Metody optymalizacji. Wykład 4

Funkcje wypukłe, c.d.

Zajmiemy się najpierw kryteriami wypukłości funkcji kwadratowych w $\mathbb{R}^n$.

Definicja 1 *Symetryczną macierz B o wymiarze $n \times n$ nazywamy*

- *nieujemnie określoną, jeśli dla każdego $x \in \mathbb{R}^n$ mamy $(x, Bx) \geq 0$,*
- *dodatnio określoną, jeśli dla każdego $x \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$ mamy $(x, Bx) > 0$.*

Nietrudno sprawdzić, że macierz B jest nieujemnie (dodatnio) określona wtedy i tylko wtedy, gdy wszystkie jej wartości własne są nieujemne (dodatnie).

Twierdzenie 1 *Niech B będzie macierzą symetryczną o wymiarze $n \times n$ i niech $c \in \mathbb{R}^n$. Dla $x \in \mathbb{R}^n$ niech $\phi(x) = (x, Bx) + (c, x)$. Wtedy*

a) funkcja ϕ jest wypukła w $\mathbb{R}^n$ wtedy i tylko wtedy, gdy macierz B jest nieujemnie określona,

b) funkcja ϕ jest ściśle wypukła w $\mathbb{R}^n$ wtedy i tylko wtedy, gdy macierz B jest dodatnio określona.

Dowód. a) Dla dowolnych $x, y \in \mathbb{R}^n$, $\alpha \in [0, 1]$,

$$\phi(\alpha x + (1-\alpha)y) = (\alpha x + (1-\alpha)y, B(\alpha x + (1-\alpha)y)) + (c, \alpha x + (1-\alpha)y)$$
$$= \alpha^2 (x, Bx) + 2\alpha(1-\alpha)(x, By) + (1-\alpha)^2 (y, By) + \alpha(c, x) + (1-\alpha)(c, y),$$

$$\alpha\phi(x) + (1-\alpha)\phi(y) = \alpha(x, Bx) + (1-\alpha)(y, By) + \alpha(c, x) + (1-\alpha)(c, y),$$

więc

$$\begin{aligned}
\phi(\alpha x + (1-\alpha)y) - \alpha\phi(x) - (1-\alpha)\phi(y) \ &= \ \alpha^2 (x, Bx) + 2\alpha(1-\alpha)(x, By) \\
&\quad + (1-\alpha)^2 (y, By) - \alpha(x, Bx) - (1-\alpha)(y, By) \\
&= -\alpha(1-\alpha)(x, Bx) + 2\alpha(1-\alpha)(x, By) - \alpha(1-\alpha)(y, By) \\
&= -\alpha(1-\alpha)\Big((x, Bx) - 2(x, By) + (y, By)\Big) \\
&= -\alpha(1-\alpha)(x-y, B(x-y)) = -\alpha(1-\alpha)(z, Bz), \qquad (1)
\end{aligned}$$

gdzie $z = x - y$. Na mocy (1), funkcja ϕ jest wypukła wtedy i tylko wtedy, gdy $(z, Bz) \geq 0$ dla każdego $z \in \mathbb{R}^n$.

b) Funkcja ϕ jest ściśle wypukła wtedy i tylko wtedy, gdy dla dowolnych $x, y \in \mathbb{R}^n$, $x \neq y$, $\alpha \in (0, 1)$, lewa strona (1) jest ujemna, co ma miejsce wtedy i tylko wtedy, gdy $(z, Bz) > 0$ dla każdego $z \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$. $\square$

W dalszym ciągu będziemy potrzebować następującej ważnej "geometrycznej" charakteryzacji wypukłości funkcji różniczkowalnej.

Twierdzenie 2 *Niech $X \subseteq \mathbb{R}^n$ będzie otwarty i wypukły i niech $\phi : X \to \mathbb{R}$ będzie różniczkowalna w X. Wtedy ϕ jest wypukła wtedy i tylko wtedy, gdy dla dowolnych $x, y \in X$,*

$$(\nabla\phi(x), y - x) \leq \phi(y) - \phi(x). \tag{2}$$

Innymi słowy, różniczkowalna funkcja ϕ jest wypukła wtedy i tylko wtedy, gdy jej wykres leży nad dowolną hiperpłaszczyzną styczną do jej wykresu. Np. dla $n = 1$, warunek (2) przybiera postać $\phi(y) \geq \phi(x) + \phi'(x)(y - x)$. Przy ustalonym x, prawa strona ostatniej nierówności, jako funkcja y, przedstawia styczną do wykresu funkcji $y = \phi(x)$ w punkcie x.

Dowód. Jeśli ϕ jest wypukła, to dla dowolnych $x, y \in X$, $x \neq y$, $\alpha \in [0, 1]$, mamy

$$\phi(x+\alpha(y-x)) = \phi((1-\alpha)x+\alpha y) \leq (1-\alpha)\phi(x)+\alpha\phi(y) = \phi(x)+\alpha(\phi(y)-\phi(x)). \tag{3}$$

Połóżmy $\beta = \alpha||y - x||$, $s = \frac{y-x}{||y-x||}$. Wtedy z (3) dostajemy

$$||y - x|| \frac{\phi(x + \beta s) - \phi(x)}{\beta} = \frac{\phi(x + \alpha(y - x)) - \phi(x)}{\alpha} \leq \phi(y) - \phi(x).$$

Przy ustalonych x, y i $\beta \downarrow 0$ (czyli $\alpha \downarrow 0$), otrzymujemy

$$||y - x|| \frac{\partial\phi}{\partial s}(x) \leq \phi(y) - \phi(x). \tag{4}$$

Ale $\frac{\partial\phi}{\partial s}(x) = (\nabla\phi(x), s) = \frac{1}{||y-x||}(\nabla\phi(x), y - x)$, zatem z (4) dostajemy (2).

Na odwrót, jeśli (2) zachodzi dla dowolnych $x, y \in X$, to przy $z = \alpha x + (1 - \alpha)y$, mamy

$$\begin{aligned}(\nabla\phi(z), x - z) &\leq \phi(x) - \phi(z),\\ (\nabla\phi(z), y - z) &\leq \phi(y) - \phi(z).\end{aligned}$$

Mnożąc pierwszą z tych nierówności przez $\alpha \in [0, 1]$, drugą przez $1 - \alpha$, i dodając stronami, dostajemy

$$\begin{aligned} 0 &= (\nabla\phi(z), 0) = (\nabla\phi(z), \alpha x + (1 - \alpha)y - z) \\ &= \alpha(\nabla\phi(z), x - z) + (1 - \alpha)(\nabla\phi(z), y - z) \\ &\leq \alpha\phi(x) + (1 - \alpha)\phi(y) - \phi(z), \end{aligned}$$

a zatem funkcja ϕ jest wypukła. □

Własności ekstremalne funkcji wypukłych

Definicja 2 *Niech* $f : X \to \mathbb{R}$. *Mówimy, że punkt* $x^* \in X$ *jest optymalny (dla zadania minimalizacji* f *na* X*), jeśli* $f(x^*) \leq f(x)$ *dla każdego* $x \in X$*, tzn.* $f(x^*) = \min_{x \in X} f(x)$. *Zapisujemy ten fakt w formie* $x^* = \arg\min\{f(x), x \in X\}$.

Rozpoczniemy następującym twierdzeniem, bardzo ułatwiającym znajdowanie (np. numeryczne) minimów funkcji wypukłych.

Twierdzenie 3 *Niech* $\emptyset \neq X \subseteq \mathbb{R}^n$ *będzie zbiorem wypukłym i niech* $\phi : X \to \mathbb{R}$ *będzie funkcją wypukłą. Załóżmy, że* ϕ *ma minimum lokalne w punkcie* $x^* \in X$. *Wtedy* x^* *jest punktem optymalnym.*

Dowód. Załóżmy, że istnieje $x' \in X$ taki, że $\phi(x') < \phi(x^*)$. Niech $x_\alpha = \alpha x^* + (1-\alpha)x'$ dla $\alpha \in (0,1)$. Wtedy

$$\phi(x_\alpha) \leq \alpha\phi(x^*) + (1-\alpha)\phi(x') < \alpha\phi(x^*) + (1-\alpha)\phi(x^*) = \phi(x^*). \tag{5}$$

Ale przy $\alpha \uparrow 1$, $x_\alpha \to x^*$, więc (5) przeczy temu, że x^* jest minimum lokalnym ϕ. □

Odpowiednik twierdzenia 3 dla funkcji niewypukłych jest oczywiście fałszywy.

Twierdzenie 4 *Jeśli zbiór* X *jest wypukły i funkcja* $\phi : X \to \mathbb{R}^n$ *jest wypukła, to zbiór punktów optymalnych*

$$X^* = \{x^* \in X : \phi(x^*) = \min_{x \in X} \phi(x)\}$$

jest wypukły.

Dowód. Niech $\lambda = \min_{x \in X} \phi(x)$. Zauważmy, że

$$X^* = \{x^* \in X : \phi(x^*) \leq \lambda\}.$$

Zatem X^* jest wypukły na mocy lematu 1 z poprzedniego wykładu. □

Twierdzenie 5 *Jeśli, przy założeniach twierdzenia 4, funkcja* ϕ *jest ściśle wypukła, to* X^* *składa się z co najwyżej jednego punktu.*

Dowód. Załóżmy, że $x', x'' \in X^*$, $x' \neq x''$. Niech $\tilde{x} = \frac{1}{2}(x' + x'')$. Wtedy $\tilde{x} \in X$ z wypukłości X, a ponadto

$$\phi(\tilde{x}) < \frac{1}{2}(\phi(x') + \phi(x'')) = \frac{1}{2} \cdot 2 \min_{x \in X} \phi(x) = \min_{x \in X} \phi(x),$$

co daje sprzeczność. □

Uwaga. Na ogół zbiór X^* może być pusty, np. w przypadku $X = \mathbb{R}$ i ściśle wypukłej funkcji $\phi(x) = e^x$, $x \in \mathbb{R}$.

Podstawy programowania matematycznego

Podstawowe zadanie programowania matematycznego

Niech f_i, $i = 1, ..., m$, będą funkcjami rzeczywistymi, określonymi na $\mathbb{R}^n$. Niech

$$X = \{x \in \mathbb{R}^n : f_i(x) \geq 0,\ i = 1, ..., m\}. \tag{6}$$

Niech $\phi : X \to \mathbb{R}$. Zadanie minimalizacji ϕ na X będziemy nazywać *podstawowym zadaniem programowania matematycznego.* Za rozwiązanie tego problemu uważamy:

1) znalezienie punktu optymalnego $x^* = \arg\min\{\phi(x), x \in X\}$ (jeszcze lepiej byłoby znaleźć wszystkie takie punkty, ale w praktycznych zastosowaniach często wystarczy jeden),

2) albo, jeśli $\phi^* = \inf\{\phi(x), x \in X\}$ nie jest na zbiorze X osiągnięte, znalezienie ϕ^* (w szczególności, sprawdzenie, że $\phi^* = -\infty$),

3) albo sprawdzenie, że $X = \emptyset$ (w tym przypadku zadanie nazywamy *sprzecznym*).

Jeśli X i ϕ są wypukłe, zadanie powyższe nazywamy *zadaniem programowania wypukłego.*

Jeśli wszystkie funkcje f_i z (6) są wklęsłe, to zbiór $\{x : f_i(x) \geq 0\}$ jest wypukły dla każdego $i = 1, ..., m$ (patrz lemat 1 z poprzedniego wykładu), zatem $X = \bigcap_{i=1}^m \{x : f_i(x) \geq 0\}$ jest wypukły. Jeśli prócz tego ϕ jest wypukła, to zadanie minimalizacji ϕ na X nazywamy *podstawowym zadaniem programowania wypukłego.*

Terminologia. Zbiór X dany przez (6) nazywamy *zbiorem dopuszczalnym*, a jego elementy - *punktami (programami) dopuszczalnymi.* Nierówności $f_i(x) \geq 0$ w (6) nazywamy *ograniczeniami.* Punkt $x^* = \arg\min\{\phi(x) : x \in X\}$ nazywamy *punktem optymalnym*, *rozwiązaniem* lub *minimum globalnym.*

Kierunki dopuszczalne

Definicja 3 *Niech $s \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$. Kierunek $-s$ nazywamy możliwym (dopuszczalnym) w punkcie $x \in X$, jeśli istnieje $\beta_0 > 0$ takie, że dla dowolnego $\beta \in [0, \beta_0]$ mamy $x - \beta s \in X$.*

Intuicyjnie, kierunek $-s$ jest dopuszczalny w x jeśli "idąc" z punktu x w tym kierunku nie wyjdziemy natychmiast ze zbioru dopuszczalnego. Oczywiście jeśli $x \in int(X)$, to każdy kierunek jest dopuszczalny w x.

Przykład. Niech $n = 2$, $X = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 : y \geq 0\}$ (górna półpłaszczyzna) i niech $x = (0, 0)$. Jeśli $s = (s_1, s_2) \neq 0$, to $-s = (-s_1, -s_2)$ jest dopuszczalny w x wtedy i tylko wtedy, gdy $-s_2 \geq 0$, czyli $s_2 \leq 0$.

Definicja 4 *Niech X będzie dane przez* (6). *Ograniczenie $f_i(x) \geq 0$ nazywamy aktywnym w punkcie $x \in X$, jeśli $f_i(x) = 0$.*

Niech $I(x) = \{i : f_i(x) = 0\}$ będzie zbiorem indeksów ograniczeń aktywnych w punkcie $x \in X$.

W dalszym ciągu zakładamy, że $f_i \in C^1$, $i = 1, ..., m$, $\phi \in C^1$ (tzn. f_i, ϕ mają ciągłe pochodne cząstkowe pierwszego rzędu).

Podamy teraz kilka rezultatów pomocniczych, prowadzących do głównego twierdzenia 6, które jest najważniejszym wynikiem w tej sekcji.

Lemat 1 *Jeśli przy ustalonym $x \in X$, wektor $s \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$ spełnia układ nierówności*

$$(\nabla f_i(x), s) + \sigma \leq 0, \qquad i \in I(x), \tag{7}$$

przy pewnym $\sigma > 0$, to kierunek $-s$ jest dopuszczalny w x.

Dowód. Jeśli $I(x) = \emptyset$, to $x \in int(X)$, a zatem dowolny kierunek jest w tym punkcie dopuszczalny.

Załóżmy, że $I(x) \neq \emptyset$. Jeśli $-s$ nie jest dopuszczalny w x, to dla pewnego $i \in I(x)$ i dowolnie małego $\beta > 0$, mamy $f_i(x - \beta s) < 0$ (zauważmy, że dla $i \notin I(x)$ i $\beta > 0$ dostatecznie małego, $f_i(x - \beta s) > 0$ na mocy ciągłości f_i, więc i-te ograniczenie jest spełnione). Ale $f_i(x) = 0$ dla $i \in I(x)$, więc

$$\frac{f_i(x - \beta s) - f_i(x)}{-\beta} = \frac{f_i(x) - f_i(x - \beta s)}{\beta} > 0.$$

Stąd przy $\beta \downarrow 0$ dostajemy $\frac{\partial f_i}{\partial s}(x) = (\nabla f_i(x), s) \geq 0$, co przeczy (7). □

Stwierdzenie odwrotne do lematu 1 jest na ogół fałszywe. Mamy jednak następującą częściową odwrotność tego lematu.

Lemat 2 *Jeśli kierunek $-s \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$ jest dopuszczalny w punkcie $x \in X$, to istnieje takie $\sigma \geq 0$, że para s, σ spełnia* (7).

Dowód. Jeśli teza lematu jest fałszywa, to

$$(\nabla f_i(x), s) > 0 \tag{8}$$

dla pewnego $i \in I(x)$. Ale dla dostatecznie małego $\beta > 0$, na mocy (8),

$$\begin{aligned} -f_i(x - \beta s) &= f_i(x) - f_i(x - \beta s) = \beta \frac{\partial f_i}{\partial s}(x) + o(\beta) \\ &= \beta(\nabla f_i(x), s) + o(\beta) > 0, \end{aligned}$$

a zatem $f_i(x - \beta s) < 0$ i $-s$ nie jest kierunkiem dopuszczalnym w x, co daje sprzeczność. $\square$

Uwaga. Użyty powyżej symbol $o(\beta)$ oznacza "nieskończenie małą rzędu większego niż β", tzn. wielkość zależną od β, która po podzieleniu przez β dąży do zera przy $\beta \downarrow 0$. Jest to tzw. *notacja Landaua*.

Lemat 3 *Niech X będzie dany przez (6) i niech $x \in X$ będzie lokalnym minimum funkcji ϕ na X. Załóżmy, że $s \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$ i $\sigma \in \mathbb{R}$ spełniają układ nierówności*

$$(\nabla f_i(x), s) + \sigma \leq 0, \qquad i \in I(x), \tag{9}$$

$$-(\nabla \phi(x), s) + \sigma \leq 0. \tag{10}$$

Wtedy $\sigma \leq 0$.

Dowód. Załóżmy, że w (9)-(10) mamy $\sigma > 0$. Na mocy lematu 1 kierunek $-s$ jest dopuszczalny w x. Z (10) dostajemy $(\nabla \phi(x), s) \geq \sigma > 0$. Zatem, ponieważ $\phi \in C^1$, dla dostatecznie małego $\beta > 0$, $(\nabla \phi(x - \beta s), s) > 0$ i $x - \beta s \in X$ z dopuszczalności $-s$ w x. Stąd i z twierdzenia Lagrange'a o wartości średniej, dla pewnego $\theta \in (0, 1)$,

$$\phi(x) - \phi(x - \beta s) = \beta \frac{\partial f_i}{\partial s}(x - \theta\beta s) = \beta(\nabla \phi(x - \theta\beta s), s) > 0,$$

a więc x nie może być będzie lokalnym minimum funkcji ϕ na X. $\square$

Twierdzenie 6 *Jeśli $x \in X$ jest lokalnym minimum funkcji ϕ na X i wektory $\nabla f_i(x)$, $i \in I(x)$, są liniowo niezależne, to istnieją liczby $u_i \geq 0$, $i \in I(x)$, takie, że*

$$\nabla \phi(x) = \sum_{i \in I(x)} u_i \nabla f_i(x). \tag{11}$$

Dowód tego rezultatu podamy na następnym wykładzie.