 48.0 |
| tripart4 | 1 | 10^{-2} | 123 | 4381 | 113 | 1 | 10^{-2} | 127 | 8313 | 178 |

5.1.4.2 Regularització amb $Q = (\mu/\mu_0)\delta \cdot \text{diag}(x_i/z_i)$

Usant l'heurística $Q = (\mu/\mu_0)\delta \cdot \text{diag}(x_i/z_i)$ explicada en la secció 5.1.3.1 obtenim els resultats que es mostren en la taula (5.3). Amb aquesta elecció per Q , en tots els problemes RIPM avantatge clarament a PIPM i a QIPM (Taula 5.1), especialment en les instàncies PDS20, PDS25, 128-64-12, 256-64-12, tripart3 i tripart4.

Taula 5.3: Fluxos multiarticle amb regularització $Q = (\mu/\mu_0)\nu \cdot \text{diag}(x_i/z_i)$

| instància | Regularització quadràtica (RIPM) | | | | | Regularització proximal (PIPM) | | | | |
|------------|----------------------------------|-----------|------|--------|------|--------------------------------|-----------|------|--------|------|
| | ν | pcgtol | iter | iterGC | CPU | ν | pcgtol | iter | iterGC | CPU |
| pds1 | 1 | 10^{-2} | 43 | 506 | 0.09 | 1 | 10^{-2} | 41 | 479 | 0.09 |
| pds5 | 10^1 | 10^{-2} | 57 | 726 | 1.33 | 1 | 10^{-2} | 61 | 962 | 1.61 |
| pds10 | 10^{-2} | 10^{-2} | 74 | 1294 | 6.18 | 10^{-2} | 10^{-2} | 73 | 1481 | 6.93 |
| pds15 | 10^{-1} | 10^{-2} | 77 | 1610 | 14.3 | 10^{-1} | 10^{-2} | 89 | 2326 | 18.7 |
| pds20 | 10^{-2} | 10^{-2} | 96 | 2947 | 38.0 | 1 | 10^{-2} | 106 | 4899 | 56.0 |
| pds25 | 10^1 | 10^{-2} | 98 | 1741 | 44.3 | 1 | 10^{-2} | 112 | 3808 | 73.2 |
| pds30 | 10^{-3} | 10^{-2} | 118 | 3568 | 102 | 1 | 10^{-2} | 118 | 3852 | 109 |
| 32-32-12 | 10^{-3} | 10^{-2} | 39 | 1179 | 0.43 | 1 | 10^{-2} | 40 | 1523 | 0.48 |
| 64-64-12 | 10^{-3} | 10^{-2} | 53 | 947 | 1.41 | 1 | 10^{-2} | 81 | 5649 | 4.80 |
| 128-64-12 | 10^{-2} | 10^{-2} | 60 | 2304 | 8.42 | 1 | 10^{-2} | 68 | 2968 | 10.4 |
| 256-64-12 | 1 | 10^{-2} | 86 | 5149 | 48.3 | 1 | 10^{-2} | 96 | 8886 | 74.9 |
| 256-256-12 | 1 | 10^{-2} | 113 | 3774 | 164 | 1 | 10^{-2} | 115 | 3855 | 167 |
| tripart1 | 10^{-4} | 10^{-2} | 53 | 1646 | 1.46 | 1 | 10^{-2} | 71 | 2440 | 2.14 |
| tripart2 | 10^{-2} | 10^{-2} | 79 | 3368 | 13.5 | 1 | 10^{-2} | 119 | 11162 | 36.6 |
| tripart3 | 10^{-2} | 10^{-2} | 80 | 4401 | 39.6 | 1 | 10^{-2} | 94 | 5055 | 46.5 |
| tripart4 | 10^{-1} | 10^{-2} | 131 | 5835 | 138 | 1 | 10^{-2} | 124 | 7107 | 153 |

5.1.4.3 Regularització amb $Q = it \cdot (\mu/\mu_0)\delta I$

Les dues següents eleccions consisteixen en multiplicar la Q en cada iteració per el comptador d'iteracions de punt interior, tal com s'ha explicat en (5.1.3.1). Aquí usem la primera versió més simple per $Q = it \cdot (\mu/\mu_0)$ i en el següent apartat aplicarem el comptador d'iteracions a l'heurística $Q = (\mu/\mu_0)\delta \cdot \text{diag}(x_i/z_i)$. La taula (5.4) mostra els resultats, on “ it ” simbolitza el comptador d'iteracions de l'algorisme. PIPM es comporta lleugerament millor que RIPM en els problemes PDS, mentre que en els Mnetgen els resultats són força semblants. En els Tripart hi ha també una lleugera diferència a favor de RIPM. Comparant amb QIPM tots dos algorismes regularitzats es comporten clarament millor que QIPM, especialment en les instàncies 128-64-12, 256-64-12, tripart2, tripart3 i tripart4.

Taula 5.4: Fluxos multiarticle amb regularització $Q = it \cdot (\mu/\mu_0)\nu I$

| instància | Regularització quadràtica (RIPM) | | | | | Regularització proximal (PIPM) | | | | |
|------------|----------------------------------|-----------|------|--------|------|--------------------------------|-----------|------|--------|------|
| | ν | pcgtol | iter | iterGC | CPU | ν | pcgtol | iter | iterGC | CPU |
| pds1 | 10^{-2} | 10^{-2} | 43 | 579 | 0.11 | 10^{-2} | 10^{-2} | 47 | 563 | 0.09 |
| pds5 | 10^{-2} | 10^{-2} | 57 | 911 | 1.46 | 10^{-2} | 10^{-2} | 63 | 1262 | 1.82 |
| pds10 | 10^{-3} | 10^{-2} | 78 | 1784 | 7.51 | 10^{-2} | 10^{-2} | 73 | 1481 | 6.58 |
| pds15 | 10^{-3} | 10^{-2} | 84 | 2494 | 19.4 | 10^{-2} | 10^{-2} | 85 | 2036 | 17.0 |
| pds20 | 10^{-2} | 10^{-2} | 106 | 4260 | 49.1 | 10^{-1} | 10^{-2} | 103 | 4408 | 51.8 |
| pds25 | 10^{-4} | 10^{-2} | 114 | 3929 | 73.3 | 10^{-2} | 10^{-2} | 113 | 3625 | 72.2 |
| pds30 | 10^{-2} | 10^{-2} | 120 | 4275 | 116 | 10^{-3} | 10^{-2} | 115 | 3235 | 96.5 |
| 32-32-12 | 10^{-3} | 10^{-2} | 38 | 1260 | 0.42 | 1 | 10^{-2} | 40 | 924 | 0.36 |
| 64-64-12 | 10^{-4} | 10^{-2} | 54 | 1173 | 1.52 | 10^{-1} | 10^{-2} | 54 | 1203 | 2.11 |
| 128-64-12 | 10^{-2} | 10^{-2} | 65 | 2301 | 9.65 | 10^{-1} | 10^{-2} | 64 | 1736 | 7.00 |
| 256-64-12 | 1 | 10^{-2} | 85 | 3108 | 36.0 | 10^{-5} | 10^{-2} | 82 | 3849 | 38.5 |
| 256-256-12 | 5(*) | 10^{-2} | 113 | 2965 | 140 | 10 | 10^{-2} | 114 | 2764 | 135 |
| tripart1 | 10^{-1} | 10^{-2} | 86 | 1305 | 1.87 | 1 | 10^{-2} | 88 | 1662 | 2.01 |
| tripart2 | 10^{-4} | 10^{-2} | 79 | 3517 | 13.9 | 10^{-2} | 10^{-2} | 75 | 3036 | 12.5 |
| tripart3 | 10^{-2} | 10^{-2} | 95 | 2935 | 32.6 | 10^{-3} | 10^{-2} | 80 | 4154 | 38.2 |
| tripart4 | 10^{-2} | 10^{-2} | 131 | 5065 | 126 | 10^{-1} | 10^{-2} | 124 | 6438 | 148 |

(*) amb $\nu = 10$ obtenim la condició (5.4): $x'Qx/c'x > 1e - 6$

5.1.4.4 Regularització amb $Q = it \cdot (\mu/\mu_0)\delta \cdot \text{diag}(x_i/z_i)$

Per últim, combinant l'heurística $Q = (\mu/\mu_0)\delta \cdot \text{diag}(x_i/z_i)$ amb l'heurística consistent en multiplicar Q per el comptador d'iteracions, obtenim els resultats de la Taula 5.5. Pràcticament en totes les instàncies més grans RIPM supera àmpliament a QIPM (veure la Taula 5.1) i clarament a PIPM. Comparant RIPM amb QIPM podem destacar el casos PDS15, PDS20, PDS25 i PDS30 (30% a 40% menys de temps de CPU), 128-64-12 (50% menys), 256-64-12 (20 vegades menys de temps de CPU), tripart2, tripart3 i tripart4 (40% a 50% menys de temps de CPU)

5.1.4.5 Altres eleccions per a Q

No s'han mostrat tots els resultats obtinguts amb les eleccions proposades en la Secció 5.1.3.1: l'opció $Q = (\mu/\mu_0)\delta \cdot \text{diag}(z_i/x_i)$ s'ha provat amb resultats lleugerament pitjors que els presentats, i per tant no hem reproduït els resultats. L'estratègia de prendre $q_i = 1/u_i^2$ on u_i és la fita superior i -èsima tampoc ha donat bons resultats. Possiblement la causa sigui el rang de valors que prenen les capacitats dels arcs; per exemple, per el problema PDS1 aquest rang és $u_i \in [10^{-6}, 19438.0] \Leftrightarrow q_i = 1/u_i^2 \in [2.6 \cdot 10^{-9}, 10^{12}]$, amb la qual cosa la regularització pren valors enormes per algunes variables i negligibles per altres.

Taula 5.5: Fluxos multiarticle amb regularització $Q = it \cdot (1/\mu_0)\nu \cdot \text{diag}(x_i/z_i)$

| instància | Regularització quadràtica (RIPM) | | | | | Regularització proximal (PIPM) | | | | |
|------------|----------------------------------|-----------|------|--------|------|--------------------------------|-----------|------|--------|------|
| | ν | pcgtol | iter | iterGC | CPU | ν | pcgtol | iter | iterGC | CPU |
| pds1 | 10^{-3} | 10^{-2} | 38 | 472 | 0.08 | 1 | 10^{-2} | 42 | 413 | 0.08 |
| pds5 | 10^{-4} | 10^{-2} | 56 | 927 | 1.47 | 1 | 10^{-2} | 54 | 755 | 1.31 |
| pds10 | 10^{-1} | 10^{-2} | 77 | 1777 | 7.44 | 10^{-2} | 10^{-2} | 73 | 1481 | 6.58 |
| pds15 | 1 | 10^{-2} | 81 | 1607 | 14.8 | 1 | 10^{-2} | 84 | 1961 | 16.5 |
| pds20 | 1 | 10^{-2} | 96 | 2364 | 33.9 | 1 | 10^{-2} | 97 | 3036 | 38.6 |
| pds25 | 1 | 10^{-2} | 94 | 1633 | 42.4 | 1 | 10^{-2} | 100 | 2116 | 49.0 |
| pds30 | 1 | 10^{-2} | 99 | 1667 | 64.5 | 1 | 10^{-2} | 121 | 4388 | 116 |
| 32-32-12 | 1 | 10^{-3} | 35 | 1165 | 0.38 | 10^{-2} | 10^{-2} | 41 | 1137 | 0.40 |
| 64-64-12 | 10 | 10^{-3} | 45 | 1235 | 1.45 | 10^{-1} | 10^{-2} | 54 | 1203 | 1.54 |
| 128-64-12 | 10 | 10^{-3} | 51 | 1833 | 6.79 | 1 | 10^{-2} | 65 | 2557 | 9.06 |
| 256-64-12 | 10 | 10^{-3} | 59 | 2112 | 22.8 | 1 | 10^{-2} | 86 | 4071 | 39.8 |
| 256-256-12 | 10 | 10^{-3} | 98 | 3772 | 154 | 1 | 10^{-2} | 110 | 3354 | 148 |
| tripart1 | 1 | 10^{-3} | 142 | 3844 | 3.7 | 1 | 10^{-2} | 86 | 1907 | 2.01 |
| tripart2 | 1 | 10^{-2} | 80 | 2121 | 10.5 | 1 | 10^{-2} | 125 | 5371 | 21.3 |
| tripart3 | 1 | 10^{-2} | 114 | 1755 | 28.0 | 1 | 10^{-2} | 115 | 7857 | 66.0 |
| tripart4 | 0.01 | 10^{-2} | 127 | 6222 | 146 | 1 | 10^{-2} | 149 | 8191 | 176 |

5.1.4.6 Conclusions per als problemes multiarticle

Com a resum útil per extreure conclusions, la Taula 5.6 compara els tres algorismes, QIPM no regularitzat, RIPM amb regularització quadràtica i PIPM amb regularització proximal: mostra les 16 instàncies dels problemes multiarticle de la Taula 5.1 ordenades per nombre de variables, i els temps de CPU emprats per cada algorisme i per cada elecció de la matriu de regularització, indicant en negreta el millor temps de cada problema. L'última columna mostra el temps emprat pel mètode no regularitzat QIPM i el millor temps entre QIPM i RIPM de cada instància, mentre que l'última fila mostra els temps total emprats per cada algorisme en resoldre totes les instàncies. L'algorisme amb regularització quadràtica RIPM aconseguix el millor temps en 14 ocasions (un 75% d'èxits), i concretament la versió que usa $Q = it \cdot (1/\mu_0)\delta \cdot \text{diag}(x_i/z_i)$ resulta el millor mètode (columna (4) de la taula), obtenim el millor temps en un 50% dels problemes; també, observant la fila de temps total, arribem a la mateixa conclusió: obtenim un temps total de 538 segons, mentre que QIPM necessita 900 segons per resoldre totes les instàncies, un 67% més de temps. D'altra banda el mètode de regularització proximal PIPM obté el millor temps en 4 ocasions, mentre que el mètode no regularitzat QIPM ha estat el més lent en tots els problemes. En el cas del millor algorisme, RIPM amb $Q = it \cdot (1/\mu_0)\delta \cdot \text{diag}(x_i/z_i)$, l'elecció del paràmetre δ que ha estat amb més freqüència la millor ha estat $\delta = 1$ (9 de 16 instàncies), mentre que el paràmetre *pcgtol*

ha pres el valor 10^{-2} en 10 ocasions. Observem també, com a dada important, que totes les versions regularitzades, tant quadràtica com proximal, obtenen temps totals de resolució inferiors a la versió no regularitzada.

Taula 5.6: Temps de CPU, problemes multiarticle

| instància | (1) | | (2) | | (3) | | (4) | | (5) |
|-------------|-------------|-------------|-------------|------|------|-------------|-------------|-------------|------|
| | RIPM | PIPM | RIPM | PIPM | RIPM | PIPM | RIPM | PIPM | QIPM |
| pds1 | 0.08 | 0.08 | 0.09 | 0.09 | 0.11 | 0.09 | 0.08 | 0.08 | 0.09 |
| 32-32-12 | 0.66 | 0.42 | 0.43 | 0.48 | 0.42 | 0.36 | 0.38 | 0.4 | 0.44 |
| pds5 | 1.54 | 1.42 | 1.33 | 1.61 | 1.46 | 1.82 | 1.47 | 1.31 | 1.66 |
| 64-64-12 | 1.87 | 1.14 | 1.41 | 4.8 | 1.52 | 2.11 | 1.45 | 1.54 | 1.49 |
| tripart1 | 2.78 | 2.07 | 1.46 | 2.14 | 1.87 | 1.01 | 3.7 | 2.01 | 1.7 |
| pds10 | 7.13 | 6.84 | 6.18 | 7.92 | 7.51 | 6.58 | 7.44 | 6.58 | 7.25 |
| 128-64-12 | 12.3 | 9.19 | 8.42 | 10.4 | 9.65 | 7 | 6.79 | 9.06 | 13.2 |
| pds15 | 19 | 19.4 | 14.3 | 19.9 | 19.4 | 17 | 14.8 | 16.5 | 21.9 |
| pds20 | 49.7 | 47.2 | 38 | 56 | 49.1 | 51.8 | 33.9 | 38.6 | 56.5 |
| tripart2 | 15.5 | 10.9 | 13.5 | 36.6 | 13.9 | 12.5 | 10.5 | 21.3 | 17.3 |
| tripart3 | 47.2 | 48 | 39.6 | 46.5 | 32.6 | 38.2 | 28 | 66 | 62.4 |
| 256-64-12 | 59.6 | 47.1 | 35.9 | 74.9 | 36 | 38.5 | 22.8 | 39.8 | 62.4 |
| pds25 | 55.6 | 67.7 | 44.3 | 73.2 | 73.3 | 72.2 | 42.4 | 49 | 74.6 |
| pds30 | 92 | 89.6 | 102 | 109 | 116 | 96.5 | 64.5 | 116 | 111 |
| 256-256-12 | 165 | 165 | 164 | 167 | 158 | 135 | 154 | 148 | 203 |
| tripart4 | 113 | 178 | 138 | 153 | 126 | 148 | 146 | 176 | 265 |
| temps total | 643 | 694 | 609 | 764 | 647 | 629 | 538 | 692 | 900 |

(1) $Q = (\mu/\mu_0)\delta\nu I$

(2) $Q = (\mu/\mu_0)\delta \cdot \text{diag}(x_i/z_i)$

(3) $Q = \text{it} \cdot (\mu/\mu_0)\delta I$

(4) $Q = \text{it} \cdot (\mu/\mu_0)\delta \cdot \text{diag}(x_i/z_i)$

(5) $Q = 0$

Per tal de poder comparar amb facilitat els resultats de forma global, la Taula 5.7 ens mostra la mateixa informació que la Taula 5.6 però expresant els temps relatius a l'algorisme QIPM: cada casella de la taula mostra el quocient (temps de l'algorisme regularitzat / temps de l'algorisme no regularitzat). Si observem l'última fila que mostra les ràtios promig, observem que la versió amb $Q = (\mu/\mu_0)\delta \cdot \text{diag}(x_i/z_i)$ avantatge lleugerament a la versió amb $Q = \text{it} \cdot (\mu/\mu_0)\delta \cdot \text{diag}(x_i/z_i)$ que ha estat la millor en termes de temps total d'execució; així doncs, en termes relatius respecte a l'algorisme no regularitzat QIPM (taula 5.7) les regularitzacions de la columna 2 i 4 són quasi idèntiques en rendiment, amb un mínim avantatge per la regularització de la columna 2, mentre que en termes absoluts (taula 5.6) s'inverteixen els termes, resultant la regularització de la columna 4 la millor.

La Figura 5.2 pren les dades de la Taula 5.6 mostrant només les seves columnes (4) i

Taula 5.7: Ràtio temps de CPU de RIPM i PIPM respecte QIPM, problemes multiarticle

| | (1) | | (2) | | (3) | | (4) | |
|------------|------|------|-------------|------|------|------|-------------|------|
| instància | RIPM | PIPM | RIPM | PIPM | RIPM | PIPM | RIPM | PIPM |
| pds1 | 0.89 | 0.89 | 1 | 1 | 1.22 | 1 | 0.89 | 0.89 |
| 32-32-12 | 1.5 | 0.95 | 0.98 | 1.09 | 0.95 | 0.82 | 0.86 | 0.91 |
| pds5 | 0.93 | 0.86 | 0.8 | 0.97 | 0.88 | 1.1 | 0.89 | 0.79 |
| 64-64-12 | 1.26 | 0.77 | 0.95 | 3.22 | 1.02 | 1.42 | 0.97 | 1.03 |
| tripart1 | 1.64 | 1.22 | 0.86 | 1.26 | 1.1 | 0.59 | 2.18 | 1.18 |
| pds10 | 0.98 | 0.94 | 0.85 | 1.09 | 1.04 | 0.91 | 1.03 | 0.91 |
| 128-64-12 | 0.93 | 0.7 | 0.64 | 0.79 | 0.73 | 0.53 | 0.51 | 0.69 |
| pds15 | 0.87 | 0.89 | 0.65 | 0.91 | 0.89 | 0.78 | 0.68 | 0.75 |
| pds20 | 0.88 | 0.84 | 0.67 | 0.99 | 0.87 | 0.92 | 0.6 | 0.68 |
| tripart2 | 0.9 | 0.63 | 0.78 | 2.12 | 0.8 | 0.72 | 0.61 | 1.23 |
| tripart3 | 0.76 | 0.77 | 0.63 | 0.75 | 0.52 | 0.61 | 0.45 | 1.06 |
| 256-64-12 | 0.96 | 0.75 | 0.58 | 1.2 | 0.58 | 0.62 | 0.37 | 0.64 |
| pds25 | 0.75 | 0.91 | 0.59 | 0.98 | 0.98 | 0.97 | 0.57 | 0.66 |
| pds30 | 0.83 | 0.81 | 0.92 | 0.98 | 1.05 | 0.87 | 0.58 | 1.05 |
| 256-256-12 | 0.81 | 0.81 | 0.81 | 0.82 | 0.78 | 0.67 | 0.76 | 0.73 |
| tripart4 | 0.43 | 0.67 | 0.52 | 0.58 | 0.48 | 0.56 | 0.55 | 0.66 |
| promig | 0.96 | 0.84 | 0.76 | 1.17 | 0.87 | 0.82 | 0.78 | 0.87 |

(1) $Q = (\mu/\mu_0)\delta\nu I$

(2) $Q = (\mu/\mu_0)\delta \cdot \text{diag}(x_i/z_i)$

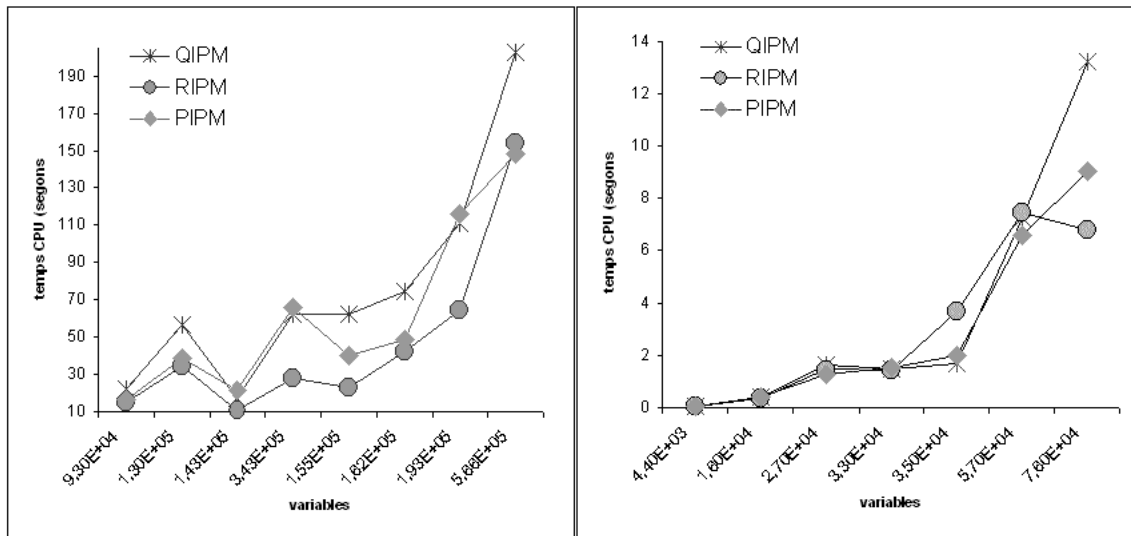
(3) $Q = \text{it} \cdot (\mu/\mu_0)\delta I$

(4) $Q = \text{it} \cdot (\mu/\mu_0)\delta \cdot \text{diag}(x_i/z_i)$

(5) $Q = 0$

(5), corresponents al millor resultat absolut aconseguit amb RIPM, el temps equivalent per PIPM i el de QIPM; per més claredat la figura mostra dos gràfics: en el gràfic de l'esquerra el problemes més grans (des de PDS15 fins tripart4), que és on s'aprecia més clarament l'avantatge de RIPM; en el gràfic de la dreta tenim els problemes menors (des de PDS1 fins 128-64-12 en la taula).

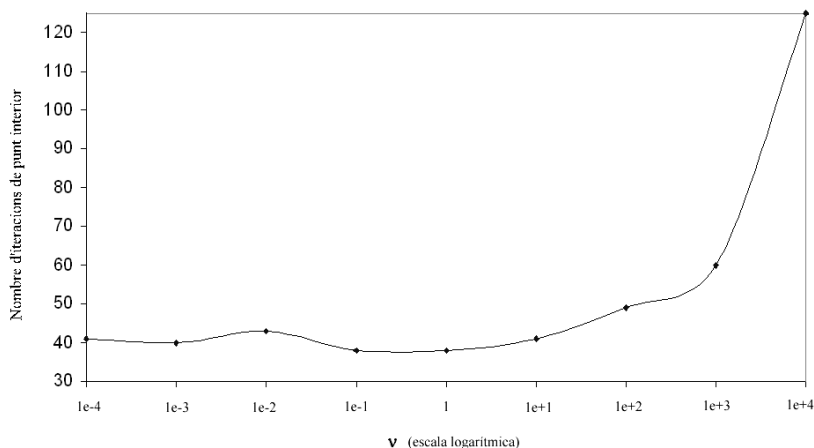
Figura 5.2: Temps de CPU per a QIPM, RIPM, PIPM



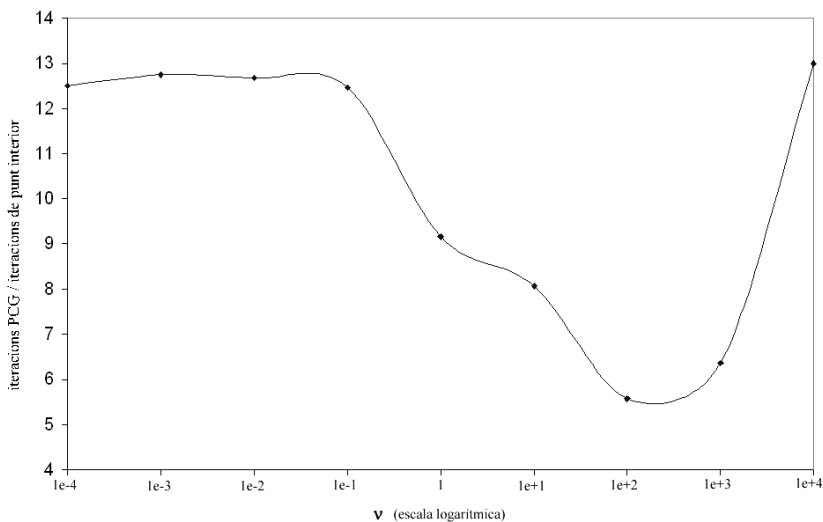
5.1.4.7 Comportament de la regularització segons la magnitud de Q

Un tema addicional des de l'actual punt de vista empíric és verificar el comportament de l'algorisme de punt interior que hem predit en la Secció 3.5.3 quan variem la matriu Q de regularització: diem que la complexitat de l'algorisme creix amb Q . Per verificar-ho hem resolt el problema PDS1 prenent l'elecció més simple de matriu de regularització $Q = \nu I$ i variant δ . Els resultats es mostren en la Figura 5.3 que mostra que, efectivament, el nombre d'iteracions es manté més o menys estable per a un rang ampli de valors de Q , però augmenta ràpidament a partir de cert valor crític.

També és il·lustratiu la variació del nombre d'iteracions de gradient conjugat amb la magnitud de la matriu de regularització. Usant de nou el problema PDS1 amb $Q = \delta I$ i variant δ hem obtingut la Figura 5.4, que mostra els valors del quocient (iteracions de gradient conjugat/iteracions de punt interior) segons els valors de δ . Per a valors petits la ràtio és pràcticament constant, per després iniciar un descens conforme augmentem el terme de regularització. Per valors de δ superiors a 10^2 la tendència s'inverteix. Per tant observem que quan augmentem suficientment els valors de Q , no només s'incrementa el nombre d'iteracions de punt interior sinó també el nombre d'iteracions de gradient conjugat

Figura 5.3: Iteracions de punt interior segons els valors de $Q = \nu I$ en el problema PDS1

en cada iteració de punt interior. Això no contradiu la nostre afirmació provada en la Secció 4.4.3 de que en afegir el terme quadràtic sempre obtindrem una reducció en el nombre d'iteracions de gradient conjugat, doncs l'increment observat es produeix en les darreres iteracions de punt interior, quan el terme de regularització esdevé negligible.

Figura 5.4: Iteracions PCG i de punt interior per al problema PDS1, $Q = \nu I$ 

Per il·lustrar aquesta darrera afirmació, La Figura 5.5 compara l'evolució del percentatge acumulat d'iteracions de gradient conjugat per al problema PDS1 usant $\delta = 10^4$ o bé $\delta = 0$, és a dir, sense regularització. Es veu que pel cas regularitzat en les primeres 90 iteracions no s'arriba a un 20% del total d'iteracions de gradient conjugat, i a partir d'aquest punt el

creixement és semblant al de l'algorisme no regularitzat.

5.1.4.8 Comparació entre RIPM i PIPM

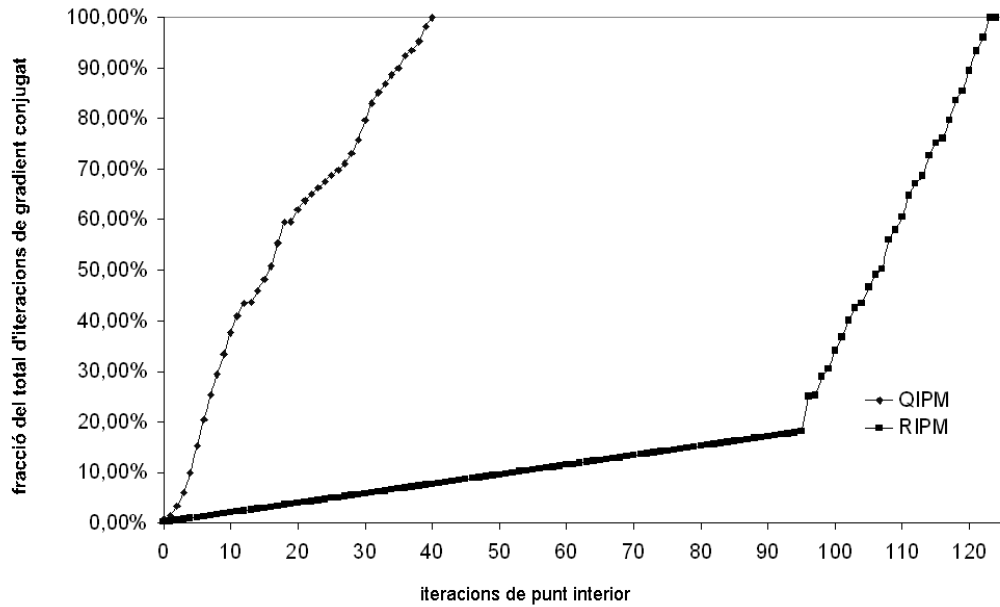
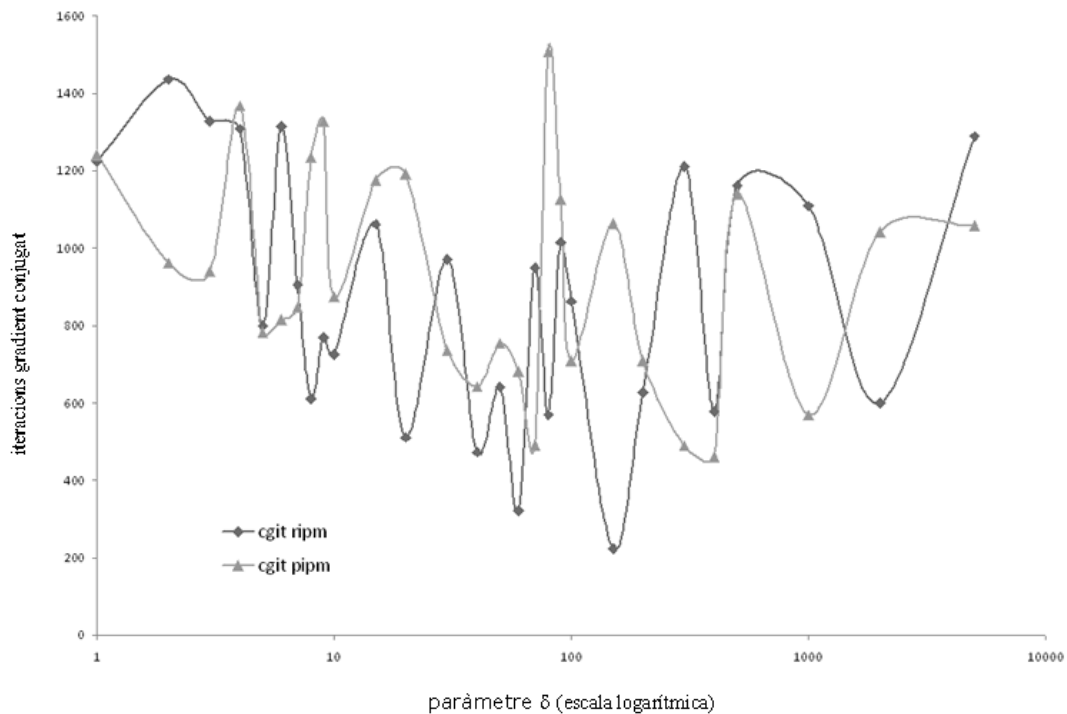
Malgrat en la Secció 5.1.4.6 ha quedat establert que les prestacions de l'algorisme amb regularització quadràtica RIPM han estat superiors al de regularització proximal PIPM en quan a temps total de CPU, és interessant comparar també el nombre d'iteracions de gradient conjugat preconditionat (PCG) que efectuen tots dos algorismes. Per veure-ho, hem resolt el problema PDS5 usant $Q = (1/\mu_0)\delta \cdot \text{diag}(x_i/z_i)$ i variant δ des de 0 (equival a no aplicar cap regularització) fins a $5e+03$ amb tots dos algorismes. La Figura 5.6 mostra els resultats. El comportament oscil·latori és semblant en tot dos, però RIPM assoleix un mínim en les iteracions de PCG menor que PIPM; també, el màxim de PIPM és superior al de RIPM .

5.1.4.9 Resultats usant els millors paràmetres

Un cop tenim establert que RIPM és superior a PIPM i tenint els valors dels paràmetres que donen millors resultats, els hem aplicat en la resolució d'una llista de 31 problemes Mnetgen. L'objectiu ha estat provar el comportament de RIPM sense usar l'ajust manual dels paràmetres. A diferència dels resultats computacionals anteriors, aquí sempre s'ha usat l'elecció $Q = it \cdot (1/\mu_0)\delta \cdot \text{diag}(x_i/z_i)$ amb $\delta = 1$ i $pcgtol = 1e-02$, excepte en aquells casos on hem tingut problemes de convergència. La Taula 5.8 mostra les dimensions de cada problema i els resultats obtinguts amb QIPM i RIPM. La informació proporcionada és: k : nombre d'articles, m' : nombre de nodes, n' : nombre d'arcs, n : nombre de variables, m : nombre de restriccions, f : valor de la funció objectiu primal en l'òptim, it : nombre d'iteracions de punt interior, PCG: nombre d'iteracions de gradient conjugat preconditionat, CPU: temps de procés total en segons.

En el conjunt de problemes Mnetgen l'algorisme QIPM ha emprat 1957 iteracions de punt interior, 191126 iteracions de gradient conjugat i un temps total de CPU de 5583.23 segons, mentre que les mateixes xifres per RIPM han estat de 1770, 80150 i 3432,48 respectivament. Les diferències en aquests valors de RIPM respecte a QIPM expressades en tants per cent són: 9.56% menys d'iteracions de punt interior, 58.06% menys de iteracions de gradient conjugat i 38.52% menys de temps de CPU. En les columnes CPU de QIPM i RIPM s'han remarcat en negreta aquelles instàncies en les quals la diferència respecte QIPM és més acusada. Hi han 3 problemes en els que QIPM no ha arribat a l'òptim, mentre que RIPM sempre ho ha fet. D'altra banda en els problemes 512-512-12 quasi el 50% menys de CPU, en 256-64-4 l'avantatge és de 5 contra 1 a favor de RIPM, en 128-64-4 RIPM necessita 9 vegades menys temps que QIPM, mentre que en 256-64-12 la diferència és de 20 vegades més ràpid a favor de RIPM. En 4 de les instàncies més petites QIPM es mostra més ràpid que RIPM.

Figura 5.5: Evolució del percentatge d'iteracions de gradient conjugat, PDS1

Figura 5.6: Iteracions de PCG segons δ per a PIPM i RIPM, problema PDS5

Taula 5.8: Problemes Mnetgen

| Paràmetres dels problemes | | | | | | QIPM | | | RIPM | | |
|---------------------------|-----|------|------|---------|--------|--------------------|--------|-------------|--------------------|--------|-------------|
| Nom | k | m' | n' | n | m | it | PCG | CPU | it | PCG | CPU |
| 128-64-1 | 64 | 128 | 388 | 24958 | 8254 | 54 | 460 | 0.94 | 50 | 475 | 0.92 |
| 128-64-2 | 64 | 128 | 394 | 25344 | 8256 | 80 | 722 | 1.45 | 54 ₍₁₀₎ | 760 | 1.24 |
| 128-64-3 | 64 | 128 | 381 | 24507 | 8251 | 68 | 568 | 1.26 | 45 ₍₃₎ | 509 | 0.94 |
| 128-64-4 | 64 | 128 | 412 | 26650 | 8410 | 90 ₍₆₎ | 9151 | 8.42 | 46 ₍₁₀₎ | 514 | 0.95 |
| 128-64-5 | 64 | 128 | 406 | 26266 | 8410 | 238 ₍₆₎ | 50623 | 43.7 | 205 | 33199 | 28.3 |
| 128-64-6 | 64 | 128 | 397 | 25676 | 8396 | 57 | 1005 | 1.57 | 54 | 708 | 1.32 |
| 128-64-7 | 64 | 128 | 1184 | 76243 | 8595 | 72 | 2831 | 8.78 | 66 | 2028 | 7.66 |
| 128-64-8 | 64 | 128 | 1154 | 74293 | 8565 | 87 | 4599 | 12.8 | 74 | 1929 | 7.04 |
| 128-64-9 | 64 | 128 | 1138 | 73261 | 8557 | 60 | 2225 | 7.29 | 57 | 1647 | 6.07 |
| 128-64-10 | 64 | 128 | 1182 | 76566 | 9046 | 70 | 4953 | 14.6 | 69 | 4441 | 13.4 |
| 128-64-11 | 64 | 128 | 1201 | 77786 | 9050 | 76 | 5481 | 16.5 | 64 | 3020 | 10.3 |
| 128-128-12 | 128 | 128 | 1204 | 155044 | 17188 | 97 | 3839 | 26.8 | 90 | 2779 | 21.2 |
| 256-64-1 | 64 | 256 | 811 | 52176 | 16592 | 73 | 1134 | 4.87 | 57 ₍₄₎ | 1746 | 6.17 |
| 256-64-2 | 64 | 256 | 836 | 53794 | 16610 | - ₍₁₎ | - | - | 145 ₍₆₎ | 12319 | 31.9 |
| 256-64-3 | 64 | 256 | 827 | 53210 | 16602 | 59 | 836 | 4.05 | 62 | 921 | 4.40 |
| 256-64-4 | 64 | 256 | 794 | 51349 | 16853 | 390 | 128350 | 252 | 116 ₍₆₎ | 26026 | 53.8 |
| 256-64-5 | 64 | 256 | 808 | 52249 | 16857 | - ₍₁₎ | - | - | 55 ₍₈₎ | 5362 | 13.5 |
| 256-64-6 | 64 | 256 | 801 | 51791 | 16847 | 82 | 3507 | 9.87 | 73 | 2944 | 8.82 |
| 256-64-7 | 64 | 256 | 2318 | 149264 | 17232 | 72 | 3856 | 36.4 | 67 | 3877 | 35.9 |
| 256-64-8 | 64 | 256 | 2330 | 149991 | 17191 | 74 | 3442 | 33.8 | 66 ₍₂₎ | 3342 | 32.4 |
| 256-64-9 | 64 | 256 | 2414 | 152071 | 17223 | 86 | 2842 | 31.1 | 94 | 3176 | 37.7 |
| 256-64-10 | 64 | 256 | 2336 | 151293 | 18109 | 90 | 5770 | 54.3 | 85 ₍₂₎ | 5204 | 50.4 |
| 256-64-11 | 64 | 256 | 2334 | 151154 | 18098 | 83 | 4748 | 46.3 | 73 | 6467 | 59.9 |
| 256-64-12 | 64 | 256 | 2320 | 150190 | 18030 | 132 | 87698 | 620 | 61 | 3018 | 29.5 |
| 512-128-12 | 128 | 512 | 4786 | 616189 | 68989 | 117 | 6164 | 396 | 113 | 4105 | 344 |
| 512-256-12 | 256 | 512 | 4810 | 1234949 | 134405 | 139 | 6945 | 883 | 139 | 6433 | 829 |
| 512-512-12 | 512 | 512 | 4786 | 2454022 | 265222 | 179 | 12074 | 2760 | 163 ₍₂₎ | 4782 | 1560 |
| 768-128-6 | 768 | 128 | 2317 | 298079 | 99679 | 130 ₍₃₎ | 26149 | 613 | 122 | 16449 | 365 |
| 768-256-6 | 768 | 256 | 2370 | 608268 | 197900 | - ₍₉₎ | - | - | 220 | 110412 | 4790 |
| 768-512-6 | 768 | 512 | 2379 | 1219599 | 394255 | 246 | 81345 | 8040 | 240 ₍₅₎ | 84120 | 7610 |

(1) Inestabilitats numèriques en el solver de PCG

(2) $\nu = 2$ (3) $pcgtol = 10^{-3}$ (4) $pcgtol = 10^{-3}$, $m_pw_prec = 2$ (5) $\nu = 0.1$ (6) $pcgtol = 10^{-6}$ (7) $\nu = 0.1$, $pcgtol = 10^{-5}$ (8) $\nu = 10$, $pcgtol = 10^{-6}$ (9) > 400 iteracions(10) $pcgtol = 10^{-3}$, $\nu = 0.1$

A efectes comparatius, la taula 5.9 mostra el nombre d'iteracions (columna “it”) i el temps de CPU (columna “CPU”) per les mateixes instàncies de la taula 5.8 usant CPLEX-11 amb tres opcions diferents: simplex, simplex dual, híbrid i mètode de barrera. L'opció algorisme híbrid el que fa és: primer extreu una estructura de xarxa de la matriu de restriccions, soluciona aquesta part del problema amb un simplex primal especialitzat per a problemes de xarxes i en acabar passa la solució parcial obtinguda al simplex dual. L'opció simplex dual no usa aquesta fase previa on s'aprofita l'estructura de xarxa de part de la matriu de restriccions.

Com en l'anterior taula, el millor temps de CPU està marcat en negreta. Cal dir que CPLEX-11 és un codi comercial que utilitza rutines especialitzades d'àlgebra lineal d'alt rendiment, mentre que QIPM i RIPM utilitzen la llibreria estàndard de factoritzacions de Cholesky d'en Ng-Peyton; així i tot, RIPM és sempre molt més eficient que el mètode de barrera de CPLEX-11. D'altre banda l'algorisme simplex dual de CPLEX és molt eficient en les instàncies Mnetgen, i supera en rendiment a RIPM.

Resolem a continuació una col·lecció més ampla de problemes PDS amb el mateix objectiu: no usar l'ajust manual dels paràmetres. Com abans, hem triat $Q = it \cdot (1/\mu_0)\delta \cdot \text{diag}(x_i/z_i)$, el paràmetre *pcgtol* pren també el valor 10^{-2} , però per al paràmetre d'escalat δ prenem el valor 0.1, que hem vist que funciona millor per aquesta família de problemes. Els resultats es mostren en la Taula 5.10.

En el conjunt de problemes PDS l'algorisme QIPM ha emprat 1168 iteracions de punt interior, 126996 iteracions de gradient conjugat i un temps de CPU de 9582 segons, mentre que les mateixes xifres per RIPM han estat de 1211, 78028 i 7204 respectivament. Les diferències en aquests valors de RIPM respecte a QIPM expressades en tants per cent són: 3.7% més d'iteracions de punt interior, 38,6% menys de iteracions de gradient conjugat i 24,8% menys de temps de CPU. Excepte en el problema PDS1, en totes les instàncies RIPM s'ha mostrat superior a QIPM; això ha estat especialment cert en els problemes PDS20 i PDS30 (un 50% menys de temps de CPU) i en Gridgen1, en el qual RIPM ha estat el triple de ràpid que QIPM. En el problema PDS70 el codi RIPM ha mostrat el missatge d'avís indicant que $x^T Q x / c^T x = 1.5071 \cdot 10^{-6} > 10^{-6}$, malgrat això s'ha respectat la solució proporcionada doncs l'error relatiu continua sent de l'ordre de 10^{-6} . La Taula 5.11 mostra els resultats de resoldre els problemes PDS usant CPLEX; de nou l'opció simplex dual és la més eficient, amb avantatge sobre QIPM i RIPM.

En quant als problemes Tripart triem els paràmetres *pcgtol* = 10^{-2} i $\delta = 1$; els resultats es mostren en la taula 5.12 en la qual hem afegit també el problema Gridgen1, una instància particularment difícil de resoldre, amb quasi un milió de variables i més de 300.000 restriccions.

Taula 5.9: Problemes Mnetgen resolts amb CPLEX-11

| Problema | simplex | | híbrid | | simplex dual | | barrera | |
|------------|-----------|---------|-----------|---------|--------------|--------------|-----------|---------|
| | <i>it</i> | CPU | <i>it</i> | CPU | <i>it</i> | CPU | <i>it</i> | CPU |
| 128-64-1 | 3407 | 0.58 | 3497 | 0.50 | 6532 | 0.37 | 22 | 1.50 |
| 128-64-2 | 4011 | 0.66 | 4784 | 0.55 | 6590 | 0.34 | 23 | 1.52 |
| 128-64-3 | 1766 | 0.51 | 4061 | 0.40 | 7344 | 0.34 | 26 | 1.54 |
| 128-64-4 | 12504 | 1.66 | 7130 | 1.08 | 8376 | 0.64 | 18 | 4.60 |
| 128-64-5 | 10133 | 1.31 | 7118 | 0.94 | 7918 | 0.54 | 17 | 4.23 |
| 128-64-6 | 11082 | 1.19 | 6366 | 0.79 | 8668 | 0.54 | 18 | 4.16 |
| 128-64-7 | 74570 | 10.36 | 42245 | 5.52 | 12553 | 1.74 | 16 | 18.32 |
| 128-64-8 | 84047 | 10.33 | 43503 | 16.52 | 13459 | 1.91 | 16 | 18.33 |
| 128-64-9 | 85635 | 10.93 | 53583 | 5.97 | 13860 | 1.84 | 16 | 19.28 |
| 128-64-10 | 242539 | 421.2 | 33383 | 148.96 | 17686 | 12.98 | 18 | 55.92 |
| 128-64-11 | 272249 | 534.0 | 36518 | 95.03 | 19295 | 11.72 | 18 | 57.97 |
| 128-128-12 | 275263 | 519.5 | 73941 | 308.4 | 39987 | 33.83 | 21 | 145.6 |
| 256-64-1 | 15319 | 2.70 | 11802 | 2.03 | 14273 | 1.30 | 17 | 8.29 |
| 256-64-2 | 17206 | 2.70 | 15831 | 2.60 | 14970 | 1.18 | 20 | 9.95 |
| 256-64-3 | 13372 | 2.24 | 14105 | 1.83 | 15916 | 1.28 | 20 | 8.60 |
| 256-64-4 | 36775 | 11.00 | 11617 | 3.41 | 15366 | 1.81 | 16 | 18.12 |
| 256-64-5 | 34996 | 7.22 | 13102 | 2.86 | 15810 | 1.66 | 18 | 20.41 |
| 256-64-6 | 23930 | 3.88 | 12348 | 2.14 | 16021 | 1.44 | 15 | 17.53 |
| 256-64-7 | 339040 | 184.74 | 91867 | 25.39 | 25619 | 5.66 | 16 | 105.03 |
| 256-64-8 | 312600 | 105.98 | 109993 | 33.89 | 26516 | 5.58 | 18 | 100.53 |
| 256-64-9 | 399523 | 189.94 | 79936 | 117.24 | 27162 | 5.92 | 17 | 112.93 |
| 256-64-10 | 534984 | 2823.6 | 90611 | 1220.14 | 36462 | 40.05 | 18 | 360.34 |
| 256-64-11 | 589623 | 2821.9 | 78142 | 535.97 | 35246 | 31.27 | 17 | 362.11 |
| 256-64-12 | - | >3000 | 68890 | 208.64 | 36193 | 33.96 | 11 | 302.49 |
| 512-128-12 | - | >3000 | 330077 | 6403.2 | 98856 | 88.27 | - | >3000 |
| 512-256-12 | - | >3000 | 104343 | 4498.0 | 181380 | 157.3 | - | >3000 |
| 512-512-12 | - | >3000 | 236989 | 9144.0 | 342622 | 399.0 | - | >3000 |
| 768-128-6 | 161141 | 139.44 | 74595 | 70.18 | 94822 | 25.18 | 22 | 627.62 |
| 768-256-6 | 419979 | 688.32 | 169608 | 210.92 | 194401 | 81.53 | 24 | 1436.11 |
| 768-512-6 | 952474 | 2922.74 | 430396 | 2243.6 | 388154 | 240.9 | - | >3000 |
| 768-768-6 | - | >3000 | 682454 | 2783.6 | 587717 | 437.8 | - | >3000 |

Taula 5.10: Problemes PDS, $Q = it \cdot (1/\mu_0) \cdot 0.1 \cdot \text{diag}(x_i/z_i)$

| Paràmetres dels problemes | | | | | | QIPM | | | RIPM | | |
|---------------------------|-----|-------|-------|--------|--------|------|-------|-------------|--------------------|-------|-------------|
| Nom | k | m' | n' | n | m | it | PCG | CPU | it | PCG | CPU |
| PDS10 | 11 | 4792 | 1399 | 53526 | 16192 | 80 | 3830 | 12.2 | 86 | 2964 | 10.9 |
| PDS20 | 11 | 10858 | 2857 | 121137 | 33115 | 106 | 11011 | 100 | 100 | 3667 | 44.9 |
| PDS30 | 11 | 16148 | 4223 | 180027 | 48841 | 126 | 9717 | 204 | 114 | 4287 | 114 |
| PDS40 | 11 | 22059 | 5652 | 245848 | 65360 | 135 | 12700 | 469 | 135 | 9261 | 367 |
| PDS50 | 11 | 27668 | 7031 | 308281 | 81263 | 135 | 13603 | 718 | 138 | 8707 | 518 |
| PDS60 | 11 | 33388 | 8423 | 371945 | 97319 | 135 | 19264 | 1350 | 147 | 15577 | 1170 |
| PDS70 | 11 | 38369 | 9750 | 427663 | 12546 | 150 | 18526 | 1830 | 158 ⁽¹⁾ | 9998 | 1230 |
| PDS80 | 11 | 42472 | 10989 | 472863 | 126539 | 152 | 19701 | 2340 | 162 | 10360 | 1570 |
| PDS90 | 11 | 46161 | 12186 | 513635 | 139899 | 149 | 18644 | 2560 | 171 | 13207 | 2180 |

(1) Avís: $x^T Q x / c^T x = 1.5071 \cdot 10^{-6} > 10^{-6}$

Taula 5.11: Problemes PDS resolts amb CPLEX-11

| Problema | simplex primal | | híbrid | | simplex dual | | barrera | |
|----------|----------------|--------|--------|--------|--------------|---------------|---------|--------|
| | it | CPU | it | CPU | it | CPU | it | CPU |
| PDS1 | 567 | 0.02 | 112 | 0.02 | 180 | 0.02 | 15 | 0.02 |
| PDS5 | 3052 | 0.32 | 2170 | 0.28 | 2149 | 0.25 | 36 | 1.35 |
| PDS10 | 8409 | 0.94 | 9176 | 1.69 | 5116 | 0.88 | 33 | 7.07 |
| PDS20 | 78508 | 15.77 | 29798 | 14.30 | 17830 | 7.37 | 39 | 30.76 |
| PDS25 | 147651 | 38.08 | 38132 | 20.22 | 23774 | 13.84 | 36 | 79.8 |
| PDS30 | 298932 | 105.38 | 49264 | 34.09 | 29336 | 17.27 | 38 | 123.76 |
| PDS40 | 451783 | 331.52 | 78014 | 80.95 | 49160 | 46.25 | 38 | 191.87 |
| PDS50 | 218455 | 339.26 | 95327 | 130.32 | 62983 | 62.34 | 38 | 297.66 |
| PDS60 | 700718 | 1138.4 | 122125 | 172.54 | 73610 | 76.50 | 40 | 485.10 |
| PDS70 | 764918 | 957.4 | 154221 | 251.69 | 97271 | 99.46 | 38 | 645.24 |
| PDS80 | 828482 | 1144.8 | 197605 | 281.48 | 117281 | 138.36 | 40 | 719.63 |
| PDS90 | 864758 | 1378.3 | 197754 | 336.34 | 118797 | 139.14 | 40 | 814.56 |

Taula 5.12: Problemes Tripart i Gridgen1, $Q = it \cdot (1/\mu_0) \cdot \text{diag}(x_i/z_i)$

| Paràmetres dels problemes | | | | | | QIPM | | | RIPM | | |
|---------------------------|-----|------|-------|--------|--------|------|-------|------|------|-------|-------------|
| Nom | k | m' | n' | n | m | it | PCG | CPU | it | PCG | CPU |
| Tripart1 | 16 | 192 | 2096 | 35632 | 5168 | 58 | 1976 | 1.7 | 74 | 587 | 1.26 |
| Tripart2 | 16 | 768 | 8432 | 143344 | 20720 | 87 | 4092 | 17.3 | 142 | 2299 | 14.7 |
| Tripart3 | 20 | 1200 | 16380 | 343980 | 40380 | 90 | 6978 | 62.4 | 146 | 3236 | 42.3 |
| Tripart4 | 35 | 1050 | 24815 | 893340 | 61565 | 133 | 14660 | 265 | 151 | 2405 | 96.8 |
| Gridgen1 | 340 | 1025 | 3072 | 986112 | 331072 | 242 | 96877 | 7400 | 241 | 31280 | 2420 |

Taula 5.13: Problemes Tripart i Gridgen1 resolts amb CPLEX-11

| problema | barrera | | simplex | | | RIPM | |
|----------|---------|--------|---------|-------------|-----------|------|-------------|
| | it | CPU | it | CPU | solver | it | CPU |
| tripart1 | 21 | 3.99 | 4197 | 1.12 | dual | 74 | 1.26 |
| tripart2 | 25 | 36.01 | 58316 | 106.97 | dual | 142 | 14.7 |
| tripart3 | 28 | 138.8 | 96592 | 382.47 | dual | 146 | 42.3 |
| tripart4 | 29 | 1323.2 | 165668 | 1638.12 | dual | 151 | 96.8 |
| gridgen1 | 64 | 12288 | - | >15000 | qualsevol | 241 | 2420 |

Per les difícils instàncies Tripart i Gridgen, l'algorisme especialitzat usat en QIPM i en RIPM és el solver més eficient fins la data actual [13]; això continua sent vàlid quan comparem CPLEX-11 amb QIPM i RIPM, tal com mostra la Taula 5.13.

5.2 Problemes amb estructura angular en blocs generals

5.2.1 Instàncies dels problemes

Per els problemes que segueixen la formulació general (4.1) exposada en la Secció 4.1 hem generat dos tipus de problemes:

1. de congestió mínima en una xarxa;
2. de fluxos multiarticle no orientats.

Tots dos tipus de problemes es generen a partir d'instàncies de problemes de fluxos multiarticle orientats, explicats en la Secció 5.1.1. Les instàncies usades són un subconjunt de les llistades en la Taula 5.1, d'on s'han exclòs el problemes de dimensionalitat elevada degut a que la implementació usada per els problemes angulars en bloc utilitza un llenguatge interpretat, amb molts menors prestacions que el codi C emprat per als problemes de fluxos multiarticle orientats. En les següents seccions donem els detalls de la implementació usada així com la formulació dels problemes concrets i les característiques de les instàncies generades.

5.2.2 Detalls d'implementació

Hem usat un solver genèric, anomenat PRBLOCK_IP [16], implementat dintre de l'entorn MATLAB, amb l'excepció de les rutines de factorització de Cholesky: PRBLOCK_IP usa el paquet Ng-Peyton [45], el qual implementa l'heurística de mínim grau de permutació de files i columnes d'una matriu simètrica i esparsa que es realitza abans de la descomposició

de Cholesky per reduir el nombre d'elements no nuls. Es pot obtenir des de <http://www-eio.upc.es/~jcastro/prblock/ip.html>. PRBLOCK_IP implementa el mateix Algorisme 4.1 que el codi QIPM de les seccions anteriors, però amb alguns canvis importants que tot seguit detallem.

Recordem l'expressió de les equacions normals (4.5a), que reproduïm aquí:

$$\begin{bmatrix} B & C \\ C^T & D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta y_1 \\ \Delta y_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_1 \\ g_2 \end{bmatrix} \quad (5.5)$$

que hem vist en (4.15),(5.6) que es poden expressar com:

$$B\Delta y_1 = (g_1 - C\Delta y_2) \quad (5.6)$$

$$(D - C^T B^{-1} C)\Delta y_2 = (g_2 - C^T B^{-1} g_1) \quad (5.7)$$

A mesura que ens atensem a l'òptim, el sistema (5.7) que resollem per PCG esdevé mal condicionat, doncs hi hauran components dels vectors x , z que s'atansaran a zero, fent que les matrius Θ i D definides en (4.10) i (4.8) respectivament estiguin mal condicionades. En aquest cas la rutina de PCG pot retornar solucions inexactes. Per corregir-ho, PRBLOCK_IP resol el conjunt d'equacions normals (5.5) amb factoritzacions de Cholesky quan detecta que estem prou a prop de l'òptim i a més a més el gap dual (5.3) s'incrementa en lloc de reduir-se. Aquesta característica afecta de forma important als resultats: quan l'algorisme comença a usar exclusivament Cholesky per resoldre les equacions normals la regularització deixa de tenir efectes positius, doncs la reducció aconseguida del radi espectral de la matriu del sistema (5.7) ja no influeix en els resultats. A més, la resolució de les equacions normals esdevé molt més lenta, i per aquest motiu ens podem trobar amb el cas de que un problema resolt amb dos algorismes diferents i que han necessitat un nombre semblant d'iteracions de punt interior presentin grans diferències en els temps de CPU usats. Aquest fet ens ha servit per fer un nou test al procés de regularització: en alterar el problema original de forma que en cada iteració tenim un problema de barrera lleugerament diferent podem pensar que la pertorbació introduïda pot ocasionar més imprecisió en la resolució de (5.7) i això podria disparar prematurament la rutina alternativa que resol (5.5) exclusivament per Cholesky, fent que l'algorisme regularitzat sigui més lent que el no regularitzat, fins i tot si el primer utilitza menys nombre d'iteracions de punt interior i de gradient conjugat.

Seguint la mateixa línia de treball que per al codi QIPM, hem preparat una versió regularitzada de PRBLOCK_IP, que anomenem RPRBLOCK_IP que, a més dels paràmetres suportats per PRBLOCK_IP, admet tres nous paràmetres: el tipus de regularització (quadràtica o proximal), el factor d'escalat δ de la matriu de regularització $Q^{(k)} = \mu_k (\delta/\mu_0) \text{diag}(q)$ i un valor lògic per activar o desactivar la regularització de les variables de folga; aquest

últim paràmetre s’ha inclòs per poder verificar experimentalment les conclusions teòriques que s’han vist en la Secció 4.4.3.1, on dèiem que el més efectiu és no regularitzar les folgues. En les seccions següents confirmarem aquesta afirmació.

RPRBLOCK_IP funciona com un programa servidor: per a cada classe de problema angular en blocs, l’usuari crida a un programa client específic que carrega les dades del problema i crida al solver genèric RPRBLOCK_IP. Els problemes clients usats són MIN_CONGESTION per els problemes de congestió mínima i NONOR_QIPM per problemes multiarticle no orientats; cada un d’aquests programes client llegeixen una instància d’un problema multiarticle i el converteixen en una altra instància: de congestió mínima en el cas de MIN_CONGESTION o multiarticle no orientat en el cas de NONOR_QIPM.

Els paràmetres que s’han usat en les execucions usant regularització són els següents:

- tipus de matriu de regularització Q , prenent dos variants:
 - $Q = (\mu/\mu_0)\delta \cdot I$, on δ és un paràmetre que s’ha variat entre 10^{-8} i 1 en passes de 10, I és la matriu identitat. De nou prenem aquesta elecció simple per poder comparar els resultats obtinguts amb altres eleccions més elaborades.
 - $Q = it \cdot (\mu/\mu_0)\delta \cdot \text{diag}(x_i/z_i)$, on “*it*” és el comptador d’iteracions de punt interior de l’algorisme. Aquesta estratègia és la que millors resultats ha donat amb els problemes de fluxos multiarticle lineals, i per això la triem aquí.
- paràmetre d’escalat δ , que pren valors en l’interval $[10^{-8}, 1]$
- precisió de la rutina de gradient conjugat, *pcgtol*, prenent els valors 10^{-2} , 10^{-3} i 10^{-4}
- nombre de termes del preconditionador, *m_pw_prec*, prenent els valors 0, 1 i 2; aquest paràmetre només ha canviat el seu valor per defecte, que és *m_pw_prec* = 0, quan hem tingut problemes de convergència.

Per les execucions de les seccions següents hem usat una màquina Dell PowerEdge 6950 server amb quatre processadors dual core AMD Opteron 8222 a 3.0 GHZ, 64 Gb de RAM i 470 Mflops de capacitat de procés.

5.2.3 Problemes de congestió mínima en una xarxa de transport

5.2.3.1 Formulació

En una xarxa de transport, la congestió es produeix quan els recursos disponibles per el transport d’un flux a través de la xarxa cauen per sota del mínim necessari per cobrir les demandes degut a que s’ha arribat al màxim de la capacitat dels arcs. Si definim la ràtio de congestió de l’arc que connecta els nodes $(u, v) \in N$ de la xarxa N com el quocient

$r(u, v) = f(u, v)/c(u, v)$ del flux total de l'arc $f(u, v)$ amb la capacitat de l'arc $c(u, v)$, i d'altra banda definim la congestió d'un flux f com el màxim per a aquell flux dels ràtios de congestió per a tots els arcs, $r(f) = \max_{(u,v) \in N} r(u, v)$; llavors el problema de congestió mínima troba la solució amb mínima congestió $r(f)$ per a tots els fluxos que sigui factible: $\min_f \max_N r(u, v)$. Una formulació equivalent és la que defineix el problema de congestió mínima com el que troba el mínim increment en les capacitats dels arcs tal que el problema esdevé factible, això és, tots els fluxos de tots els articles poden ser transportats des dels orígens fins les destinacions.

D'altra banda el problema del màxim flux concurrent (MFC) és una variant del problema de fluxos multiarticle on el flux total que cal enviar de les fonts a les destinacions excedeix a la capacitat dels arcs. La ràtio $r(f)$ entre el flux proporcionat entre un parell de nodes (u, v) i la demanda predefinida per aquest parell i per aquell flux cal que sigui la mateixa per tot el conjunt de nodes $(u, v) \in N$ de la xarxa N . L'objectiu és maximitzar la ràtio $r(f)$ subjecte a les restriccions de capacitats. Tots dos problemes, el de congestió mínima i el de màxim flux concurrent, són equivalents [51]. Els problemes MFC es van introduir en [40], i es poden resoldre utilitzant tècniques de programació lineal o algorismes d'encaminament [8]. Pertanyen a aquesta categoria de problemes l'optimització del flux de trànsit en les xarxes de carreteres i de les transferències de missatges en les xarxes informàtiques de commutació de paquets.

El problema de congestió mínima es pot formular com

$$\begin{aligned}
 \min \quad & \max \{y_1, \dots, y_n\} \\
 \text{subjecte a} \quad & Nx^{i^+} - Nx^{i^-} = b^i \quad i = 1, \dots, k \\
 & \sum_{i=1}^k (x^{i^+} + x^{i^-}) \leq y_j u_j \quad j = 1, \dots, n' \\
 & x^{i^+}, x^{i^-} \geq 0 \quad i = 1, \dots, k \\
 & y_j \geq 0 \quad j = 1, \dots, n'.
 \end{aligned} \tag{5.8}$$

$N \in \mathbb{R}^{m' \times n'}$ és la matriu de la xarxa, $x^{i^+} \in \mathbb{R}^{n'}$ i $x^{i^-} \in \mathbb{R}^{n'}$ són els fluxos de l'article i segons les dues direccions possibles, $u \in \mathbb{R}^{n'}$ les capacitats dels arcs, que suposem que són les mateixes per a tots els articles, $b^i \in \mathbb{R}^{m'}$ són les entrades i sortides per l'article i , i y_j la fracció de la capacitat de l'arc j que ha de ser incrementada.

Per convertir (5.8) en un problema lineal que segueixi la formulació primal angular en blocs (4.1) definim una nova variable $z \in \mathbb{R}$ tal que $z = \max \{y_1, \dots, y_n\}$ per obtenir

5.2.3.3 Regularització amb $Q = (\mu/\mu_0)\delta \cdot I$

La Taula 5.15 resumeix les proves efectuades, mostrant l'elecció dels valors dels paràmetres corresponents al millor temps obtingut amb els algorismes de regularització quadràtica i proximal per a cada una de les instàncies. Observem que el paràmetre *pcgtol* ha pres en la majoria d'instàncies valors inferiors a 10^{-2} , que és el valor per defecte en la versió no regularitzada PRBLOCK_IP i també ha estat el valor més usat en els codis RIPM i PIPM per a problemes lineals multiarticle quan utilitzàvem la mateixa matriu de regularització en la Secció 5.1.4.1. També els valors del paràmetre δ han estat varis ordres de magnitud inferiors als usats en RIPM i PIPM. S'han marcat en negreta aquelles instàncies en les que RPRBLOCK_IP ha superat a PRBLOCK_IP, sigui en la versió de regularització quadràtica o bé en la proximal. En el problema PDS15 tenim un exemple clar de l'efecte del control sobre la reducció de μ esmentada en la Secció 5.2.2: el nombre d'iteracions de punt interior i de gradient conjugat en RPRBLOCK_IP són molt inferiors que en PRBLOCK_IP, i malgrat això el temps de CPU ha estat superior, degut a que en les últimes iteracions RPRBLOCK_IP ha usat exclusivament Cholesky, mentre que PRBLOCK_IP ha realitzat totes les iteracions de punt interior usant la combinació de gradient conjugat preconditionat i Cholesky. Excepte en PDS15, en la resta de instàncies RPRBLOCK_IP supera clarament a PRBLOCK_IP, amb avantatge per la versió amb regularització quadràtica, que és la millor en 6 de les 8 instàncies. Destaca el problema m128_64_12 en el qual les dues versions regularitzades són 4 vegades més ràpides que PRBLOCK_IP.

Taula 5.15: Problemes de congestió mínima resolts amb regularització, $Q = (\mu/\mu_0)\delta \cdot I$

| instància | Regularització quadràtica | | | | | Regularització proximal | | | | |
|------------|---------------------------|---------------|-----------|------|--------------|-------------------------|---------------|-----------|------|--------------|
| | δ | <i>pcgtol</i> | <i>it</i> | PCG | CPU | δ | <i>pcgtol</i> | <i>it</i> | PCG | CPU |
| pds1 | 10^{-8} | 10^{-2} | 27 | 48 | 1.19 | 10^{-8} | 10^{-3} | 32 | 82 | 2.33 |
| pds5 | 10^{-6} | 10^{-3} | 32 | 108 | 9.03 | 10^{-6} | 10^{-3} | 30 | 97 | 49.24 |
| pds10 | 10^{-8} | 10^{-4} | 29 | 112 | 23.55 | 10^{-8} | 10^{-4} | 30 | 113 | 208.4 |
| pds15 | 10^{-8} | 10^{-4} | 47 | 1531 | 687.7 | 10^{-8} | 10^{-4} | 81 | 3494 | 901.8 |
| m32_32_12 | 10^{-8} | 10^{-4} | 29 | 112 | 24.68 | 10^{-8} | 10^{-4} | 30 | 113 | 218.38 |
| m_64_64_12 | 10^{-8} | 10^{-4} | 28 | 131 | 12.89 | 10^{-7} | 10^{-2} | 26 | 119 | 11.99 |
| m128_64_12 | 10^{-7} | 10^{-3} | 36 | 199 | 43.182 | 10^{-8} | 10^{-3} | 29 | 195 | 36.60 |
| tripart1 | 10^{-7} | 10^{-4} | 27 | 227 | 15.56 | 10^{-3} | 10^{-2} | 34 | 158 | 80.88 |

5.2.3.4 Regularització amb $Q = it \cdot (\mu/\mu_0)\delta \cdot \text{diag}(x_i/z_i)$

Per a la segona elecció de la matriu de regularització, $Q = it \cdot (\mu/\mu_0)\delta \cdot \text{diag}(x_i/z_i)$, obtenim els resultats mostrats en la Taula 5.16, que té la mateixa estructura que la de la secció anterior. De nou la versió no regularitzada és superada en totes les instàncies excepte en els problemes

pds15. Comparant les dues versions regularitzades observem un comportament millorat per la versió amb regularització proximal, que obté resultats significativament millors en 4 de les 8 instàncies.

Taula 5.16: Problemes de congestió mínima regularitzats, $Q = it \cdot (\mu/\mu_0)\delta \cdot \text{diag}(x_i/z_i)$

| instància | Regularització quadràtica | | | | | Regularització proximal | | | | |
|------------|---------------------------|---------------|-----------|------|--------------|-------------------------|---------------|-----------|------|--------------|
| | δ | <i>pcgtol</i> | <i>it</i> | PCG | CPU | δ | <i>pcgtol</i> | <i>it</i> | PCG | CPU |
| pds1 | 10^{-7} | 10^{-4} | 23 | 76 | 1.93 | 10^{-8} | 10^{-4} | 23 | 78 | 1.95 |
| pds5 | 10^{-8} | 10^{-4} | 26 | 112 | 9.47 | 10^{-8} | 10^{-4} | 26 | 114 | 8.31 |
| pds10 | 10^{-8} | 10^{-4} | 32 | 111 | 209.8 | 10^{-8} | 10^{-4} | 29 | 113 | 20.79 |
| pds15 | 10^{-8} | 10^{-4} | 68 | 2419 | 843.2 | 10^{-8} | 10^{-4} | 55 | 1848 | 764.8 |
| m32_32_12 | 10^{-4} | 10^{-4} | 23 | 175 | 5.40 | 10^{-4} | 10^{-6} | 24 | 201 | 5.61 |
| m64_64_12 | 10^{-8} | 10^{-4} | 27 | 129 | 11.05 | 10^{-8} | 10^{-4} | 27 | 129 | 12.14 |
| m128_64_12 | 10^{-8} | 10^{-4} | 30 | 206 | 110.3 | 10^{-8} | 10^{-4} | 29 | 191 | 107.8 |
| tripart1 | 10^{-7} | 10^{-4} | 28 | 232 | 63.49 | 10^{-9} | 10^{-4} | 28 | 232 | 63.30 |

5.2.3.5 Problemes de congestió mínima resolts amb CPLEX-11

A efectes de comparació, la taula 5.17 mostra els resultats obtinguts usant el solver comercial CPLEX-11 amb les tres opcions simplex primal, simplex dual i barrera. De nou, veiem que tant RIPM com PIPM superen clarament al mètode de barrera de CPLEX, malgrat l'opció simplex d'aquest és la més eficient.

Taula 5.17: Problemes de congestió mínima resolts amb CPLEX-11

| instància | barrera | | simplex primal | | simplex dual | |
|------------|-----------|------|------------------|-------------|--------------|-------------|
| | <i>it</i> | CPU | <i>it</i> | CPU | <i>it</i> | CPU |
| xpds1 | 13 | 46.8 | 54 | 0.57 | 4 | 0.56 |
| xpds5 | 16 | 361 | 0 ⁽¹⁾ | 2.45 | 5 | 2.3 |
| xpds10 | - | >600 | 0 ⁽¹⁾ | 5.66 | 5 | 4.62 |
| pds15 | - | >600 | 5402 | 13.4 | 10484 | 85.6 |
| m32_32_12 | 11 | 197 | 21452 | 4.19 | 11910 | 15.7 |
| m64_64_12 | 12 | 525 | 20591 | 11.1 | 11463 | 16.3 |
| m128_64_12 | - | >600 | 77258 | 92.9 | 29582 | 171.4 |
| tripart1 | 18 | 422 | 5407 | 2.30 | 6139 | 11.9 |

(1) CPLEX arriba a l'òptim, però reporta 0 iteracions per motius desconeguts

5.2.3.6 Efecte de la regularització de les folgues

En aquest apartat ens proposem verificar experimentalment l'afirmació feta en la Secció 4.4.3.1 respecte a la regularització de les variables de les folgues de les restriccions d'acoblament, on hem estudiat l'efecte de regularitzar només les variables dels blocs, totes les variables, o només les variables de les folgues de les restriccions mútues; aquestes tres opcions en RPRBLOCK_IP es corresponen amb els valors 0, 1 i 2 del paràmetre *slacks_reg*, respectivament. La Taula 5.18 mostra els resultats obtinguts amb les tres possibilitats per la instància m32_32_12 usant la regularització quadràtica amb $Q = it \cdot (\mu/\mu_0)\delta \cdot \text{diag}(x_i/z_i)$, $pcgtol=10^{-4}$ i variant el factor d'escalat δ . Els mínims de temps de CPU, 7.6 segons, i de nombre d'iteracions de gradient conjugat (PCG), 170, estan assenyalats amb negreta i han estat aconseguits tots dos amb l'opció de no regularitzar les folgues; observem que hi han dos valors del nombre d'iteracions de gradient conjugat en la taula que són menors que 170, però això és així per que en les últimes iteracions el codi RPRBLOCK_IP usa exclusivament Cholesky, la qual cosa fa que el temps d'execució siguin els pitjors de tota la taula. Per valors del paràmetre δ més grans que 10^{-2} comença a notar-se l'augment del nombre d'iteracions de punt interior de l'algorisme regularitzat, com ja sabem, però veiem que en l'opció amb *slacks_reg* = 0 l'augment és més pronunciat. En l'altre extrem, per valors petits de δ les opcions que regularitzen les folgues van lleugerament millor. D'altra banda, recordem que els resultats de la Secció 4.4.3.1 es refereixen a una fita del radi espectral, no al valor real del radi espectral. En conjunt, totes les tres opcions milloren significativament els resultats obtinguts amb el codi no regularitzat PRBLOCK_IP.

Taula 5.18: Efecte de la regularització de les folgues

| δ | <i>slacks_reg</i> = 0 | | | <i>slacks_reg</i> = 1 | | | <i>slacks_reg</i> = 2 | | |
|-----------|-----------------------|------------|------------|-----------------------|-----|------|-----------------------|-----|------|
| | <i>it</i> | PCG | CPU | <i>it</i> | PCG | CPU | <i>it</i> | PCG | CPU |
| 10^{-1} | 39 ⁽¹⁾ | 146 | 15.5 | 29 ⁽²⁾ | 129 | 9.2 | 27 | 221 | 10.1 |
| 10^{-2} | 33 | 186 | 9.9 | 27 ⁽¹⁾ | 166 | 12.8 | 23 | 189 | 8.5 |
| 10^{-3} | 26 | 170 | 8.4 | 25 | 189 | 8.2 | 24 | 203 | 9.5 |
| 10^{-4} | 23 | 175 | 7.6 | 24 | 194 | 8.2 | 24 | 202 | 8.3 |
| 10^{-5} | 23 | 177 | 7.8 | 24 | 199 | 8.0 | 23 | 183 | 8.6 |
| 10^{-6} | 24 | 202 | 8.0 | 24 | 203 | 9 | 23 | 183 | 7.9 |
| 10^{-7} | 24 | 201 | 8.6 | 23 | 183 | 7.9 | 23 | 183 | 7.9 |
| 10^{-8} | 24 | 201 | 8.6 | 23 | 183 | 7.9 | 23 | 183 | 7.9 |

⁽¹⁾ En les últimes iteracions usa exclusivament Cholesky

⁽²⁾ Avís: $x^T Q x / c^T x > 10^{-6}$

5.2.4 Problemes multiarticle no orientats

5.2.4.1 Formulació

Els problemes de fluxos multiarticle no orientats permeten que, per a cada article i arc, el seu flux circuli tant en un sentit com en l'altre. Si N és la matriu d'incidència arc-node que representa la xarxa, per l'article i -èsim tenim la restricció $Nx^{i+} - Nx^{i-} = b^i$, on x^{i+} i x^{i-} representen el flux endavant i enrera, i b^i és representa la injecció o extracció de l'article en cada node de la xarxa. Matricialment el problema es pot expressar com segueix:

$$\min \sum_{i=1}^k (c^i)^T x^i$$

$$\text{subjecte a } \begin{bmatrix} N & -N & & & & & & & 0 \\ & & N & -N & & & & & 0 \\ & & & & \ddots & & & & \vdots \\ & & & & & N & -N & & 0 \\ I & -I & I & -I & \dots & I & -I & I & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_+^1 \\ x_-^1 \\ \vdots \\ x_+^k \\ x_-^k \\ x^0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b^1 \\ b^2 \\ \vdots \\ b^k \\ b^0 \end{bmatrix} \quad (5.12a)$$

$$0 \leq x_+^i, x_-^i \leq u^i \quad i = 1, \dots, k \quad (5.12b)$$

$$0 \leq x^0 \leq u^0 \quad (5.12c)$$

La formulació (5.12) es correspon amb l'estructura d'un problema angular en blocs (5.1) fent $\tilde{N} = [N \ -N]$, $\tilde{x}^i = [x^{i+} \ x^{i-}]^T$, $\tilde{L}_i = [I \ -I]$, $1 \leq i \leq k$, $\tilde{L}_0 = I$, $\tilde{x}^0 = x^0$ i reformulant el problema amb \tilde{N} , \tilde{x}^i , \tilde{L}_i , $0 \leq i \leq k$.

5.2.4.2 Descripció dels problemes test

La Taula 5.19 mostra les característiques dels problemes test que s'han provat a resoldre, usant la mateixa notació que per a les anteriors taules.

Seguint el mateix pla de treball que per als problemes de congestió mínima, en les proves efectuades s'han variat els paràmetres i s'han triat els que proporcionen el millor temps, usant els dos tipus de regularització, quadràtica i proximal per a cada una de les instàncies.

5.2.4.3 Regularització amb $Q = (\mu/\mu_0)\delta \cdot I$

La Taula 5.20 compara els resultats usant l'algorisme de regularització quadràtica i proximal prenent $Q = (\mu/\mu_0)\delta \cdot I$.

El temps obtinguts amb regularització quadràtica han estat els millors excepte en el problema m32_32_12, on l'algorisme no regularitzat ha estat el més ràpid. Algunes instàncies

Taula 5.19: Característiques dels problemes multiarticle no orientats

| Característiques | | | | | | | PRBLOCK_IP | | | |
|------------------|-----|------|-------|------|--------|--------|------------|------|--------------------|--------|
| nom | k | km | kn | l | $kn+l$ | $km+l$ | òptim | it | PCG | CPU |
| pds1 | 11 | 125 | 744 | 87 | 8271 | 1462 | 2.9084e+10 | 34 | 101 | 1.37 |
| pds5 | 11 | 685 | 4650 | 685 | 51703 | 8088 | 2.8054e+10 | 49 | 147 ₍₁₎ | 15.34 |
| pds10 | 11 | 1398 | 9584 | 1169 | 106593 | 16547 | 2.6703e+10 | 57 | 214 | 56.48 |
| pds15 | 11 | 2124 | 15512 | 1812 | 172444 | 25176 | 2.5151e+10 | 90 | 1958 | 221.11 |
| m32_32_12 | 32 | 31 | 972 | 361 | 31465 | 1353 | 4.7768e+05 | 67 | 729 | 13.14 |
| m64_64_12 | 64 | 63 | 1022 | 387 | 65795 | 4419 | 3.6593e+06 | 111 | 1130 | 53.73 |
| m128_64_12 | 64 | 127 | 2342 | 896 | 150784 | 9024 | 1.6131e+07 | 121 | 3145 | 256.5 |
| tripart1 | 16 | 191 | 4192 | 2094 | 69166 | 5150 | 6.1492e+07 | 47 | 1110 | 46.17 |

Taula 5.20: Problemes multiarticle no orientats, $Q = (\mu/\mu_0)\delta \cdot I$

| instància | Regularització quadràtica | | | | | Regularització proximal | | | | |
|------------|---------------------------|-----------|------|------|--------------|-------------------------|-----------|------|------|--------------|
| | δ | $pcgtol$ | it | PCG | CPU | δ | $pcgtol$ | it | PCG | CPU |
| pds1 | 10^{-3} | 10^{-4} | 26 | 153 | 0.73 | 10^{-3} | 10^{-4} | 26 | 153 | 0.73 |
| pds5 | 10^{-6} | 10^{-4} | 38 | 439 | 8.52 | 10^{-3} | 10^{-4} | 38 | 439 | 8.52 |
| pds10 | 10^{-6} | 10^{-4} | 45 | 961 | 42.05 | 10^{-6} | 10^{-4} | 45 | 961 | 42.05 |
| pds15 | 10^{-6} | 10^{-4} | 54 | 1027 | 152.2 | 10^{-6} | 10^{-4} | 54 | 1027 | 152.2 |
| m32_32_12 | 10^{-8} | 10^{-4} | 46 | 1631 | 14.65 | 10^{-6} | 10^{-4} | 51 | 1750 | 23.49 |
| m_64_64_12 | 10^{-8} | 10^{-4} | 58 | 2631 | 51.07 | 10^{-8} | 10^{-4} | 66 | 2841 | 63.79 |
| m128_64_12 | 10^{-6} | 10^{-4} | 66 | 5920 | 216.6 | 10^{-6} | 10^{-4} | 67 | 6562 | 242.9 |
| tripart1 | 10^{-2} | 10^{-4} | 43 | 2084 | 41.39 | 10^{-2} | 10^{-4} | 46 | 1932 | 60.67 |

usen moltes menys iteracions de gradient conjugat amb l'algorisme sense regularitzar que amb el regularitzat degut al control ja explicat sobre la reducció del gap dual quan estem a prop de l'òptim, que força a usar exclusivament la factorització de Cholesky.

Observem que, en els problemes PDS, els resultats són idèntics per a les versions amb regularització quadràtica i proximal; recordem que les equacions d'optimalitat KKT de les dues regularitzacions es diferencien només en les factibilitats duals, que és $c - z + w - A^T y$ per a la regularització proximal i $c + \mu Qx - z + w - A^T y$ per a la quadràtica, essent la diferència entre totes dues factibilitats igual a μQx ; si aquesta diferència resulta negligible llavors els dos mètodes s'han de comportar de forma molt similar. Hem comprovat aquest punt i, efectivament, el quocient $\|\mu Qx^k\| / \|c + \mu Qx - z + w - A^T y\|$ està en un interval de $(10^{-9}, 10^{-6})$ en aquests problemes i per als valors del paràmetre ν triats. A mesura que incrementem el paràmetre δ (i per tant també la matriu Q de regularització) la diferència creix i els algorismes quadràtic i proximal es comporten diferent.

5.2.4.4 Regularització amb $Q = it \cdot (\mu/\mu_0)\delta \cdot \text{diag}(x_i/z_i)$

Escollint $Q = it \cdot (\mu/\mu_0)\delta \cdot \text{diag}(x_i/z_i)$, obtenim els resultats de la Taula 5.16. Veiem que de nou hi ha igualtat entre la regularització quadràtica i la proximal per als problemes PDS, mentre que per a la resta la regularització quadràtica avantatja a la proximal. En 5 de les 8 instàncies l'algorisme regularitzat mostra millor prestacions que el no regularitzat. Comparant amb els resultats anteriors corresponents a les Taules 5.20 i 5.19 ens trobem que la versió de regularització quadràtica amb $Q = (\mu/\mu_0)\delta \cdot I$ ha estat la més eficient .

Taula 5.21: Problemes multiarticle no orientats, $Q = it \cdot (\mu/\mu_0)\delta \cdot \text{diag}(x_i/z_i)$

| instància | Regularització quadràtica | | | | | Regularització proximal | | | | |
|------------|---------------------------|---------------|-----------|------|--------------|-------------------------|---------------|-----------|------|--------------|
| | δ | <i>pcgtol</i> | <i>it</i> | PCG | CPU | δ | <i>pcgtol</i> | <i>it</i> | PCG | CPU |
| pds1 | 10^{-8} | 10^{-4} | 26 | 153 | 0.79 | 10^{-8} | 10^{-4} | 26 | 153 | 0.79 |
| pds5 | 10^{-6} | 10^{-4} | 38 | 439 | 9.62 | 10^{-6} | 10^{-4} | 38 | 439 | 9.62 |
| pds10 | 10^{-6} | 10^{-4} | 45 | 961 | 37.34 | 10^{-6} | 10^{-4} | 45 | 961 | 37.34 |
| pds15 | 10^{-6} | 10^{-4} | 54 | 1027 | 167.4 | 10^{-6} | 10^{-4} | 54 | 1027 | 167.4 |
| m32_32_12 | 10^{-6} | 10^{-4} | 46 | 1632 | 15.61 | 10^{-8} | 10^{-4} | 49 | 1850 | 20.14 |
| m_64_64_12 | 10^{-6} | 10^{-4} | 65 | 2636 | 67.36 | 10^{-6} | 10^{-4} | 62 | 3713 | 74.64 |
| m128_64_12 | 10^{-6} | 10^{-4} | 69 | 8246 | 196.8 | 10^{-6} | 10^{-4} | 69 | 5117 | 268.7 |
| tripart1 | 10^{-6} | 10^{-4} | 45 | 2018 | 62.77 | 10^{-6} | 10^{-4} | 46 | 2424 | 68.19 |

5.2.4.5 Problemes multiarticle no orientats resolts amb CPLEX-11

Com en els anteriors problemes angulars en blocs, mostrem els resultats obtinguts en usar CPLEX-11 per resoldre els problemes multiarticle no orientats amb les tres opcions simplex primal, simplex dual i barrera, en la taula 5.17. De nou, veiem que tant RIPM com PIPM superen clarament al mètode de barrera de CPLEX, malgrat l'opció simplex d'aquest és la més eficient.

Taula 5.22: Problemes no orientats amb CPLEX-11

| instància | barrera | | simplex primal | | simplex dual | |
|------------|-----------|-------|----------------|-------------|--------------|--------------|
| | <i>it</i> | CPU | <i>it</i> | CPU | <i>it</i> | CPU |
| pds1 | 19 | 5.26 | 621 | 0.58 | 120 | 1.01 |
| pds5 | 23 | 143.7 | 50277 | 11.3 | 2414 | 2.62 |
| pds10 | 23 | 438.9 | 151565 | 37.5 | 6444 | 6.32 |
| pds15 | - | >600 | 278954 | 90.0 | 10953 | 11.42 |
| m32_32_12 | 23 | 2.67 | 19828 | 3.24 | 1943 | 0.65 |
| m64_64_12 | 17 | 64.9 | 153646 | 72.9 | 11547 | 6.37 |
| m128_64_12 | 21 | 341.1 | - | >600 | 26722 | 26.4 |
| tripart1 | 16 | 40.4 | 36919 | 6.69 | 7712 | 5.76 |

Capítol 6

Conclusions i àrees de possible recerca

En els capítols precedents hem introduït una nova tècnica de regularització numèrica, en dues variants, i l'hem implementat en algorismes de punt interior per a programació lineal. En aquest capítol es resumeix les conclusions que se'n deriven i es presenten les possibles ampliacions i línies de treball futur. Finalment s'exposaran les presentacions i publicacions que són conseqüència del treball de tesi realitzat.

6.1 Conclusions

Del treball prèviament desenvolupat en podem extreure les següents conclusions:

- De l'observació d'un millor comportament computacional d'un algorisme de punt interior per a problemes de fluxos multiarticle en xarxes quan en la funció objectiu hi figuren termes quadràtics s'ha formulat un nou mètode consistent en regularitzar la funció de barrera afegint un terme quadràtic, per tal d'aprofitar el fet empíric observat.
- S'ha realitzat un estudi teòric del nou mètode a fi i efecte d'assegurar la seva convergència i preveure les seves propietats per poder efectuar les implementacions pràctiques. En aquest sentit, s'han formulat teoremes per confirmar l'existència del camí central regularitzat i conèixer la convergència a l'òptim del problema lineal original, la complexitat del nou mètode i els rangs de valors útils que pot prendre el terme de regularització quadràtica.
- S'ha implementat el nou mètode en un algorisme de seguiment del camí primal-dual per a programació lineal, i s'ha comprovat la convergència del mètode així com el rang de valors útils del terme de regularització quadràtica.
- Quan hem implementat la regularització quadràtica en un algorisme de punt interior per a problemes de fluxos multiarticle en xarxes hem comprovat que el nou mètode

es mostra clarament més eficient que l'original, especialment en problemes d'elevada dimensionalitat i complexitat; tenint en compte que aquest es considera en el moment d'escriure aquestes línies com el millor mètode de punt interior per a problemes multiarticle, podem afirmar que la regularització quadràtica forma part a partir d'ara del estat-de-l'art en el camp.

- S'ha implementat també el mètode en un algorisme especialitzat per a problemes angulars en blocs generals. Malgrat que en aquest cas la regularització quadràtica no s'ha mostrat tan superior com en el cas de problemes de fluxos multiarticle, obtenim també millores significatives respecte al mètode no regularitzat, i per tant el mètode és competitiu.
- Per poder comparar l'eficiència de la regularització, hem implementat un algorisme de regularització proximal dintre de les implementacions per a problemes de fluxos multiarticle i per a problemes angulars en blocs generals. Els resultats obtinguts amb aquest algorisme són en general inferiors als proporcionats per la regularització quadràtica. Tanmateix, comparant amb el mètode original no regularitzat, la regularització proximal obté bons resultats.
- S'han verificat experimentalment les afirmacions enunciades en el desenvolupament formal del mètode.

6.2 Ampliacions i línies de treball futur

Pel que s'ha presentat durant els capítols anteriors és evident que el treball no està completat, en el sentit de que tenim encara línies de treball obertes que poden oferir noves millores en l'eficiència del mètode. Les detallem tot seguit:

- Pel que fa al terme de regularització quadràtica, una ampliació molt desitjable és obtenir una Q adaptativa que prengui valors relacionats amb el problema que es resol, si és possible fer-ho, o si més no aconseguir-ho fins a cert punt. Això implica tant una recerca teòrica, relacionant els teoremes de convergència i de complexitat exposats en aquesta memòria amb els paràmetres de cada problema, com una part pràctica, que pot ser des de la simple verificació de resultats experimentals fins un estudi estadístic ampli dels paràmetres que millor resultat donen en la pràctica. Un altre possibilitat per obtenir una Q adaptativa ve del fet d'observar que introduir un terme quadràtic $\mu x^T Q x$ equival a introduir una restricció del tipus $\|x\|_Q \leq \Delta$ per a alguna constant positiva, la qual cosa suggereix dos possibles camins de recerca: el primer és usar un algorisme de regió de garantia (*trust-region algorithm*) que en cada iteració limiti la passa dintre d'una certa regió modificant la matriu Q , mentre que el segon camí és

adaptar el valor de Q segons les limitacions imposades sobre x per les restriccions de frontera $x \leq u$.

- Hem vist que la implementació per a problemes angulars en blocs generals, que usa l'entorn Matlab, no s'ha mostrat tant eficient com la dels problemes de fluxos multiarticle, programada en C. Un possible motiu pot ser l'ús de l'entorn Matlab pel primer, així com alguns detalls d'implementació que poden penalitzar al mètode de regularització. Una línia d'actuació al respecte és programar una classe C++ que implementi l'algorisme regularitzat que ara està en Matlab, posant especial atenció en aquells aspectes de la implementació que poden beneficiar a la regularització, per així intentar assolir la mateixa eficiència que hem obtingut per els problemes de fluxos multiarticle.
- Un altre línia de treball és l'aplicació de la regularització quadràtica a problemes no lineals separables.
- En quant als resultats teòrics, s'han presentat resultats sobre la disminució de la fita del radi espectral de la matriu usada en la rutina de gradient conjugat preconditionat, no sobre el radi pròpiament dit. Una tasca a realitzar és, per tant, aprofundir en el coneixement de com afecta la regularització quadràtica als valors propis d'aquella matriu. Això ens podria proporcionar valors inicials de la matriu de regularització quadràtica més efectius.
- L'aproximació successiva del problema regularitzat quadràticament al problema lineal ve controlada per el paràmetre de barrera μ i algunes heurístiques. D'aquestes, la més reeixida ha usat el comptador d'iteracions per suavitzar el descens de μ i prolongar l'efecte de la regularització. Un estudi més profund de la relació entre la disminució, iteració a iteració, del terme de regularització quadràtica i el nombre final d'iteracions de punt interior i de gradient conjugat ens pot proporcionar una heurística millor.
- Les heurístiques esmentades no s'han verificat formalment: manca incorporar als teoremes de convergència l'efecte de multiplicar el terme de regularització quadràtica Q per el comptador d'iteracions, entre altres heurístiques.
- Hi han altres famílies de problemes amb estructura angular en blocs, com ara els que es comenten en la introducció del capítol 5, per els que encara no tenim l'algorisme especialitzat regularitzat. L'experiència que tenim amb el treball realitzat indica que podem aconseguir bons resultats resolent aquests problemes.
- Ampliant més el camp d'acció, per els casos de fluxos multiarticle no lineals que puguin tractar-se per aproximacions lineals, està per provar l'efectivitat de la regularització quadràtica.

- De més ampli abast, i per llarg termini, està la possibilitat d'estudiar la millora de l'eficiència de les rutines de gradient conjugat preconditionat en algorismes de punt interior basats en el sistema augmentat a través de regularitzacions.

6.3 Publicacions i presentacions realitzades com a conseqüència del treball de tesi

Conforme hem anat desenvolupant el treball de recerca s'han elaborat algunes publicacions i s'han realitzat presentacions en congressos directament relacionades amb la tesi, que tot seguit detallem ordenades cronològicament.

Revistes.

- Castro, J., Cuesta, J.: Quadratic regularizations in an interior-point method for primal block-angular problems. Research Report DR 2008-07, Dept. of Stat. and Operations Research, UPC, Barcelona (2008). Condicionalment acceptat a Mathematical Programming, subjecte a revisió.
- Castro, J., Cuesta, J.: Improving an interior-point algorithm for multicommodity flows by quadratic regularizations, working paper, to be submitted to Networks.

Presentacions en conferències i seminaris.

- Castro, J., Cuesta, J.: Improving an interior-point algorithm for multicommodity flows by quadratic regularizations, Invited presentation, International Network Optimization Conference 2009, Pisa (Italia), abril 2009
- Castro, J., Cuesta, J.: Mejora de métodos iterativos en algoritmos de punto interior a través de regularizaciones cuadráticas, XXXI Congreso Nacional de Estadística e Investigación Operativa, Murcia, (España), febrer 2009.
- Castro, J., Cuesta, J.: Improving iterative solvers in IPMs for structured problems through quadratic regularizations, Invited presentation, International Conference on Applied Mathematical Programming and Modelling APMOD, Bratislava (República Eslovaca), maig 2008.
- Castro, J., Cuesta, J.: Improving preconditioners in interior-point methods for optimization through quadratic regularizations, 2007 International Conference On Preconditioning Techniques For Large Sparse Matrix Problems In Scientific And Industrial Applications, Toulouse (França), juliol 2007.

- Castro, J., Cuesta, J.: Quadratic regularizations in an interior-point method based on iterative solvers, Applied Mathematical Programming and Modelling APMOD 2006, Madrid (España), juny 2006.

Glossari de símbols

| | |
|--|---|
| (x^*, y^*, z^*) | valor de l'òptim primal-dual |
| $\mathcal{O}()$ | ordre de complexitat d'un algorisme |
| τ | paràmetre del camí central primal-dual C , $x_i z_i = \tau$, $i = 1, \dots, n$ si $(x, z) \in C$ |
| X | matriu que té els elements del vector x en la seva diagonal i zeros en la resta |
| \mathbb{R}^n | l'espai dels vectors real n -dimensionals |
| \mathbb{R}_+^n | subespai real n -dimensional $\{x \in \mathbb{R}^n \mid x \geq 0\}$ |
| $\mathbb{R}^{m \times n}$ | el conjunt de matrius reals de dimensions $m \times n$ |
| $\ \cdot\ , \ \cdot\ _2$ | norma euclídea: per $u \in \mathbb{R}^n$, $\ u\ = (u^T u)^{1/2}$ |
| e | $(1, 1, \dots, 1)^T$ |
| A, b, c | matriu de restriccions i vectors de disponibilitats i de costos, respectivament |
| \mathcal{F} | conjunt factible $\{(x, y, z) \mid Ax = b, A^T y + z - \mu Qx = c, (x, z) \geq 0\}$ |
| \mathcal{F}^0 | conjunt factible estricte $\{(x, y, z) \mid Ax = b, A^T y + z - \mu Qx = c, (x, z) > 0\}$ |
| μ | paràmetre de la barrera logarísmica, igual a $x^T z / n$ |
| $(x^{(k)}, y^{(k)}, z^{(k)})$ | valor de les variables primals i duals en la k -èsima iteració d'un algorisme |
| $(\Delta x^{(k)}, \Delta y^{(k)}, \Delta z^{(k)})$ | valor de les passes primals i duals en la k -èsima iteració d'un algorisme |
| x^i | en un problema angular en blocs, variable primal corresponent al bloc i -èsim |
| (x^*, y^*, z^*) | valor del òptim primal-dual |
| d | vector que s'usa com a direcció de moviment |
| Q | matriu diagonal definida positiva, usada en el terme quadràtic de l'objectiu |
| $Q_{(k)}$ | valor de la matriu de regularització en la k -èsima iteració d'un algorisme |
| Q_i | valor de la matriu de regularització corresponent a l' i -èsim bloc, $1 \leq i \leq k$ |
| q_k | valor del vector de regularització en la k -èsima iteració d'un algorisme |
| $diag(q)$ | matriu que té els elements del vector q en la seva diagonal i zeros en la resta |
| δ | factor d'escalat de la matriu de regularització quadràtica |
| α_p, α_d | llargades de les passes primal i dual respectivament |
| σ | paràmetre de centrat en un algorisme de seguiment del camí primal-dual |
| r_b, r_c | residus primal i dual, respectivament |
| u, U | vector de fites superiors, $x \leq u$, i matriu $U = diag(u)$ |
| ρ | radi espectral d'una matriu |

| | |
|---------------------------------------|--|
| ν_F | paràmetre de la barrera auto-concordant F |
| M_f | constant de la funció auto-concordant f |
| f'_d, f''_d, f'''_d | derivades direccionals succesives de la funció real f segons la direcció d |
| $N_i \in \mathbb{R}^{m_i \times n_i}$ | en un problema angular en bloc, restriccions de les variables primals |
| $L_i \in \mathbb{R}^{l \times n_i}$ | en un problema angular en bloc, restriccions d'acoblament de les variables primals |

Bibliografia

- [1] Ali, A., Kennington, J.L.: Mnetgen Program Documentation. Technical Report 77003. Department of Industrial Engineering and Operations Research, Southern Methodist University, Dallas (1977)
- [2] Altman, A., Gondzio, J.: Regularized symmetric indefinite systems in interior point methods for linear and quadratic optimization. *Optimization Methods Software* 11, 275–302 (1999)
- [3] Aster, R., Borchers, B., Clifford, T.: *Parameter Estimation and Inverse Problems*, Elsevier, Amsterdam (2004)
- [4] Babonneau, F., du Merle, O., Vial, J.-P.: Solving large-scale linear multicommodity flow problems with an active set strategy and proximal-ACCPM. *Annals of Operations Research* 54, 184–197 (2006)
- [5] Babonneau, F., Beltran, C., Haurie, A., Tadonki, C., Vial, J.-P.: Proximal-ACCPM: A Versatile Oracle Based Optimisation Method. *Advances in Computational Management Science* 9, 67-89 (2007)
- [6] Bienstock, D., Raskina, O.: Asymptotic analysis of the flow deviation method for the maximum concurrent flow problem. *Mathematical Programming*, 91, 479–492 (2002)
- [7] Bienstock, D.: *Approximately Solving Large-Scale Linear Programs. I: Strengthening Lower Bounds and Accelerating Convergence*. CORC Report 1999–1, Columbia University, New York (1999)
- [8] Biswas, J., Matula, D.W.: Two flow routing algorithms for the maximum concurrent flow problem. *Proceedings of 1986 ACM Fall joint computer conference*, p.629-636, Dallas (1986)
- [9] Bixby, R.E.: Solving real-world linear programs: a decade and more of progress. *Annals of Operations Research* 50, 3–15 (2002)

-
- [10] Carolan, W.J., Hill, J.E., Kennington, J.L., Niemi, S., Wichmann, S.J.: An empirical evaluation of the KORBX algorithms for military airlift applications. *Annals of Operations Research* 38, 240-248 (1990)
- [11] Castro, J.: A specialized interior-point algorithm for multicommodity network flows. *SIAM Journal Optimization* 10, 852–877 (2000)
- [12] Castro, J.: Solving quadratic multicommodity problems through an interior-point algorithm. In: E.W. Sachs, R. Tichatschke (eds.) *System Modelling and Optimization XX*, 199-212, Kluwer, Boston (2003)
- [13] Castro, J.: Solving difficult multicommodity problems through a specialized interior-point algorithm. *Annals of Operations Research* 124, 35–48 (2003)
- [14] Castro, J.: Quadratic interior-point methods in statistical disclosure control. *Computational management science* 2, 107-121 (2005)
- [15] Castro, J.: Minimum-distance controlled perturbation methods for large-scale tabular data protection. *European Journal of Operational Research*, Volume 171, Issue 1, 39-52 (2006)
- [16] Castro, J.: An interior-point approach for primal block-angular problems. *Computational Optimization and Applications*, 36, 195-219 (2007)
- [17] Castro, J., Nabona, N.: An implementation of linear and nonlinear multicommodity network flows, *European Journal of Operational Research* 92 , 37–53 (1996).
- [18] Chardaire P., Lisser A.: Simplex and interior point specialized algorithms for solving nonoriented multicommodity flow problems. *Annals of Operations Research* 50, 260–276 (2002)
- [19] Cox, L.H.: On properties of multi-dimensional statistical tables. *Journal of Statistical Planning and Inference* 117(2),251–273 (2003)
- [20] Czyzyk, J., Mehrotra, S., Wagner, M., Wright, S.J.: PCx: An interior-point code for linear programming. *Optimization Methods Software* 11/12, 97-430 (1999)
- [21] Dantzig B.,G., Mukund N.,T.: *Linear Programming: 2: Theory and Extensions*. Springer Series in Operations Research, New York (2003)
- [22] du Merle. O., Vial, J.-P.: Proximal ACCPM, a cutting plane method for column generation and Lagrangian relaxation: application to the p-median problem. Technical report, Logilab, University of Geneva, Geneva (2002)

-
- [23] Fiacco, A. V., McCormick, G. P.: Nonlinear programming: Sequential Unconstrained Minimization Techniques. Classics In Applied Mathematics series. SIAM, Philadelphia (1990)
- [24] Ford, L.R., Fulton D.R.: A suggested computations for maximal multicommodity networks flows. *Management Science* 5, 97-101 (1958)
- [25] Frangioni, A., Gallo, G.: A bundle type dual-ascent approach to linear multicommodity min cost flow problems, *INFORMS Journal on Computing* 11 , 370–393 (1999).
- [26] Friedlander, M. P., Tseng, P.: Exact Regularization of Convex Programs. *SIAM Journal on Optimization*, Volume 18, Issue 4, 1326-1350 (2007)
- [27] Goffin, J., Vial, J.: On the computation of weighted analytic centers and dual ellipsoids with the projective algorithm. *Mathematical Programming* 60:81–92 (1993)
- [28] Golub, G.H., Van Loan, C.F.: *Matrix Computations*, Third Edition., Johns Hopkins Univ. Press, Baltimore (1996)
- [29] Güler, O., Ye, Y.: Convergence behavior of some interior-point algorithms. *Mathematical Programming* 60, 215-228 (1993)
- [30] Gondzio, J., Makowski, M.: Solving a class of LP problems with a primal-dual logarithmic barrier method. *European Journal of Operational Research* 80, 184–192 (1995)
- [31] Hadamard, J.: Sur les problèmes aux dérivées partielles et leur signification physique. *Princeton University Bulletin* 49-52 (1902)
- [32] Hansen, P., Jaumard, B.: Cluster Analysis and Mathematical Programming. *Mathematical Programming* 79, 191-215 (1997)
- [33] Karmarkar, N.: A New Polynomial-Time Algorithm for Linear Programming. *Combinatorica* 4, 373-395 (1984)
- [34] Krarup, J., Pruzan, P.: The simple plant location problem: survey and synthesis. *European J. Oper. Res.* 12, 36-81 (1983)
- [35] Kennington, J.L.: A Survey of Linear Cost Multicommodity Network Flows. *Operations Research* 26(2), 209-236 (1978)
- [36] Kelley, C.T.: *Iterative Methods for Linear and Nonlinear Equations*. SIAM, Philadelphia (1995)
- [37] Lemaire, B.: The proximal algorithm. *New methods in optimization and their industrial uses*. *Internat. Schriftenreihe Numer. Math.* vol. 87. Birkhäuser, Basel (1989)

-
- [38] Liqun, Q., Xiaojun, Ch.: A preconditioning proximal Newton method for nondifferentiable convex optimization. *Mathematical Programming* 76, 411-429 (1997)
- [39] Mangasarian, O. L., Meyer, R R.: *Nonlinear Perturbation of Linear Programs*. SIAM Journal of Optimization. Vol. 17, No. 6 (1979)
- [40] Matula, D. W.: *Concurrent flow and concurrent connectivity on graphs. Graph theory with applications to algorithms and computer science*, John Wiley & Sons, Inc., New York (1985)
- [41] Mehrotra, S.: On the implementation of a primal-dual interior point method. *SIAM Journal of Optim.* 2, 575-601 (1992)
- [42] Moureau, J.J. : Proximité et dualité dans un espace Hilbertien. *Bulletin de la Societé de Mathématique de France*, 93, 273-299 (1965)
- [43] Nesterov, Y.: *Introductory Lectures on Convex Optimization: A Basic Course*. Springer, Netherlands (2003)
- [44] Nocedal, J., Wright, S.: *Numerical Optimization*. Springer, New York (1999)
- [45] Ng, E., Peyton, B.W.: Block sparse Cholesky algorithms on advanced uniprocessor computers. *SIAM Journal Science Computer* 14, 1034-1056 (1993)
- [46] Ouorou, A., Mahey M, Vial, J.-Ph.: A survey of algorithms for convex multicommodity flow problems. *Management Science* 46, 126–147 (2000)
- [47] Rauf, A. I., Fukushima, M.: Globally convergent BFGS method for nonsmooth convex optimization. *Journal of Optimization, Theory and Applications*, 104, 539 - 558 (2000)
- [48] Sadiq, G. :The Multifleet routing problem. Massachusetts Institute of Technology, Dept. of Aeronautics and Astronautics. Thesis. Massachusetts (1978)
- [49] Saunders, M. A., Tomlin, J. A.: Solving regularized linear programs using barrier methods and KKT systems. Report SOL 96-4, Dept. of EESOR, Stanford University, Stanford (1996)
- [50] Setiono, R.: Interior Proximal Point Algorithm for Linear Programs. *Journal of Optimization Techniques and Applications* 74 (1992)
- [51] Shahrokhi, F., Matula, D.W.: The maximum concurrent flow problem, *Journal of the Association for Computing Machinery (ACM)* 37, 318–334 (1990)
- [52] Boyd, S., Vandenberghe, L.: *Convex Optimization*. Cambridge University Press, Cambridge (2004)

-
- [53] Tikhonov, A.N., Goncharsky, A., Stepanov, V.V., Yagola, A.G.: Numerical Methods for the solution of ill posed problems. Springer New York (1995)
- [54] Tomlin, J.A.: Minimum-cost multicommodity network flows. *Annals of Operations Research* 14, 45-51 (1966)
- [55] Rockafellar, R.T.: Monotone Operators and the Proximal Point Algorithm. *SIAM Journal on Control and Optimization* 14, 877-898 (1976)
- [56] Vanderbei, R.J.: Symmetric Quasidefinite Matrices. *SIAM Journal of Optimization* 5, 100-113 (1995)
- [57] Vanderbei, R.J.: LOQO User's Manual. *Optimization Methods and Software* 12, 485-514 (1999)
- [58] Vaidyanathan, B., Jha, K. C., Ahuja, R. K.: Multicommodity network flow approach to the railroad crew-scheduling problem. *IBM Journal of Research and Development* 51, 325 - 344 (2007)
- [59] Wright, M.H.: Interior Methods for constrained optimization. *Acta Numerica* 1992, Cambridge University Press, 341-407, Cambridge(1992)
- [60] Wright, S.J.: Primal-Dual Interior-Point Methods. SIAM, Philadelphia (1997)
- [61] Zhang, Y.: User's guide to LIPSOL. Dept. of Mathematics and Statistics, University of Maryland, Baltimore (1995)

Índex alfabètic

- algorisme
 - de punt interior, 31
 - de regió de garantia, 118
 - de regularització proximal, 36
 - de regularització quadràtica, 53
 - Levenberg-Marquardt, 28
 - passa curta, 16
 - passa llarga, 16
 - primal-dual, 31
 - punt proximal, 30
- barrera
 - auto-concordant, 34
 - logarítmica, 12
 - regularitzada, 34
- camí central, 9, 10, 15, 16
- Cholesky, 54, 64, 110
- condicions KKT, 8
- costos lineals, 8
- embolcall proximal, 29
- equacions
 - de factibilitat i complementarietat, 23
 - de Newton, 37
 - de restriccions dels blocs, 62
 - de restriccions mútues, 62
 - del camí central, 15, 41
 - Karush-Kuhn-Tucker, 8
 - KKT, 10, 17, 31, 54, 62, 81
 - KKT, problema regularitzat proximal, 36
 - no lineals, 10, 47
 - normals, 24, 54, 62, 105
 - sistema augmentat, 24
- factible
 - estricta, 11
 - punt, 8
 - regió, 8
- fites
 - generalitzades GUB, 77
 - GUB ponderades, 77
 - superiors, 33
- funció
 - auto-concordant, 47
 - auto-concordant estàndard, 47
 - convexa, 28
 - de barrera, 11
 - de barrera auto-concordant, 47
 - de barrera logarítmica, 33
 - de barrera proximal, 36
 - de penalització, 11
 - quadràtica de penalització, 20
- gap dual, 9, 15
 - relatiu, 9, 22, 89
- Hadamard, 27
- Lagrangiana, 8
- mètode
 - ACCPM, 32
 - ACCPM proximal, 32
 - barrera, 9
 - de Newton, 10
 - de punt interior, 9

- de punt interior primal-dual, 10
- de seguiment del camí, 10
- del gradient conjugat preconditionat, 62, 64
- escalat afí, 9
- infectible, 16
- Lagrangiana augmentada, 20
- penalització quadràtica, 20
- transformacions projectives, 9
- matriu
 - d'incidència arc-node, 60, 113
 - de regularització, 110
- Mehrotra, 54
- multiplicadors de Lagrange, 8
- optimització
 - convexa, 8, 28
 - estructural, 46
 - fluxos en una xarxa, 60
- paràmetre
 - de barrera, 12, 35, 47
 - de penalització, 20
- passa
 - correcció, 18
 - Newton, 18
 - predicció, 18
- problema
 - ben formulat, 27
 - congestió mínima, 60, 109
 - de barrera regularitzada, 33
 - de congestió mínima, 4
 - dual, 8
 - fluxos multiarticle, 4, 32
 - fluxos multiarticle no orientats, 4, 113
 - invers, 27
 - lineal, 33
 - màxim flux concurrent, 60
 - mínims quadrats, 28
 - minimum distance controlled tabular, 61
 - multicommodity network flow, 60
 - P-mediana, 32
 - primal, 8
 - primal block-angular, 2
 - primal-dual, 8
 - protecció de dades tabulades, 61
 - quadràtic, 19
 - quadràtic convex, 21
- programació
 - lineal, 30
 - quadràtica, 20
- regularització
 - exacte, 28
 - Moureau-Yosida, 29
 - numèrica, 28, 31
 - proximal, 32
 - quadràtica, 32, 113
 - Tikhonov, 28
- restriccions, 8
 - capacitat mútua, 78
 - d'acoblament, 60
 - mútues, 59, 112
- sistema augmentat, 24, 31