ROZDZIAŁ 2

Warunki istnienia minimum

By dojśc do źródła trzeba płynąć pod prąd.

Stanisław Jerzy Lec

Przedmiotem tego rozdziału będą warunki, przy których funkcja $f : \mathbb{R}^n \supseteq X \longrightarrow \mathbb{R}$ określona w pewnym obszarze X osiąga swoje minimum. Podamy warunki konieczne istnienia minimum i warunki wystarczające na to, aby funkcja osiągała swoje minimum. Niektóre z nich dotyczą minimum globalnego, inne zaś – minimum lokalnego.

2.1 Podstawowe warunki istnienia minimum

W tym ustępie rozważamy zadanie minimalizacji w postaci abstrakcyjnej

$$\begin{array}{rl} \text{minimalizować} & f(x) \\ \text{względem} & x \in X, \end{array}$$

gdzie X jest pewnym podzbiorem przestrzeni $\mathbb{R}^n$, przy czym nie zakładamy różniczkowalności funkcji f. Podamy warunki wystarczające na to, aby istniało rozwiązanie optymalne tego zadania. Podamy również warunki konieczne osiągania minimum funkcji f w ustalonym punkcie. Na początek przypomnijmy znane z analizy matematycznej twierdzenie Weierstrassa.

Twierdzenie 2.1.1 (Weierstrass) *Funkcja ciągła określona na zbiorze zwartym osiąga minimum.*

Następne twierdzenie jest w istocie prostym wnioskiem z twierdzenia Weierstrassa.

Twierdzenie 2.1.2 *Jeśli funkcja $f : \mathbb{R}^n \supseteq X \longrightarrow \mathbb{R}$ jest ciągła i przynajmniej jedna jej niepusta podpoziomica jest zwarta, to osiąga ona minimum globalne.*

Dowód. Przypuśćmy, że dla pewnego $\alpha \in \mathbb{R}$ podpoziomica $S(f, \alpha)$ jest zbiorem niepustym i zwartym. Na mocy twierdzenia Weierstrassa funkcja $f\big|_{S(f,\alpha)}$ osiąga minimum globalne. Jest jasne, że minimum to jest również minimum globalnym funkcji f. ■

Podamy teraz inny warunek wystarczający osiągania minimum globalnego.

Twierdzenie 2.1.3 *Jeśli funkcja $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ jest ciągła i koercytywna (tzn. $\lim_{\|x\|\to\infty} f(x) = +\infty$), to osiąga ona minimum globalne.*

Dowód. Niech $m = \inf_{x\in\mathbb{R}^n} f(x)$ i niech $\{x_k\}_{k=1}^{\infty}$ będzie ciągiem elementów przestrzeni $\mathbb{R}^n$ takim, że $m = \lim_k f(x_k)$. Ciąg ten jest oczywiście ograniczony, gdyż w przeciwnym przypadku istniałby jego podciąg $\{x_{n_k}\}_{k=1}^{\infty}$ o normach dążacych do $+\infty$ i, wobec koercytywności funkcji f, otrzymalibyśmy wówczas $\lim_k f(x_{n_k}) = +\infty$. Ponieważ z ciągu ograniczonego $\{x_k\}_{k=1}^{\infty}$ można wybrać podciąg $\{x_{m_k}\}_{k=1}^{\infty}$ zbieżny do pewnego punktu $x^* \in \mathbb{R}^n$, więc $m = \lim_k f(x_{m_k}) = f(x^*)$, gdyż f jest funkcją ciągłą. Zatem f osiąga minimum w punkcie x^*. ■

Twierdzenie 2.1.4 *Jeśli funkcja ściśle wypukła $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ osiąga minimum, to minimizer tej funkcji jest określony jednoznacznie.*

Dowód. Przypuśćmy, że f jest funkcją ściśle wypukłą osiągającą minimum w punkcie x^*. Niech $m = f(x^*)$. Gdyby funkcja f osiągała minimum w punkcie $x' \neq x^*$, to

$$m \leq f(\frac{1}{2}x^* + \frac{1}{2}x') < \frac{1}{2}f(x^*) + \frac{1}{2}f(x') = m.$$

Otrzymaliśmy sprzeczność, co dowodzi, że minimizer funkcji f jest określony jednoznacznie. ■

Wniosek 2.1.5 *Funkcja mocno wypukła osiąga minimum dokładnie w jednym punkcie.*

Dowód. Wniosek pokażemy przy założeniu, że f jest różniczkowalna, chociaż jest on prawdziwy również bez tego założenia. Jest jasne, że funkcja mocno wypukła jest ściśle wypukła. Ponadto jest ona koercytywna. Istotnie. Niech $x \in \mathbb{R}^n$ będzie ustalonym punktem. Na mocy twierdzenia 1.7.25(iii) mamy

$$f(y) \geq f(x) + \nabla f(x)^T(y - x) + \frac{1}{2}c\|y - x\|^2$$

dla każdego $y \in \mathbb{R}^n$, gdzie $c > 0$ jest modułem mocnej wypukłości funkcji f. Teraz już nietrudno zauważyć, że prawa strona ostatniej nierówności dąży do $+\infty$, gdy $\|y\| \to \infty$ (wystarczy w tym celu skorzystać z nierówności Cauchy'ego–Schwarza). Wobec tego $\lim_{\|y\|\to\infty} f(y) = +\infty$, czyli funkcja f jest koercytywna. Wobec tego wniosek wynika z twierdzenia 2.1.3. ■

Założenie o koercytywności funkcji f w twierdzeniu 2.1.3 jest istotne. Aby to zauważyć wystarczy rozpatrzyć funkcję $f : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$, $f(x) = e^x$.

Ćwiczenie 2.1.6 Niech $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ będzie funkcją wypukłą i niech $\lambda > 0$. Pokazać, że wzór

$$F_\lambda(x) = \min_{y\in\mathbb{R}^n}[f(y) + \frac{1}{2\lambda}\|x - y\|^2]$$

definiuje pewną funkcję, $F_\lambda : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, tzn. minimum istnieje i jest jednoznacznie określone. Funkcja ta nosi nazwę *regularyzacji Yosidy–Moreau* funkcji f lub *splotu infinitezymalnego* (ang. *infimal convolution*) funkcji f i $\frac{1}{2\lambda}\|\cdot\|^2$.

Uwaga 2.1.7 Z praktycznego punktu widzenia ważna jest również informacja, jak daleko dany punkt y znajduje się od minimizera (o ile taki istnieje). Oszacowanie odległości danego punktu y od minimizera x^* można łatwo wyznaczyć dla funkcji różniczkowalnej mocno wypukłej. Z warunku koniecznego osiągania minimum (twierdzenie2.2.1) mamy bowiem $\nabla f(x^*) = 0$. Wobec tego z nierówności (1.29) wynika, że

$$f(y) - f(x^*) \geq \frac{1}{2}c\|y - x^*\|^2 \tag{2.1}$$

skąd otrzymujemy

$$\|y - x^*\| \leq \sqrt{2\frac{f(y) - f^*}{c}} \leq \sqrt{2\frac{f(y) - \underline{f}}{c}}, \tag{2.2}$$

gdzie $\underline{f} \leq f^*$ jest dowolnym dolnym oszacowaniem wartości optymalnej f^*. W niektórych zagadnieniach minimalizacji takie oszacowanie jest znane. Jeśli jednak go nie znamy, to możemy jeszcze inaczej oszacować odległość $\|y - x^*\|$. Z nierówności (1.29) wynika bowiem również

$$f(x^*) - f(y) \geq \nabla f(y)^T (x^* - y) + \frac{1}{2} c \|y - x^*\|^2. \tag{2.3}$$

Po dodaniu stronami nierówności (2.1) i (2.3) i po skorzystaniu z nierówności Schwarza otrzymamy

$$\begin{aligned} 0 &\geq \nabla f(y)^T (x^* - y) + c\|y - x^*\|^2 \\ &\geq -\|\nabla f(y)\| \cdot \|x^* - y\| + c\|y - x^*\|^2, \end{aligned}$$

skąd wynika prosto, że

$$\|y - x^*\| \leq \frac{\|\nabla f(y)\|}{c}. \tag{2.4}$$

Oszacowanie (2.2) jest zazwyczaj lepsze niż (2.4), szczególnie wtedy, gdy $\underline{f}$ dobrze przybliża wartość optymalną f^*. Reasumując, otrzymamy

$$\|y - x^*\| \leq \min\{\sqrt{2(f(y) - \underline{f})/c}, \|\nabla f(y)\|/c\}.$$

Podobne oszacowania przysługują dowolnej funkcji mocno wypukłej (niekoniecznie różniczkowalnej). W tym przypadku należy zastąpić gradient funkcji f przez jej tzw. subgradient. Szczegóły pomijamy.

Teraz przejdziemy do warunków koniecznych i warunków wystarczających na to, aby funkcja osiągała swoje minimum w ustalonym punkcie $x^* \in \mathbb{R}^n$. Jeśli funkcja jest wypukła, to warunkiem wystarczającym osiągania minimum globalnego w punkcie x^* jest osiąganie minimum lokalnego w tym punkcie. Zachodzi mianowicie następujące twierdzenie.

Twierdzenie 2.1.8 *Jeśli funkcja wypukła $f : X \longrightarrow \mathbb{R}$, gdzie $X \subseteq \mathbb{R}^n$ jest podzbiorem wypukłym, osiąga w punkcie x^* minimum lokalne, to osiąga ona w tym punkcie minimum globalne. Jeśli ponadto funkcja f jest ściśle wypukła, to jej minimizer jest określony jednoznacznie.*

Dowód. Niech $X \subseteq \mathbb{R}^n$ będzie podzbiorem wypukłym. Przypuśćmy, że funkcja wypukła $f : \mathbb{R}^n \supseteq X \longrightarrow \mathbb{R}$ osiąga w punkcie $x^* \in X$ minimum lokalne. Gdyby punkt ten nie był minimizerem globalnym funkcji f, to istniałby punkt $x' \in X$, dla którego $f(x') < f(x^*)$. Niech $x_\lambda = (1 - \lambda)x^* + \lambda x'$ dla $\lambda \in (0, 1)$. Oczywiście $x_\lambda \in X$, gdyż X jest wypukły. Wówczas dla dowolnego $\lambda \in (0, 1)$ zachodziłyby nierówności

$$f(x_\lambda) \leq (1 - \lambda)f(x^*) + \lambda f(x') < f(x^*),$$

co stałoby w sprzeczności z tym, że f osiąga minimum lokalne w punkcie x^*, gdyż $\lim_{\lambda \downarrow 0} x_\lambda = x^*$. Jednoznaczność minimizera funkcji ściśle wypukłej wynika z twierdzenia 2.1.4. ■

Twierdzenie 2.1.9 *Niech $x^* \in \mathbb{R}^n$ i niech $s \in \mathbb{R}^n$, Jeśli funkcja $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ posiada pochodną kierunkową $f'(x^*, s)$ i f osiąga w punkcie x^* minimum lokalne, to $f'(x^*, s) \geq 0$.*

Dowód. Z założeń twierdzenia i z definicji pochodnej kierunkowej otrzymujemy

$$f(x^*) \leq f(x^* + ts) = f(x^*) + tf'(x^*, s) + o(t)$$

dla odpowiednio małego $t > 0$. W konsekwencji,

$$f'(x^*, s) + \frac{o(t)}{t} \geq 0.$$

Przechodząc w powyższej równości do granicy przy $t \downarrow 0$ otrzymujemy tezę twierdzenia. ■

Przy pewnych dodatkowych założeniach dotyczących pochodnej kierunkowej twierdzenie powyższe jest prawdziwe również dla funkcji określonej na podzbiorze $X \subseteq \mathbb{R}^n$.

Twierdzenie 2.1.10 *Niech $X \subseteq \mathbb{R}^n$, $x^* \in X$ i niech $s \in T_X(x^*)$. Załóżmy, że funkcja $f : X \longrightarrow \mathbb{R}$ posiada w punkcie x^* pochodne kierunkowe $f'(x^*, u)$ w dowolnym kierunku dopuszczalnym $u \in T_X(x^*)$, przy czym funkcja $f'(x^*, \cdot)$ jest ciągła w punkcie s. Jeśli f osiąga w punkcie x^* minimum lokalne, to $f'(x^*, s) \geq 0$.*

Dowód. Niech x^* będzie minimizerem lokalnym funkcji f oraz niech $X \ni x_k \to x^*$ i $t_k \downarrow 0$ będą ciągami takimi, że $s = \lim_k s_k$, gdzie $s_k = \frac{x_k - x^*}{t_k}$. Z założeń twierdzenia i z definicji pochodnej kierunkowej otrzymujemy

$$f(x^*) \leq f(x_k) = f(x^* + t_k s_k) = f(x^*) + t_k f'(x^*, s_k) + o(t_k)$$

dla odpowiednio małego $t_k > 0$. W konsekwencji,

$$f'(x^*, s_k) + \frac{o(t_k)}{t_k} \geq 0. \tag{2.5}$$

Ponieważ funkcja $f'(x^*, \cdot)$ jest ciągła w punkcie s, więc $\lim_{k\to\infty} f'(x^*, s_k) = f'(x^*, s)$. Zatem przechodząc w równości (2.5) do granicy przy $k \to \infty$ otrzymujemy tezę twierdzenia. ■

Wniosek 2.1.11 *Niech $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ będzie funkcją różniczkowalną w sensie Gâteaux i niech $X \subseteq \mathbb{R}^n$. Jeśli funkcja $f|_X$ osiąga w punkcie $x^* \in X$ minimum lokalne, to $s^T \nabla f(x^*) \geq 0$ dla dowolnego kierunku $s \in T_X(x^*)$.*

Dowód. Na mocy różniczkowalności f w sensie Gâteaux mamy $f'(x, s) = s^T \nabla f(x^*)$, zatem funkcja $f'(x, \cdot)$ jest ciągła na $\mathbb{R}^n$. Zatem wniosek wynika bezpośrednio z twierdzenia. 2.1.10 ■

Twierdzenia odwrotne do twierdzeń 2.1.9-2.1.10 i do wniosku 2.1.11 nie są prawdziwe. Wystarczy w tym celu rozpatrzyć funkcje $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, $f(x) = x^3$ i $x^* = 0$. Jeśli natomiast w twierdzeniu 2.1.10 założymy, że f jest funkcją wypukłą określoną na zbiorze wypukłym X, to twierdzenie to można w pewnym sensie odwrócić.

Twierdzenie 2.1.12 *Niech $X \subseteq \mathbb{R}^n$ będzie zbiorem wypukłym zaś $f : X \longrightarrow \mathbb{R}$ będzie funkcją wypukłą i niech $x^* \in X$. Jeśli $f'(x^*, x - x^*) \geq 0$ dla dowolnego punktu $x \in X$, to funkcja f osiąga w punkcie x^* minimum.*

Dowód. Przypuśćmy, że $f'(x^*, x - x^*) \geq 0$ dla dowolnego punktu $x \in X$ i że funkcja f nie osiąga minimum w punkcie x^*. Wówczas istnieje punkt $x' \in X$, taki że $f(x') < f(x^*)$. Niech

$x_k = (1-\frac{1}{k})x^* + \frac{1}{k}x'$. Oczywiście $x_k \in X$, gdyż X jest zbiorem wypukłym. Z definicji pochodnej kierunkowej, z wypukłości funkcji f otrzymujemy wówczas

$$\begin{aligned} f'(x^*, x'-x^*) &= \lim_{k\to+\infty} \frac{f(x^* + \frac{1}{k}(x'-x^*)) - f(x^*)}{1/k} \\ &= \lim_{k\to+\infty} \frac{f(x_k) - f(x^*)}{1/k} \\ &\le \lim_{k\to+\infty} \frac{(1-\frac{1}{k})f(x^*) + \frac{1}{k}f(x') - f(x^*)}{1/k} \\ &= f(x') - f(x^*) < 0 \end{aligned}$$

Otrzymana sprzeczność dowodzi prawdziwości twierdzenia. ■

Wniosek 2.1.13 *Niech $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ będzie funkcją wypukłą różniczkowalną i niech $x^* \in \mathbb{R}^n$. Wówczas f osiąga minimum w punkcie $x^* \in \mathbb{R}^n$ wtedy i tylko wtedy, gdy x^* jest jej punktem stacjonarnym, czyli $\nabla f(x^*) = 0$.*

Dowód. Jeśli funkcja f osiąga minimum w punkcie x^*, to na mocy twierdzenia 2.1.10 $s^T\nabla f(x^*) \ge 0$ dla dowolnego $s \in \mathbb{R}^n$. Nietrudno stąd wywnioskować, że $s^T\nabla f(x^*) = 0$ dla dowolnego $s \in \mathbb{R}^n$. Jest to jednak możliwe tylko wówczas, gdy $\nabla f(x^*) = 0$. Niech teraz $\nabla f(x^*) = 0$. Ponieważ dla dowolnego $s \in \mathbb{R}^n$ mamy $f'(x^*, s) = s^T\nabla f(x^*) = 0$, więc z twierdzenia 2.1.12 wynika, że f osiąga minimum w punkcie x^*. ■

2.2 Warunki istnienia minimum dla zadań różniczkowalnych bez ograniczeń

W tym ustępie interesować nas będą problem minimalizacji różniczkowalnej bez ograniczeń postaci

$$\begin{array}{ll} \text{minimalizować} & f(x) \\ \text{względem} & x \in \mathbb{R}^n, \end{array}$$

gdzie $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ jest co najmniej jednokrotnie różniczkowalna. Poznamy warunki konieczne i warunki wystarczające istnienia minimum w ustalonym punkcie.

Twierdzenie 2.2.1 (warunki konieczne osiągania minimum) *Niech funkcja $f : \mathbb{R}^n \supseteq X \longrightarrow \mathbb{R}$ określona w obszarze otwartym $X \subseteq \mathbb{R}^n$ będzie różniczkowalna w punkcie $x^* \in X$.*

(i) *Jeśli f osiąga w punkcie x^* minimum lokalne, to x^* jest punktem stacjonarnym funkcji f, czyli*

$$\nabla f(x^*) = 0$$

(*warunek konieczny rzędu pierwszego*).

(ii) *Jeśli ponadto f jest funkcją klasy C_2 w pewnym otoczeniu punktu x^*, to hesjan funkcji f w punkcie x^* jest określony nieujemnie, czyli*

$$\forall_{s \in \mathbb{R}^n} \quad s^T \nabla^2 f(x^*) s \geq 0,$$

(*warunek konieczny rzędu drugiego*).

Dowód. Niech f będzie różniczkowalna w punkcie x^* i niech f osiąga minimum w tym punkcie.

(i) Na mocy twierdzenia 1.5.9 mamy $f'(x^*, s) = s^T \nabla f(x^*)$. Z twierdzenia 2.1.9 wynika zatem, że

$$s^T \nabla f(x^*) \geq 0$$

dla dowolnego $s \in \mathbb{R}^n$. Stąd łatwo otrzymujemy, że $\nabla f(x^*) = 0$ (w przeciwnym wypadku, dla $s = -\nabla f(x^*)$ otrzymalibyśmy $s^T \nabla f(x^*) < 0$).

(ii) Załóżmy, że f jest klasy C_2 w kuli $B(x^*, r) \subseteq X$ dla pewnego $r > 0$. Niech wektor $s \in \mathbb{R}^n$ będzie dowolny. Rozwijając funkcję f we wzór Taylora z resztą Lagrange'a dla $k = 2$ w otoczeniu punktu x^*, otrzymamy dla pewnego $\lambda \in (0, 1)$ i dla t, takiego że $\|ts\| \leq r$:

$$f(x^* + ts) = f(x^*) + ts^T \underbrace{\nabla f(x^*)}_{=0} + \frac{1}{2} t^2 s^T \nabla^2 f(x^* + \lambda ts) s \geq f(x^*).$$

Stąd

$$s^T \nabla^2 f(x^* + \lambda ts) s \geq 0.$$

W granicy przy t dążącym do zera otrzymamy, na mocy ciągłości hesjanu $\nabla^2 f(x)$ w punkcie x^*, nierówność

$$s^T \nabla^2 f(x^*) s \geq 0.$$

Oznacza to, że hesjan $\nabla^2 f(x^*)$ jest nieujemnie określony. ■

Twierdzenie 2.2.2 (warunki wystarczające osiągania minimum) *Niech funkcja $f : \mathbb{R}^n \supseteq X \longrightarrow \mathbb{R}$ określona w obszarze otwartym $X \subseteq \mathbb{R}^n$ będzie klasy C_2 w pewnym otoczeniu punktu $x^* \in X$. Jeśli*

(i) *x^* jest punktem stacjonarnym funkcji f, czyli*

$$\nabla f(x^*) = 0$$

oraz

(ii) *hesjan $\nabla^2 f(x^*)$ jest określony dodatnio, czyli*

$$\forall_{s\in\mathbb{R}^n, s\neq 0} \quad s^T \nabla^2 f(x^*) s > 0,$$

to funkcja f osiąga w punkcie x^* minimum lokalne izolowane.

Dowód. Niech f będzie funkcją klasy C_2 na kuli $B(x^*, r) \subseteq X$ dla pewnego $r > 0$. Rozwińmy f we wzór Taylora z resztą Peana dla $k = 2$ w otoczeniu punktu x^*. Dla wektora d, takiego że $\|d\| \leq r$ mamy

$$f(x^* + d) = f(x^*) + d^T \underbrace{\nabla f(x^*)}_{0} + \frac{1}{2} d^T \nabla^2 f(x^*) d + o(\|d\|^2)$$

Ponieważ hesjan $G^* = \nabla^2 f(x^*)$ jest określony dodatnio, więc, na mocy wniosku 1.4.14, istnieje stała $\lambda > 0$, taka że $d^T \nabla^2 f(x^*) d \geq \lambda \|d\|^2$. Mamy zatem

$$f(x^* + d) - f(x^*) \geq \frac{1}{2}\lambda\|d\|^2 + o(\|d\|^2) = [\frac{1}{2}\underbrace{\lambda}_{>0} + \underbrace{\frac{o(\|d\|^2)}{\|d\|^2}}_{\to 0 \text{ dla } d\to 0}] \cdot \|d\|^2.$$

Dla dostatecznie małych wektorów $d \neq 0$ otrzymamy więc

$$f(x^* + d) - f(x^*) > 0,$$

czyli x^* jest izolowanym minimum lokalnym. ■

Przykład 2.2.3 (liniowe zadanie najmniejszych kwadratów) Dany jest układ równań $Ax = b$, gdzie A jest macierzą typu $m \times n$, zaś $b \in \mathbb{R}^m$, przy czym nie zakładamy, że układ ten posiada rozwiązanie. W wielu zastosowaniach rozważa się następujące liniowe zadanie najmniejszych kwadratów

$$\begin{array}{ll} \text{minimalizować} & f(x) = \frac{1}{2}\|Ax - b\|^2 \\ \text{względem} & x \in \mathbb{R}^n. \end{array} \tag{2.6}$$

Gradient funkcji f ma postać

$$\nabla f(x) = A^T(Ax - b).$$

Ponieważ funkcja f jest wypukła (uzasadnić), więc warunkiem koniecznym i wystarczającym osiągania miniumum jest

$$A^T A x = A^T b.$$

Równanie to nazywa się *równaniem normalnym*. Z poniższych rozważań wynika, że ma ono zawsze rozwiązanie. Rozpatrzmy kilka przypadków:

(a) $\mathrm{r}(A) = \mathrm{r}(A, b)$. Wówczas, na mocy twierdzenia Kroneckera–Capellego istnieje rozwiązanie układu $Ax = b$. W tym przypadku zbiór rozwiązań układu jest podprzestrzenią afiniczną (uzasadnić) i pokrywa się ze zbiorem minimizerów funkcji f. Minimalna wartość funkcji celu wynosi 0. Zobaczymy później, że w przypadku, gdy $\mathrm{r}(A) = m$, rozwiązaniem o najmniejszej normie zadania (2.6) jest $x = A^T(AA^T)^{-1}b$ (przykład 2.3.26). Zauważmy, że dla macierzy A o pełnym rzędzie wierszowym, $A^T(AA^T)^{-1}$ jest jej macierzą *pseudoodwrotną Moore'a–Penrose'a*, czyli jedyną macierzą A^+ spełniającą warunki $AA^+A = A$, $A^+AA^+ = A^+$, $(AA^+)^T = AA^+$ i $(A^+A)^T = A^+A$. Pozostawiamy czytelnikowi sprawdzenie tego faktu. W podobny sposób rozpatruje się przypadek $\mathrm{r}(A) = \mathrm{r}(A, b) < m$. Wystarczy w tym celu pozostawić $\mathrm{r}(A)$ liniowo niezależnych równań i usunąć pozostałe.

(b) $\mathrm{r}(A, b) > \mathrm{r}(A)$. Wówczas układ $Ax = b$ nie posiada rozwiązań. Jeśli ponadto $r(A) = n$, to kolumny macierzy A są liniowo niezależne, czyli macierz $A^T A$ jest nieosobliwa, więc jedynym rozwiązaniem równania normalnego, a więc i zadania (2.6) jest

$$x = (A^T A)^{-1} A^T b.$$

Analogicznie do rozumowania w punkcie (a), dla macierzy A o pełnym rzędzie kolumnowym, $(A^T A)^{-1} A^T$ jest jej *macierzą pseudoodwrotną Moore'a–Penrose'a, czyli* $x = A^+ b$. Zauważmy przy okazji, że funkcja f jest mocno wypukła, bo $A^T A$ jest określona dodatnio (por. ćwiczenie 1.7.13(c)), skąd również wynika, że zadanie (2.6) ma dokładnie jedno rozwiązanie. Jeśli natomiast $r(A) < n$, to równanie normalne (i zadanie (2.6)) ma nieskończenie wiele rozwiązań i zbiór rozwiązań jest podprzestrzenią afiniczną. Można pokazać, że wówczas rozwiązaniem o najmniejszej normie tego zadania jest

$$x = A^+ b.$$

Zwróćmy uwagę na to, że w przypadku, gdy A jest macierzą nieosobliwą, czyli układ $Ax = b$ posiada dokładnie jedno rozwiązanie, to $A^+ = A^{-1}$, czyli w tym przypadku $x = A^+ b$ jest rozwiązaniem liniowego zadania najmniejszych kwadratów. Widzimy, że we wszystkich przypadkach $x = A^+ b$ jest rozwiązaniem o najmniejszej normie zadania najmniejszych kwadratów.

Przykład 2.2.4 Danych jest N niezależnych zmiennych losowych X_i, $i = 1, 2, ..., N$, o gęstości $p(x_i|a)$, gdzie $a = (\alpha_1, \alpha_2, ..., \alpha_n)$ jest wektorem parametrów. W wielu zastosowaniach praktycznych, np. w statystyce, czy w uczeniu maszynowym bada się *funkcję wiarygodności* (ang. *likelihood function*) postaci

$$f(x|a) = \prod_{i=1}^{N} p(x_i, a),$$

gdzie $x = (x_1, x_2, ..., x_N)$. Jest ona gęstością prawdopodobieństwa wielowymiarowej zmiennej losowej $X = (X_1, X_2, ..., X_N)$, czyli innymi słowy $f(x|a)dx$ wyraża prawdopodobieństwo tego, że zmienne losowe X_i przyjmą wartości z przedziału $(x_i, x_i + dx_i)$, $i = 1, 2, .., N$. Przykładowo, jeśli X_i mają rozkłady normalne $N(\mu, \sigma^2)$ zadane gęstością $p(x_i|\mu, \sigma^2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp[-\frac{1}{2\sigma^2}(x_i - \mu)^2]$, $i = 1, 2, ..., N$, o parametrach μ (średnia) i σ^2 (wariancja) to funkcja wiarygodności ma postać

$$f(x|\mu, \sigma^2) = (2\pi\sigma^2)^{-\frac{N}{2}} \exp[-\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^{N} (x_i - \mu)^2].$$

Należy wyznaczyć wektor parametrów $a = (\mu, \sigma)$, dla którego funkcja wiarygodności przyjmie maksimum (zaobserwowane wartości x_i zmiennych losowych X_i, $i = 1, 2, ..., N$) są najbardziej wiarygodne). Z uwagi na postać funkcji f wygodniej jest wyznaczyć maksimum jej logarytmu (logarytm iloczynu jest sumą logarytmów), co jest równoważne wyznaczeniu maksimum funkcji f (uzasadnić). Ponadto, przy dużym N funkcja wiarygodności może przyjmować bardzo małe albo bardzo duże wartości, co może prowadzić do dużych błędów numerycznych. Tej niekorzystnej własności nie ma już logarytm funkcji wiarygodności

$$\ln f(x|a) = \sum_{i=1}^{N} \ln p(x_i, a).$$

W przypadku, gdy X_i mają rozkład normalny, mamy

$$\ln f(x|\mu, \sigma^2) = -\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^{N} (x_i - \mu)^2 - \frac{N}{2} \ln \sigma^2 - \frac{N}{2} \ln(2\pi).$$

Oznaczmy

$$h(\mu,\sigma) := -\ln f(x|\mu,\sigma^2) = \frac{1}{2\sigma^2}\sum_{i=1}^{N}(x_i-\mu)^2 + \frac{N}{2}\ln\sigma^2 + \frac{N}{2}\ln(2\pi).$$

Ponieważ funkcja ln jest rosnąca, więc maksymalizacja funkcji wiarygodności jest równoważna minimalizacji funkcji h. Z warunku koniecznego optymalności otrzymamy, że jeżeli h osiąga minimum w punkcie $(\bar{\mu},\bar{\sigma}^2)$, to w tym punkcie spełnione są równości

$$\begin{aligned}
\frac{\partial h(\mu,\sigma)}{\partial\mu} &= -\frac{1}{\sigma^2}\sum_{i=1}^{N}(x_i-\mu) = 0,\\
\frac{\partial h(\mu,\sigma)}{\partial\sigma^2} &= \frac{1}{2\sigma^4}\sum_{i=1}^{N}(x_i-\mu)^2 - \frac{N}{2\sigma^2} = 0.
\end{aligned}$$

Jedynym rozwiązaniem tego układu jest

$$\begin{aligned}
\bar{\mu} &= \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}x_i,\\
\bar{\sigma}^2 &= \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(x_i-\bar{\mu})^2.
\end{aligned}$$

Dalej mamy

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2 h(\mu,\sigma^2)}{(\partial\mu)^2} &= \frac{N}{\sigma^2},\\
\frac{\partial^2 h(\mu,\sigma^2)}{(\partial\sigma)^2} &= \frac{1}{\sigma^6}\sum_{i=1}^{N}(x_i-\mu)^2,\\
\frac{\partial^2 h(\mu,\sigma^2)}{\partial\sigma\partial\mu} &= \frac{1}{\sigma^4}\sum_{i=1}^{N}(x_i-\mu)
\end{aligned}$$

czyli

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2 h(\bar{\mu},\bar{\sigma}^2)}{(\partial\mu)^2} &= \frac{N}{\bar{\sigma}^2},\\
\frac{\partial^2 h(\bar{\mu},\bar{\sigma}^2)}{(\partial\sigma)^2} &= \frac{1}{\bar{\sigma}^6}\sum_{i=1}^{N}(x_i-\bar{\mu})^2 = \frac{N}{\bar{\sigma}^4},\\
\frac{\partial^2 h(\bar{\mu},\bar{\sigma}^2)}{\partial\sigma\partial\mu} &= \frac{1}{\bar{\sigma}^4}\sum_{i=1}^{N}(x_i-\bar{\mu}) = 0
\end{aligned}$$

Zatem hesjan $G(\bar{\mu},\bar{\sigma}^2)$,

$$G(\bar{\mu},\bar{\sigma}^2) = \begin{bmatrix} \frac{N}{\bar{\sigma}^2} & 0 \\ 0 & \frac{N}{\bar{\sigma}^4} \end{bmatrix}$$

jest określony dodatnio. Z warunków optymalności rzędu drugiego wynika, że funkcja h osiąga minimum lokalne w punkcie $(\bar{\mu},\bar{\sigma}^2)$. Zauważmy, że funkcja h jest koercytywna, gdyż dąży ona do $+\infty$, gdy przynajmniej jedna ze zmiennych μ,σ^2 dąży do $+\infty$. Funkcja h osiąga więc minimum globalne. Ponieważ punkt $(\bar{\mu},\bar{\sigma}^2)$ jest jedynym punktem stacjonarnym funkcji h, więc osiąga ona w tym punkcie minimum globalne. Zatem funkcja wiarygodności $f(x|\mu,\sigma^2)$ osiąga maksimum globalne dla $\mu=\bar{\mu}$ i $\sigma^2=\bar{\sigma}^2$.

2.3 Warunki istnienia minimum dla zadań różniczkowalnych z ograniczeniami

Nie będziemy gadać niepotrzebnych rzeczy.

Witkacy, *Szewcy*

W rozdziale tym będziemy zajmować się zadaniem minimalizacji gładkiej postaci

$$\begin{array}{rll} \text{minimalizować} & f(x) & \\ \text{względem} & x \in \mathbb{R}^n & \\ \text{przy ograniczeniach} & c_i(x) = 0, & i \in E = \{1, ..., m\}, \\ & c_i(x) \leq 0, & i \in I = \{m+1, ..., p\}, \end{array} \tag{2.7}$$

gdzie funkcje f oraz c_i dla $i \in E \cup I$ są przynajmniej jednokrotnie różniczkowalne w sposób ciągły. Zbiór

$$X = \{x \in \mathbb{R}^n : c_i(x) = 0, i \in E, c_i(x) \leq 0, i \in I\}$$

nazywamy *zbiorem rozwiązań* (*punktów*) *dopuszczalnych*, zaś element tego zbioru - *rozwiązaniem* (*punktem*) *dopuszczalnym*. Zbiór

$$A(\bar{x}) = \{i \in E \cup I : c_i(\bar{x}) = 0\}, \tag{2.8}$$

gdzie $\bar{x} \in X$, nazywamy *zbiorem ograniczeń aktywnych* (w punkcie $\bar{x}$), zaś element tego zbioru *ograniczeniem aktywnym* (w punkcie $\bar{x}$). Oznaczmy

$$I(\bar{x}) = \{i \in I : c_i(\bar{x}) = 0\}. \tag{2.9}$$

Zbiór $I(\bar{x})$ jest więc zbiorem nierównościowych ograniczeń aktywnych. Oczywiście $I(\bar{x}) = A(\bar{x}) \cap I$ oraz $A(\bar{x}) = E \cup I(\bar{x})$. Elementy zbioru $I \setminus I(\bar{x})$ nazywamy *ograniczeniami nieaktywnymi* w punkcie $\bar{x}$. Jeśli funkcja $f|_X$ osiąga minimum globalne, względnie lokalne w punkcie $x^* \in X$, to mówimy, że punkt ten jest *globalnym*, względnie *lokalnym rozwiązaniem* (*optymalnym*) tego zadania.

Uwaga 2.3.1 Jeżeli znamy zbiór ograniczeń aktywnych $I(x^*)$ dla punktu x^* będącego lokalnym rozwiązaniem optymalnym problemu (2.7), to ograniczenia nieaktywne $i \in I \setminus I(x^*)$ możemy usunąć zaś ograniczenia aktywne $i \in I(x^*)$ traktować jako równościowe. Dokładniej, jeśli x^* jest lokalnym rozwiązaniem optymalnym problemu (2.7), to x^* jest również lokalnym rozwiązaniem optymalnym problemu

$$\begin{array}{rll} \text{minimalizować} & f(x) & \\ \text{względem} & x \in \mathbb{R}^n & \\ \text{przy ograniczeniach} & c_i(x) = 0, & i \in E \cup I(x^*). \end{array} \tag{2.10}$$

Uzasadnienie tego faktu pozostawiamy czytelnikowi. Zwróćmy jednak uwagę na to, że implikacja odwrotna nie jest prawdziwa.

Na początek podamy teraz kilka prostych przykładów zadań minimalizacji różniczkowalnej z ograniczeniami równościowymi i spróbujemy rozwiązać je prostymi metodami. Zobaczymy, że stosowalność tych metod jest często ograniczona.

Ćwiczenie 2.3.2 Rozwiązać następujące zadania minimalizacji graficznie i metodą eliminacji zmiennej

(a)

$$\begin{array}{rr} \text{minimalizować} & x_1 + x_2 \\ \text{względem} & (x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2 \\ \text{przy ograniczeniu} & x_1^2 - x_2 = 0, \end{array}$$

(b)

$$\begin{array}{rr} \text{minimalizować} & x_1^2 + x_2^2 \\ \text{względem} & (x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2 \\ \text{przy ograniczeniu} & (x_1 - 2)^2 + (x_2 - 2)^2 = 1. \end{array}$$

(c)

$$\begin{array}{rr} \text{minimalizować} & -x_1 - x_2 \\ \text{względem} & (x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2 \\ \text{przy ograniczeniach} & x_1^2 - x_2 \leq 0, \\ & x_1^2 + x_2^2 - 1 \leq 0. \end{array}$$

(d)

$$\begin{array}{rr} \text{minimalizować} & x_1^2 + x_2^2 \\ \text{względem} & (x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2 \\ \text{przy ograniczeniu} & -(x_1 - 1)^3 + x_2^2 = 0. \end{array}$$

Zasadnym wydaje się pytanie, dlaczego metoda eliminacji zmiennej nie zawsze prowadzi do prawidłowego rozwiązania. Odpowiadając na to pytanie należy zauważyć, że w metodzie eliminacji zmiennej korzystamy z implikacji: jeśli zadanie pomocnicze (powstałe w wyniku eliminacji zmiennej) ma rozwiązanie, to zadanie wyjściowe ma rozwiązanie. Natomiast z nieistnienia rozwiązania zadania pomocniczego nie wynika nieistnienie rozwiązania wyjściowego zadania. Ćwiczenie 2.3.2(d) wskazuje na ograniczoną stosowalność metody eliminacji zmiennej. Mimo bardzo porządnej zarówno funkcji celu jak i funkcji ograniczenia, metoda ta nie prowadzi do wyznaczenia rozwiązania. Okaże się później, że przyczyną tego jest fakt, że gradient funkcji ograniczenia w punkcie będącym rozwiązaniem zadania jest wektorem zerowym. W każdym razie widzimy, że do zadań minimalizacji z ograniczeniami potrzebujemy innego podejścia niż metoda eliminacji zmiennej.

2.3.1 Warunki rzędu pierwszego istnienia minimum

Definicja 2.3.3 Niech $f : \mathbb{R}^n \supseteq X \longrightarrow \mathbb{R}$ będzie funkcją różniczkowalną i niech $\bar{x} \in X$. Zbiór

$$D(\bar{x}) = \{s \in \mathbb{R}^n : s^T \nabla f(\bar{x}) < 0\}. \tag{2.11}$$

nazywamy *zbiorem kierunków spadku* funkcji f w punkcie $\bar{x}$.

Uwaga 2.3.4 W istocie każdy element zbioru $D(\bar{x})$ jest kierunkiem spadku funkcji f w punkcie $\bar{x}$. Mogą jednak istnieć kierunki spadku nie należące do tego zbioru (patrz uwaga 1.5.26).

Definicja 2.3.5 Niech $X \subseteq \mathbb{R}^n$ będzie zbiorem rozwiązań dopuszczalnych zadania (2.7). Zbiór kierunków stycznych do tego zbioru w punkcie $\bar{x}$ nazywamy *zbiorem kierunków dopuszczalnych* (dla tego zadania) w punkcie $\bar{x}$ i oznaczamy symbolem $T(\bar{x})$.

Uwaga 2.3.6 Dla dowolnego $x \in X$ zbiór $T(x)$ jest niepusty (np. $0 \in T(x)$, a dla x niebędącego punktem izolowanym zbioru X, zbiór $T(x)$ kierunków dopuszczalnych jest nietrywialny (tzn. istnieją wówczas niezerowe kierunki dopuszczalne). Wynika to z faktu, że dla $x_k \neq x$ ciąg $\frac{x_k - x}{\|x_k - x\|}$ jest ograniczony, czyli posiada podciąg zbieżny.

Uwaga 2.3.7 Niech $\bar{x} \in X$. Na postać zbioru $T(\bar{x})$ nie mają wpływu ograniczenia nieaktywne. Dokładniej, jeśli w zadaniu (2.7) usuniemy ograniczenia $i \in I \setminus I(\bar{x})$, to zbiór $T(\bar{x})$ nie ulegnie zmianie. Dowód tego faktu, w którym należy wykorzystać ciągłość funkcji c_i, pozostawiamy czytelnikowi.

Zauważmy, że wniosek 2.1.11 możemy sformułować w następującej postaci.

Twierdzenie 2.3.8 *Jeśli punkt x^* jest rozwiązaniem lokalnym zadania* (2.7)*, to dla zadania tego brak jest dopuszczalnych kierunków spadku, czyli*

$$T(x^*) \cap D(x^*) = \emptyset. \tag{2.12}$$

Uwaga 2.3.9 Dla zadania minimalizacji wypukłej różniczkowalnej warunek (2.12) podawany jest również w literaturze w postaci

$$-\nabla f(x^*) \in N_X(x^*), \tag{2.13}$$

gdzie X oznacza zbiór rozwiązań dopuszczalnych zadania (2.7) i jest zbiorem wypukłym. Równoważność warunków (2.12) i (2.13) wynika z następującego rozumowania:

$$\begin{aligned} T(x^*) \cap D(x^*) &= \emptyset \\ &\iff T(x^*) \subseteq (D(x^*))' \\ &\iff T(x^*) \subseteq -\operatorname{cl}(D(x^*)) \\ &\iff -D^*(x^*) \subseteq T^*(x^*) \\ &\iff -\nabla f(x^*) \in N_X(x^*), \end{aligned}$$

przy czym pierwsza równoważność wynika z następujacej własności zbiorów: $A \cap B = \emptyset \iff A \subseteq B'$, druga – z faktu, że dopełnieniem zbioru $(D(x^*)$ jest zbiór $-\operatorname{cl}(D(x^*))$, trzecia – z faktu, że stożek $T(x^*)$ jest wypukły i domknięty oraz z faktu, że dla stożków domkniętych A i B zachodzi równoważność $A \subseteq B \iff B^* \subseteq A^*$, zaś czwarta – z faktów, że stożkiem sprzężonym do $D(x^*)$ jest $\{\alpha \nabla f(x^*) : \alpha \geq 0\}$ oraz stożkiem sprzężonym do $T(x^*)$ jest stożek normalny $N_X(x^*)$.

W dalszej części tego ustępu analizujemy dokładniej warunek (2.12). Niestety, zbiór kierunków dopuszczalnych $T(x^*)$ niełatwo poddaje się analizie ze względu na to, że ma on zazwyczaj skomplikowaną postać. Czasami jednak postać ta prosta. Sytuacja taka pojawia się na przykład wówczas, gdy w punkcie x^* wszystkie ograniczenia są nieaktywne (nie może być wówczas ograniczeń równościowych). W tym przypadku oczywiście $T(x^*) = \mathbb{R}^n$, gdyż $B(x^*, \delta) \subseteq X$ dla pewnego $\delta > 0$. Zauważmy, że warunek (2.12) jest wówczas spełniony wtedy i tylko wtedy, gdy $\nabla f(x^*) = 0$. Nie powinno być niespodzianką, że otrzymaliśmy w istocie warunek konieczny rzędu pierwszego dla zadania minimalizacji bez ograniczeń. Innym przykładem zadania, dla którego $T(x^*)$ ma prostą postać jest zadanie minimalizacji z ograniczeniami liniowymi.

Przykład 2.3.10 Niech

$$X = \{x \in \mathbb{R}^n : a_i^T x = b_i, i \in E, \quad a_i^T x \leq b_i, i \in I\}.$$

Wówczas nietrudno zauważyć, że dla $\bar{x} \in X$ zbiór kierunków dopuszczalnych ma postać

$$T(\bar{x}) = \{s \in \mathbb{R}^n : a_i^T s = 0, i \in E, \quad a_i^T s \leq 0, i \in I(\bar{x})\}. \tag{2.14}$$

Uwaga 2.3.11 Rozpatrzmy zadanie minimalizacji z ograniczeniami (2.7) i punkt $\bar{x}$ spełniający ograniczenia tego zadania. Niech $\bar{X}$ oznacza *zbiór rozwiązań dopuszczalnych dla ograniczeń zlinearyzowanych* w punkcie $\bar{x}$ tego zadania:

$$\bar{X} = \{x \in \mathbb{R}^n : \bar{c}_i(x) = 0, i \in E, \bar{c}_i(x) \leq 0, i \in I\},$$

gdzie $\bar{c}_i$ jest linearyzacją funkcji c_i w punkcie $\bar{x}$, czyli

$$\bar{c}_i(x) = (\nabla c_i(\bar{x}))^T (x - \bar{x}) + c_i(\bar{x})$$

dla $x \in \mathbb{R}^n$, $i \in E \cup I$.

Symbolem $T_{lin}(\bar{x})$ oznaczmy *zbiór kierunków dopuszczalnych dla ograniczeń zlinearyzowanych* w punkcie $\bar{x}$. Z równości (2.14) wynika, że

$$T_{lin}(\bar{x}) = \{s \in \mathbb{R}^n : (\nabla c_i(\bar{x}))^T s = 0, i \in E, (\nabla c_i(\bar{x}))^T s \leq 0, i \in I(\bar{x})\}. \tag{2.15}$$

Lemat 2.3.12 *Niech X będzie zbiorem rozwiązań dopuszczalnych zadania* (2.7) *i niech $\bar{x} \in X$. Zachodzi inkluzja*

$$T(\bar{x}) \subseteq T_{lin}(\bar{x})$$

Dowód. Niech $s \in T(\bar{x})$. Dalej niech $X \ni x_k \to \bar{x}$ i $t_k \downarrow 0$ będą ciągami takimi, że $s = \lim_k s_k$, gdzie $s_k = \frac{x_k - \bar{x}}{t_k}$. Rozwijając funkcję c_i we wzór Taylora w otoczeniu punktu $\bar{x}$ otrzymamy

$$c_i(x_k) = c_i(\bar{x}) + t_k s_k^T \nabla c_i(\bar{x}) + o(t_k),$$

$i \in E \cup I$. Dla $i \in E$ mamy $c_i(x_k) = c_i(\bar{x}) = 0$, natomiast dla $i \in I(\bar{x})$ mamy $c_i(x_k) \leq c_i(\bar{x}) = 0$. Stąd po podzieleniu obu stron powyższej równości przez t_k i po przejściu do granicy otrzymamy

$$s^T \nabla c_i^T(\bar{x}) = 0 \text{ dla } i \in E$$

oraz

$$s^T \nabla c_i^T(\bar{x}) \leq 0 \text{ dla } i \in I(\bar{x}),$$

czyli $s \in T_{lin}(\bar{x})$. ■

Niestety, nie zawsze $T(\bar{x}) = T_{lin}(\bar{x})$. Aby to zauważyć wystarczy wziąć $X = \{x = (x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2 : x_2 \leq x_1^3, x_2 \geq 0\}$ i $\bar{x} = (0, 0)$. Otrzymamy wówczas $s = (-1, 0) \in T_{lin}(\bar{x})$ ale $s \notin T(\bar{x})$. Zauważmy również, że równość $T(\bar{x}) = T_{lin}(\bar{x})$ nie zachodzi również dla zbioru rozwiązań dopuszczalnych zadania rozpatrywanego w ćwiczeniu 2.3.2(d) dla punktu będącego rozwiązaniem optymalnym tego zadania.

Ponieważ, jak już wcześniej wspomnieliśmy, analiza zbioru kierunków dopuszczalnych może nastręczać wiele kłopotów, wprowadza się pewne warunki, przy których analiza ta jest prostsza.

Definicja 2.3.13 Niech $\bar{x} \in X$. Jeśli zachodzi równość $T(\bar{x}) = T_{lin}(\bar{x})$, to mówimy, że w punkcie $\bar{x}$ spełniony jest *warunek regularności (ograniczeń) Kuhna–Tuckera* lub *warunek regularności Abadiego* (ang. *Abadie constraint qualification* – ACQ).

Powyższa definicja sama w sobie nie upraszcza analizy zbioru kierunków dopuszczalnych, gdyż generalnie trudno jest sprawdzić bezpośrednio warunek regularności Kuhna–Tuckera. W jednym z kolejnych ustępów poznamy jednak warunki wystarczające dla spełnienia tego warunku. Już teraz możemy jednak zauważyć, że warunki regularności Kuhna–Tuckera są spełnione, jeśli wszystkie ograniczenia są liniowe.

Definicja 2.3.14 Niech $\bar{x} \in X$. Jeśli zachodzi równość

$$T(\bar{x}) \cap D(\bar{x}) = T_{lin}(\bar{x}) \cap D(\bar{x}), \tag{2.16}$$

to mówimy, że w punkcie $\bar{x}$ spełniony jest *podstawowy warunek regularności ograniczeń (ang. basic regularity condition – BRC).*

Przykład 2.3.15 Rozpatrzmy zadanie

$$\begin{array}{rr} \text{minimalizować} & x_1 \\ \text{względem} & x = (x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2 \\ \text{przy ograniczeniach} & x_2 \leq x_1^3, \\ & x_2 \geq 0. \end{array}$$

Dla tego zadania, w każdym punkcie dopuszczalnym poza punktem $\bar{x} = (0, 0)$ zachodzi warunek regularności Kuhna–Tuckera, a więc zachodzi również podstawowy warunek regularności.

Jeśli spełniony jest warunek regularności Kuhna–Tuckera, to spełniony jest oczywiście podstawowy warunek regularności. Nie zachodzi natomiast implikacja odwrotna.

Przykład 2.3.16 Rozpatrzmy zadanie

$$\begin{array}{rr} \text{minimalizować} & x_2 \\ \text{względem} & x = (x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2 \\ \text{przy ograniczeniach} & x_2 \leq x_1^3, \\ & x_2 \geq 0. \end{array}$$

Dla punktu $\bar{x} = (0, 0)$ mamy $T(\bar{x}) \neq T_{lin}(\bar{x})$, ale $T(\bar{x}) \cap D(\bar{x}) = T_{lin}(\bar{x}) \cap D(\bar{x})$.

Przedstawimy teraz ważne narzędzie do analizy warunku koniecznego istnienia minimum danego równością (2.12). Poniższe twierdzenie, znane w literaturze pod nazwą *lematu Farkasa*, jest równoważne twierdzeniu 1.6.30.

Twierdzenie 2.3.17 (Lemat Farkasa) *Dane są wektory $a_1, ..., a_m, g \in \mathbb{R}^n$. Zachodzi równoważność*

$$\{s \in \mathbb{R}^n : s^T g < 0\} \cap \{s \in \mathbb{R}^n : s^T a_i \leq 0, i = 1, ..., m\} = \emptyset$$

$$\Updownarrow$$

$$\textit{istnieje wektor } y = (\lambda_1, ..., \lambda_m) \geq 0, \textit{ taki że } \quad g + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i a_i = 0.$$

Dowód. Niech $A = [a_1, ..., a_m]$ będzie macierzą o kolumnach $a_i, i = 1, ..., m$. Oznaczmy $C = \{s \in \mathbb{R}^n : A^T s \leq 0\}$. Pierwszy człon równoważności występującej w lemacie oznacza, że wektor $-g$ jest elementem stożka C^*. Wynika to z następującego rozumowania:

$$\{s \in \mathbb{R}^n : s^T g < 0\} \cap C = \emptyset$$

$$\Longleftrightarrow C \subseteq \{s \in \mathbb{R}^n : s^T g < 0\}' = \{s \in \mathbb{R}^n : s^T g \geq 0\}$$

$$\Longleftrightarrow \quad \forall_{s \in C} \quad g^T s \geq 0$$
$$\Longleftrightarrow \quad -g \in C^*$$

Z twierdzenia 1.6.30 wynika, że stożek C^* jest postaci

$$C^* = \{s \in \mathbb{R}^n : A^T s \leq 0\}^* = \{u \in \mathbb{R}^n : u = Ay, \ y \geq 0\}.$$

Tak więc pierwszy człon równoważności występującej w lemacie oznacza, że istnieje wektor $y \geq 0$, taki że $-g = Ay$, co zgodnie z przyjętym oznaczeniem jest równoważne drugiemu członowi tej równoważności. ■

Zastosujemy teraz lemat Farkasa w celu prostszego przedstawienia warunku koniecznego istnienia minimum (2.12).

Wniosek 2.3.18 *Niech $\bar{x} \in X$. Wówczas*

$$T_{lin}(\bar{x}) \cap D(\bar{x}) = \emptyset$$

wtedy i tylko wtedy, gdy istnieje wektor y o współrzędnych $\lambda_i, i \in E \cup I$, taki, że

$$\nabla f(\bar{x}) + \sum_{i \in A(\bar{x})} \lambda_i \nabla c_i(\bar{x}) = 0$$

i $\lambda_i \geq 0$ dla $i \in I(\bar{x})$.

Dowód, który w gruncie rzeczy polega na przepisaniu lematu Farkasa przy zastosowaniu równości (2.15) i (2.11) określających zbiory $T_{lin}(\bar{x})$ i $D(\bar{x})$ pozostawiamy czytelnikowi.

Poniższe twierdzenie, nazywane *twierdzeniem Kuhna–Tuckera* lub *twierdzeniem Karusha–Kuhna–Tuckera*, jest podstawowym narzędziem minimalizacji różniczkowalnej z ograniczeniami.

Twierdzenie 2.3.19 (Karush–Kuhn–Tucker) *Niech x^* będzie punktem dopuszczalnym zadania* (2.7) *i niech w punkcie tym spełniony będzie podstawowy warunek regularności* (2.16)*. Jeśli x^* jest lokalnym rozwiązaniem optymalnym zadania* (2.7)*, to istnieje wektor y^* o współrzędnych $\lambda_i^*, i \in E \cup I$, taki, że para (x^*, y^*) spełnia układ*

$$\begin{array}{rrl} \nabla f(x) + \sum_{i \in E \cup I} \lambda_i \nabla c_i(x) = 0, & & \text{(a)} \\ c_i(x) = 0, & i \in E, & \text{(b)} \\ c_i(x) \leq 0, & i \in I, & \text{(c)} \\ \lambda_i \geq 0, & i \in I, & \text{(d)} \\ \lambda_i c_i(x) = 0, & i \in E \cup I. & \text{(e)} \end{array} \qquad (2.17)$$

Dowód. Niech x^* będzie rozwiązaniem lokalnym zadania (2.7). Wówczas, na mocy twierdzenia 2.3.8 zachodzi równość $T(x^*) \cap D(x^*) = \emptyset$. W konsekwencji, na mocy założeń twierdzenia, $T_{lin}(x^*) \cap D(x^*) = \emptyset$. Z postaci zbiorów $T_{lin}(x^*)$ i $D(x^*)$ otrzymujemy więc

$$\{s : s^T \nabla c_i(x^*) = 0, i \in E, s^T \nabla c_i(x^*) \leq 0, i \in I(x^*)\} \cap \{s : s^T \nabla f(x^*) < 0\} = \emptyset.$$

Stąd, na mocy wniosku 2.3.18, otrzymujemy, że istnieje wektor y' o współrzędnych λ'_i, $i \in E \cup I(x^*)$, taki, że para (x^*, y') spełnia warunki

$$\nabla f(x^*) + \sum_{i \in E \cup I(x^*)} \lambda'_i \nabla c_i(x^*) = 0$$

i $\lambda'_i \geq 0$ dla $i \in I(x^*)$. Zdefiniujmy wektor $y^* = (\lambda^*_1, ..., \lambda^*_p)$ następująco

$$\lambda^*_i = \begin{cases} \lambda'_i & \text{dla } i \in E \cup I(x^*) \\ 0 & \text{dla } i \in I \backslash I(x^*). \end{cases}$$

Jasne jest, że para (x^*, y^*) spełnia również warunek (2.17(a)). Spełnienie przez punkt x^* warunków (2.17(b)-(c)) jest oczywiste, bo x^* jest punktem dopuszczalnym. Z tego samego względu dla x^* zachodzi równość w warunku (2.17(e)) dla $i \in E \cup I(x^*)$. Dla pozostałych i mamy $\lambda^*_i = 0$, a więc dla nich zachodzi również równość w (2.17(e)). Oczywiście $\lambda^*_i \geq 0$ dla $i \in I$, gdyż $\lambda'_i \geq 0$ dla $i \in I$. Tak więc spełniony jest warunek (2.17(d)), co kończy dowód. ■

Definicja 2.3.20 Dane jest zadanie minimalizacji z ograniczeniami (2.7). Funkcja $L : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^p \longrightarrow \mathbb{R}$ określona równością

$$L(x, y) = f(x) + \sum_{i \in E \cup I} \lambda_i c_i(x)$$

nazywa się *funkcją Lagrange'a* tego zadania.

Przy oznaczeniu $c(x) = (c_1(x), ..., c_p(x))^T$, funkcję Lagrange'a można zapisać w postaci

$$L(x, y) = f(x) + y^T c(x),$$

zaś warunki Kuhna–Tuckera (2.17) – w postaci

$$\begin{array}{rr} \nabla_x L(x, y) = 0, & \text{(a)} \\ \nabla_{y_E} L(x, y) = 0, & \text{(b)} \\ \nabla_{y_I} L(x, y) \leq 0, & \text{(c)} \\ y_I \geq 0, & \text{(d)} \\ \lambda_i c_i(x) = 0, \quad i \in E \cup I, & \text{(e)} \end{array}$$

gdzie – zgodnie z wcześniej przyjętą konwencją – y_E i y_I oznaczają wektory o współrzędnych λ_i odpowiednio dla $i \in E$ i $i \in I$.

Układ równań i nierówności (2.17) nazywa się *warunkami Kuhna–Tuckera* lub *warunkami Karusha–Kuhna–Tuckera*, zaś para $(\bar{x}, \bar{y})$ będąca rozwiązaniem tego układu – *punktem Kuhna–Tuckera* lub *punktem Karusha–Kuhna–Tuckera* (w skrócie punktem KT lub punktem KKT). Wektor $\bar{y}$ nazywa się wektorem *mnożników Lagrange'a*. Równość (2.17(a)) oznacza, że punkt x^* jest punktem stacjonarnym funkcji Lagrange'a $L(\cdot, y)$ dla y będącego wektorem mnożników Lagrange'a. Równości (2.17(e)) noszą nazwę *warunków komplementarności*. Oczywiście wystarczy, aby warunki te zachodziły dla ograniczeń nierównościowych, gdyż dla ograniczeń równościowych zachodzą one automatycznie.

Jeśli w zadaniu (2.7) występują wyłącznie ograniczenia równościowe, to układ Kuhna–Tuckera ma postać

$$\begin{aligned} \nabla_x L(x,y) &= 0, \\ \nabla_y L(x,y) &= 0, \end{aligned}$$

czyli jest to układ $n+m$ równań z $n+m$ niewiadomymi (x,y):

$$\begin{aligned} \nabla f(x) + y^T \nabla c(x) &= 0, \\ c(x) &= 0, \end{aligned}$$

który można rozwiązać albo analitycznie albo którąś z metod iteracyjnych, na przykład metodą Newtona.

W przypadku, gdy dla punktu x^* będącego rozwiązaniem zadania (2.7) zbiór ograniczeń aktywnych $A(x^*)$ jest pusty (wówczas oczywiście nie mogą występować ograniczenia równościowe), to wszystkie mnożniki Lagrange'a są równe zeru. W tej sytuacji teza twierdzenie Kuhna–Tuckera sprowadza się do warunku koniecznego dla zadania minimalizacji bez ograniczeń: $\nabla f(x^*) = 0$.

Ćwiczenie 2.3.21 Wyznaczyć punkty Kuhna–Tuckera dla poniższego zadania. Otrzymane wyniki porównać z ćwiczeniem 2.3.2(c).

$$\begin{array}{rr} \text{minimalizować} & -x_1 - x_2 \\ \text{względem} & x = (x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2 \\ \text{przy ograniczeniach} & x_1^2 - x_2 \le 0, \\ & x_1^2 + x_2^2 - 1 \le 0. \end{array}$$

Warunki Kuhna–Tuckera są w przypadku spełnienia warunków regularności jedynie warunkami koniecznymi istnienia minimum. Jeśli jednak daje się z postaci zadania minimalizacji z ograniczeniami wywnioskować, że posiada ono rozwiązanie optymalne i punkt Kuhna–Tuckera (x^*, y^*) określony jest jednoznacznie, to albo x^* jest rozwiązaniem optymalnym tego zadania albo rozwiązanie to jest osiągnięte w punkcie, w którym nie jest spełniony podstawowy warunek regularności. Natomiast z braku punktów Kuhna–Tuckera nie można wyciągać wniosków o braku rozwiązań zadania.

Ćwiczenie 2.3.22 Wyznaczyć punkty Kuhna–Tuckera dla poniższego zadania. Otrzymane wyniki porównać z rozwiązaniem przykładu 2.3.2(d).

$$\begin{array}{rr} \text{minimalizować} & x_1^2 + x_2^2 \\ \text{względem} & x = (x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2 \\ \text{przy ograniczeniu} & -(x_1 - 1)^3 + x_2^2 = 0. \end{array}$$

Uwaga 2.3.23 Dla dowolnego punktu Kuhna–Tuckera $(\bar{x}, \bar{y})$ zadania minimalizacji z ograniczeniami (2.7) zachodzi równość $f(\bar{x}) = L(\bar{x}, \bar{y})$ niezależnie od spełnienia bądź niespełnienia warunków regularności. Ponadto dla zadania (2.7) z ograniczeniami wyłącznie nierównościowymi i dla dowolnego punktu Kuhna–Tuckera $(\bar{x}, \bar{y})$ mamy

$$f(\bar{x}) = L(\bar{x}, \bar{y}) = \max_{y \ge 0} L(\bar{x}, y),$$

gdyż $\bar{x}$ jest rozwiązaniem dopuszczalnym tego zadania. Zauważmy ponadto, że

$$\sup_{y \ge 0} L(x,y) = \begin{cases} f(x) \text{ dla } x \in X \\ +\infty \text{ dla } x \notin X \end{cases}$$

i wobec tego zadanie minimalizacji z ograniczeniami (2.7) można zapisać w równoważnej mu postaci zadania minimalizacji bez ograniczeń

$$\begin{array}{rr} \text{minimalizować} & \sup_{y\geq 0} L(x,y) \\ \text{względem} & x \in \mathbb{R}^n. \end{array}$$

Niestety, to ostatnie zadanie nie musi być różniczkowalne.

Przypuśćmy teraz, że zadanie minimalizacji różniczkowalnej z ograniczeniami (2.7) jest *zadaniem minimalizacji wypukłej*, czyli jest ono postaci

$$\begin{array}{rrl} \text{minimalizować} & f(x) & \\ \text{względem} & x \in \mathbb{R}^n & \\ \text{przy ograniczeniach} & a_i^T x = b_i, & i \in E = \{1, ..., m\}, \\ & c_i(x) \leq 0, & i \in I = \{m+1, ..., p\}. \end{array}$$

gdzie funkcje $f, c_i, i \in I$ są wypukłe. Bez szkody dla ogólności rozważań możemy przyjąć, że, w zadaniu tym występują wyłącznie ograniczenia nierównościowe, czyli, że jest ono postaci

$$\begin{array}{rrl} \text{minimalizować} & f(x) & \\ \text{względem} & x \in \mathbb{R}^n & \\ \text{przy ograniczeniach} & c_i(x) \leq 0, & i \in I, \end{array} \tag{2.18}$$

gdzie funkcje $f, c_i, i \in I$ są wypukłe.

Twierdzenie 2.3.24 *Dane jest zadanie minimalizacji wypukłej (2.18). Jeśli punkt $(x^*, y^*) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m$ jest punktem Kuhna–Tuckera, tzn.*

$$\begin{array}{rl} \nabla f(x) + \sum_{i\in I} \lambda_i \nabla c_i(x) = 0, & \\ c_i(x) \leq 0, & i \in I, \\ \lambda_i \geq 0, & i \in I, \\ \lambda_i c_i(x) = 0, & i \in I, \end{array} \tag{2.19}$$

to x^* jest rozwiązaniem globalnym tego zadania. Jeśli ponadto funkcja f jest ściśle wypukła lub przynajmniej jedno z ograniczeń aktywnych jest ściśle wypukłe i odpowiadający mu mnożnik Lagrange'a jest dodatni, to rozwiązanie jest określone jednoznacznie.

Dowód. Niech $x' \in X = \{x \in \mathbb{R}^n : c_i(x) \leq 0, i \in I\}$ i niech (x^*, y^*) będzie punktem Kuhna–Tuckera. Ponieważ $y^* \geq 0$ i $c(x') \leq 0$, więc

$$\begin{aligned} f(x') &\geq f(x') + y^{*T} c(x') \qquad (2.20) \\ &\geq f(x^*) + (x' - x^*)^T \nabla f(x^*) + \sum_{i\in I} \lambda_i^* (c_i(x^*) + (x' - x^*)^T \nabla c_i(x^*)), \end{aligned}$$

gdyż f i $c_i, i \in I$ są wypukłe. Z warunków KT otrzymujemy $\lambda_i^* c_i(x^*) = 0$ i $\nabla f(x^*) + \sum_{i\in I} \lambda_i^* \nabla c_i(x^*) = 0$. Zatem $f(x') \geq f(x^*)$ czyli x^* jest rozwiązaniem globalnym tego zadania. Załóżmy teraz, że spełnione są założenia drugiej części twierdzenia. Wówczas, na mocy twierdzenia 1.7.25(ii), druga z nierówności (2.20) jest ostra. Zatem x^* jest jedynym rozwiązanie zadania (2.18). ■

Widzimy więc, że warunki KT są warunkami wystarczającymi istnienia rozwiązania zadania minimalizacji wypukłej. Nie są to jednak warunki konieczne, chyba że spełniony jest podstawowy warunek regularności.

Przykład 2.3.25 Rozważmy zadanie

$$\begin{array}{rr} \text{minimalizować} & x_1 + x_2 \\ \text{względem} & (x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2 \\ \text{przy ograniczeniach} & x_2 \geq x_1^2, \\ & x_2 \leq 0. \end{array}$$

Zauważmy, że punkt $(0, 0)$ jest rozwiązaniem optymalnym tego zadania, a nie odpowiada mu żaden punkt KT.

Podamy teraz kilka przykładów zadań minimalizacji wypukłej z ograniczeniami.

Przykład 2.3.26 Dany jest układ równań $Ax = b$, gdzie A jest macierzą typu $m \times n$, $x \in \mathbb{R}^n$, $b \in \mathbb{R}^m$. Przypuśćmy, że układ ten posiada rozwiązanie (dla uproszczenia załóżmy, że A ma pełen rząd wierszowy, czyli $\mathrm{r}(A) = m$). Wiadomo, że zbiór rozwiązań tego układu $M = \{x \in \mathbb{R}^n : Ax = b\}$ jest podprzestrzenią afiniczną. Niech $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$. Wyznaczymy rzut metryczny $P_M\bar{x}$. Oczywiście, rzut ten istnieje i jest wyznaczony jednoznacznie, ponieważ M jest zbiorem domkniętym i wypukłym. Zauważmy, że wyznaczenie rzutu $P_M\bar{x}$ jest równoważne rozwiązaniu zadania

$$\begin{array}{rc} \text{minimalizować} & \frac{1}{2}\|x - \bar{x}\|^2 \\ \text{względem} & x \in \mathbb{R}^n \\ \text{przy ograniczeniach} & Ax = b. \end{array} \tag{2.21}$$

Jest to zdanie minimalizacji wypukłej z ograniczeniami. Oczywiście dla dowolnego punktu $x \in M$ spełniony jest warunek regularności ograniczeń Kuhna–Tuckera, gdyż wszystkie ograniczenia są liniowe. Zatem dla punktu x^* będącego rozwiązaniem zadania (2.21) istnieje wektor mnożników Lagrange'a y^*. Wyznaczymy punkt Kuhna–Tuckera. Funkcja Lagrange'a ma postać

$$L(x, y) = \frac{1}{2}\|x - \bar{x}\|^2 + y^T(Ax - b)$$

zaś warunki Kuhna–Tuckera – postać

$$\begin{array}{r} x - \bar{x} + A^T y = 0, \\ Ax = b. \end{array}$$

Mnożąc pierwsze równanie lewostronnie przez A otrzymamy po skorzystaniu z drugiego równania i po prostych przekształceniach jedyny punkt KT (x^*, y^*), gdzie

$$\begin{array}{l} y^* = (AA^T)^{-1}(A\bar{x} - b), \\ x^* = \bar{x} - A^T(AA^T)^{-1}(A\bar{x} - b). \end{array}$$

Zwróćmy uwagę na to, że AA^T jest macierzą nieosobliwą, gdyż założyliśmy, że A jest pełnego rzędu wierszowego. Z istnienia i jednoznaczności rzutu metrycznego otrzymujemy więc, że

$$P_M(\bar{x}) = \bar{x} - A^T(AA^T)^{-1}(A\bar{x} - b). \tag{2.22}$$

W przypadku, gdy $\bar{x} = 0$, otrzymamy rozwiązanie o najmniejszej normie układu $Ax = b$:

$$P_M(0) = A^T(AA^T)^{-1}b. \tag{2.23}$$

W przypadku, gdy $b = 0$, mamy $M = \ker A$ i wzór (2.22) przyjmie postać

$$P_{\ker A}(\bar{x}) = \bar{x} - A^T(AA^T)^{-1}A\bar{x}. \tag{2.24}$$

Porównując wzory (1.5) i (2.24) widzimy, że dowolny punkt $\bar{x}$ w przestrzeni $\mathbb{R}^n$ możemy rozłożyć na sumę jego rzutów ortogonalnych na $\ker A$ i $\operatorname{im} A^T$, gdzie $P_{\operatorname{im} A^T}(\bar{x}) = A^T(AA^T)^{-1}A\bar{x}$.

Nietrudno sprawdzić, że dla macierzy A pełnego rzędu wierszowego macierz $A^T(AA^T)^{-1}$ jest macierzą pseudoodwrotną Moore'a–Penrose'a macierzy A, czyli jedyną macierzą A^+ spełniającą warunki $AA^+A = A$, $A^+AA^+ = A^+, (AA^+)^T = AA^+$ i $(A^+A)^T = A^+A$. Możemy więc napisać, że

$$P_{\ker A}(\bar{x}) = (I - A^+A)(\bar{x}) \quad \text{i} \quad P_{\operatorname{im} A^T}(\bar{x}) = A^+A(\bar{x})$$

Czytelnikowi pozostawiamy sprawdzenie, że wzory te są również słuszne bez zakładania tego, że A ma pełny rząd wierszowy.

Jeśli zbiór M ma postać $M = \{x \in \mathbb{R}^n : Ax \leq b\}$ i jest niepusty, to wyznaczenie rzutu $P_M(\bar{x})$ jest znacznie trudniejsze, a w istocie nie ma wzoru na $P_M(\bar{x})$. Rzut ten można wyznaczyć iteracyjnie stosując pewien algorytm. Do zagadnienia tego wrócimy przy omawianiu programowania kwadratowego.

Przykład 2.3.27 Dany jest układ równań $Ax = b$, gdzie A jest macierzą niezerową typu $m \times n$, zaś $b \in \mathbb{R}^m$, przy czym nie zakładamy, że układ ten posiada rozwiązanie. W wielu zastosowaniach, na przykład w uczeniu maszynowym, rozważa się liniowe zadanie najmniejszych kwadratów

$$\begin{array}{ll} \text{minimalizować} & f(x) = \frac{1}{2}\|Ax - b\|^2 \\ \text{względem} & x \in \mathbb{R}^n. \end{array} \tag{2.25}$$

oraz następujące liniowe zadanie najmniejszych kwadratów z ograniczeniem

$$\begin{array}{ll} \text{minimalizować} & f(x) = \frac{1}{2}\|Ax - b\|^2 \\ \text{względem} & x \in \mathbb{R}^n \\ \text{przy ograniczeniu} & \|x\|^2 \leq \rho^2, \end{array} \tag{2.26}$$

gdzie $\rho > 0$. Jest to oczywiście zadanie minimalizacji wypukłej z ograniczeniami, a więc dla dowolnego punktu KKT (x, λ), x jest rozwiązaniem zadania (2.26). Ponadto zadanie to posiada rozwiązanie na mocy twierdzenia Weierstrassa. Oznaczmy przez ρ_0 normę dla rozwiązania zadania (2.25). Zgodnie z przykładem 2.2.3 mamy $x^* = A^+b$, czyli

$$\rho_0 = \|A^+b\|. \tag{2.27}$$

Rozważmy dwa przypadki:

(i) $\rho \geq \rho_0$. Wówczas oczywiście rozwiązanie o najmniejszej normie zadania zadania (2.25) jest jednocześnie rozwiązaniem zadania (2.26). W przypadku, gdy $\mathrm{r}(A) = \mathrm{r}(A, b) < n$, układ $Ax = b$ ma nieskończenie wiele rozwiązań, zatem zadanie (2.25) ma również nieskończenie wiele rozwiązań.

(ii) $\rho < \rho_0$. Napiszmy funkcję Lagrange'a dla tego zadania:

$$L(x, \lambda) = \frac{1}{2}\|Ax - b\|^2 + \lambda(\|x\|^2 - \rho^2).$$

Warunki Kuhna–Tuckera mają postać

$$\begin{array}{rcl} A^T(Ax - b) + 2\lambda x & = & 0 \\ \|x\|^2 & \leq & \rho^2 \\ \lambda & \geq & 0 \\ \lambda(\|x\|^2 - \rho^2) & = & 0 \end{array}$$

Zwróćmy uwagę na to, że dla punktu KKT (x, λ) zachodzi $\lambda > 0$, gdyż z uwagi na $\rho < \rho_0$ ograniczenie zadania jest aktywne, czyli $\|x\| = \rho$. Skoro $\lambda > 0$ i ograniczenie jest ściśle wypukłe, więc na mocy twierdzenia 2.3.24 zadanie (2.26) posiada dokładnie jedno rozwiązanie. Z pierwszego warunku KKT otrzymujemy więc

$$x = x(\lambda) = (A^TA + 2\lambda I)^{-1}A^Tb. \tag{2.28}$$

Zauważmy przy tym, że macierz $A^TA + 2\lambda I$ jest dodatnio określona, a więc jest nieosobliwa. Mnożnik Lagrange'a λ musi być dobrany tak, aby spełnione było ograniczenie $\|x(\lambda)\|^2 = \rho^2$. W tym celu zastosujemy metodę Newtona do rozwiązania równania $h(\lambda) := \|x(\lambda)\|^2 - \rho^2 = 0$. Po kolei pokażemy, że (a) $\lim_{\lambda\downarrow 0} h(\lambda) > 0$, (b) $\lim_{\lambda\to+\infty} < 0$, (c) h jest malejąca i (d) h jest wypukła.

(a) Pokazanie, że $\lim_{\lambda\downarrow 0} h(\lambda) > 0$ jest dość żmudne. Posłużymy się tutaj rozkładem macierzy A na wartości osobliwe, $A = U\Sigma V^T$, gdzie U jest macierzą ortogonalną typu $m \times m$, V jest macierzą ortogonalną typu $n \times n$ i Σ jest macierzą diagonalną typu $m \times n$ o elementach na głównej przekątnej σ_i, $i = 1, 2, ..., p = \min\{m, n\}$, gdzie $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq ... \geq \sigma_r > \sigma_{r+1} = ... = \sigma_p = 0$ dla pewnego $r = 1, 2, ..., p$. Mamy wówczas

$$A^TA = V\Sigma^T\Sigma V^T,$$

$$A^+ = V\Sigma^+U^T,$$

$$A^{+T}A^+ = U\Sigma^{+T}\Sigma^+U^T$$

i

$$\rho_0^2 = b^TU\Sigma^{+T}\Sigma^+U^Tb. \tag{2.29}$$

Macierz $\Sigma^T\Sigma$ typu $n \times n$ ma postać $\Sigma^T\Sigma = \operatorname{diag} s$, gdzie $s = (\sigma_1^2, \sigma_2^2, ..., \sigma_p^2, \underbrace{0, ..., 0}_{n-p})$, macierz $\Sigma^{+T}\Sigma^+$ typu $m \times m$ ma postać $\Sigma^{+T}\Sigma^+ = \operatorname{diag}(\sigma_1^{-2}, \sigma_2^{-2}, ..., \sigma_p^{-2}, \underbrace{0, ..., 0}_{m-p})$. Ponadto mamy

$$\begin{aligned}(A^TA + 2\lambda I)^{-1} &= (V(\Sigma^T\Sigma + 2\lambda I)V^T)^{-1} = V(\Sigma^T\Sigma + 2\lambda I)^{-1}V^T \\ &= V\operatorname{diag}(\frac{1}{\sigma_1^2 + 2\lambda}, \frac{1}{\sigma_2^2 + 2\lambda}, ..., \frac{1}{\sigma_r^2 + 2\lambda}, \underbrace{\frac{1}{2\lambda}, ..., \frac{1}{2\lambda}}_{n-p})V^T,\end{aligned}$$

w konsekwencji

$$(A^TA + 2\lambda I)^{-2} = V\operatorname{diag}(\frac{1}{(\sigma_1^2 + 2\lambda)^2}, \frac{1}{(\sigma_2^2 + 2\lambda)^2}, ..., \frac{1}{(\sigma_r^2 + 2\lambda)^2}, \underbrace{\frac{1}{4\lambda^2}, ..., \frac{1}{4\lambda^2}}_{n-p})V^T.$$

Zatem z równości (2.28) mamy

$$\begin{aligned}\|x(\lambda)\|^2 &= b^TU(\Sigma\operatorname{diag}(\frac{1}{(\sigma_1^2 + 2\lambda)^2}, \frac{1}{(\sigma_2^2 + 2\lambda)^2}, ..., \frac{1}{(\sigma_r^2 + 2\lambda)^2}, \underbrace{\frac{1}{4\lambda^2}, ..., \frac{1}{4\lambda^2}}_{n-p})\Sigma^TU^Tb \\ &= b^TU\operatorname{diag}(\frac{\sigma_1^2}{(\sigma_1^2 + 2\lambda)^2}, \frac{\sigma_2^2}{(\sigma_2^2 + 2\lambda)^2}, ..., \frac{\sigma_r^2}{(\sigma_r^2 + 2\lambda)^2}, \underbrace{0, ..., 0}_{m-p})U^Tb.\end{aligned}$$

Oznaczając $y := U^Tb$ mamy więc

$$\|x(\lambda)\|^2 = \sum_{j=1}^{r} \frac{y_j^2}{(\sigma_j^2 + 2\lambda)^2}. \tag{2.30}$$

Z założenia $\rho < \rho_0$ i z równości (2.27) i (2.29) otrzymujemy więc

$$\lim_{\lambda\downarrow 0} h(\lambda) = \lim_{\lambda\downarrow 0} \|x(\lambda)\|^2 - \rho^2 > \lim_{\lambda\downarrow 0} \|x(\lambda)\|^2 - \rho_0^2 = \lim_{\lambda\downarrow 0} \sum_{j=1}^{r} \frac{y_j^2}{(\sigma_j^2 + 2\lambda)^2} - \sum_{j=1}^{r} \frac{1}{\sigma_j^2} y_j^2 = 0.$$

(b) Oczywiście $\lim_{\lambda\to+\infty} f(\lambda) = -\rho^2 < 0$.

(c) Pokażemy, że h jest malejąca. W tym celu policzymy jej pochodną. Z równości (2.30) otrzymujemy

$$\frac{dh(\lambda)}{d\lambda} = -4 \sum_{j=1}^{n} \frac{y_j^2}{(\sigma_j^2 + 2\lambda)^3} < 0.$$

(d) f jest funkcją wypukłą na $[0, +\infty)$, bo

$$\frac{d^2h(\lambda)}{d\lambda^2} = 24 \sum_{j=1}^{n} \frac{y_j^2}{(\sigma_j^2 + 2\lambda)^4} > 0.$$

Teraz równanie $h(\lambda) = 0$ możemy rozwiązać iteracyjnie stosując metodę Newtona

$$\lambda_{k+1} = \lambda_k - (\frac{dh(\lambda_k)}{d\lambda})^{-1} h(\lambda),$$

gdzie $\lambda_0 > 0$ jest takie, aby $h(\lambda_0) > 0$. Wówczas ciąg λ_k będzie zbieżny do jedynego miejsca zerowego funkcji f.

Dotychczas przyjmowaliśmy, że parametr $\rho > 0$ jest ustalony. Przeanalizujmy teraz, jak będzie zmieniać się mnożnik Lagrange'a λ w zależności od zmiany $\rho \in (0, +\infty)$. Z rozważań przedstawionych wyżej wynika, że dla $\rho \geq \rho_0$ mamy $\lambda(\rho) = 0$. Niech teraz $\rho < \rho_0$. Ponieważ $\|x(\lambda)\|^2$ jest funkcją malejącą zmiennej λ, więc rozwiązanie równania $\|x(\lambda)\|^2 = \rho^2$ maleje wraz ze wzrostem $\rho \in (0, \rho_0)$, a więc λ jest malejącą funkcją zmiennej ρ.

Rozważmy teraz zadanie

$$\begin{array}{ll} \text{minimalizować} & f(x) = \frac{1}{2}\|Ax - b\|^2 + \alpha\|x\|^2, \\ \text{względem} & x \in \mathbb{R}^n, \end{array} \tag{2.31}$$

gdzie $\alpha > 0$. Zadanie to nazywa się *regularyzacją Tichonowa* zadania najmniejszych kwadratów. Regularyzację tę stosuje się na przykład w uczeniu maszynowym w przypadku, gdy zadanie (2.25) nie ma jednoznacznego rozwiązania. Jest to zadanie mocno wypukłe ze względu na mocno wypukły składnik regularyzacyjny $\alpha\|x\|^2$. Zatem posiada ono jednoznacznie określone rozwiązanie. Nietrudno zauważyć, że rozwiązanie to ma postać

$$x = (A^T A + 2\alpha I)^{-1} A^T b. \tag{2.32}$$

Porównując wzory (2.28) i (2.32) widzimy, że dla parametru $\rho > 0$ w zadaniu (2.26) dobranego tak, aby $\lambda = \alpha$ oba zadania (2.26) i (2.31) są sobie równoważne.

Przykład 2.3.28 Dane jest zadanie programowania liniowego w tzw. *postaci klasycznej*:

$$\begin{array}{rr} \text{maksymalizować} & c^T x \\ \text{względem} & x \in \mathbb{R}^n \\ \text{przy ograniczeniach} & Ax \leq b, \\ & x \geq 0, \end{array} \tag{2.33}$$

gdzie $c \in \mathbb{R}^n$, $b \in \mathbb{R}^m$ i A jest macierzą typu $m \times n$. Przedstawimy postać warunków Kuhna–Tuckera dla tego zadania. Przypisując ograniczeniom $Ax - b \leq 0$ wektor mnożników Lagrange'a

$y \in \mathbb{R}^m$, zaś ograniczeniom $-x \leq 0$ – wektor mnożników Lagrange'a $u \in \mathbb{R}^n$, otrzymamy funkcję Lagrange'a $L : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^n$ w postaci

$$L(x, y, u) = -c^T x + y^T (Ax - b) - u^T x.$$

Warunki Kuhna–Tuckera przyjmą postać

$$\begin{aligned} -c + A^T y - u &= 0, \\ Ax &\leq b, \\ x &\geq 0, \\ y &\geq 0, \\ u &\geq 0, \\ y^T (Ax - b) &= 0, \\ u^T x &= 0. \end{aligned}$$

Czytelnikowi pozostawimy dowód tego, że układ ten jest równoważny układowi

$$\begin{aligned} Ax &\leq b, \\ A^T y &\geq c, \\ x &\geq 0, \\ y &\geq 0, \\ c^T x &= b^T y. \end{aligned} \tag{2.34}$$

Rozważmy teraz zadanie

$$\begin{array}{rl} \text{minimalizować} & b^T y \\ \text{względem} & y \in \mathbb{R}^m \\ \text{przy ograniczeniach} & A^T y \geq c, \\ & y \geq 0. \end{array} \tag{2.35}$$

Zadanie to nazywa się zadaniem dualnym do zadania (2.33). Zauważmy, że dla pary $(x, y) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m$ rozwiązań dopuszczalnych zadań (2.33) i (2.35) (lub inaczej dla rozwiązań czterech pierwszych nierówności układu (2.34)) zachodzą nierówności

$$c^T x \leq (A^T y)^T x = y^T A x \leq y^T b = b^T y,$$

czyli optymalna wartość funkcji celu zadania (2.33) nie przewyższa optymalnej wartości funkcji celu zadania (2.35). Jest to tzw. słabe twiedzenie o dualności dla zadania programowania liniowego. Jeśli więc para (x^*, y^*) jest rozwiązaniem układu (2.34) (przypominamy, że jest on równoważny warunkom KT dla zadania (2.33)), to x^* jest rozwiązaniem optymalnym zadania (2.33), zaś y^* jest rozwiązaniem optymalnym zadania (2.35) (porównaj [Ceg02, Twierdzenie 4.2.1]). Ogólniejszy fakt (dla zadania minimalizacji wypukłej) podamy w ustępie 2.4.

2.3.2 Warunki regularności ograniczeń

Podstawowy warunek regularności ograniczeń wystepujący w twierdzeniu Karusha–Kuhna–Tuckera jest generalnie trudny do bezpośredniego sprawdzenia. Dlatego często zastępuje się go jednym z mocniejszych warunków, któreo sprawdzenie jest dużo prostsze. Podamy teraz kolekcję warunków wystarczających na to, aby dla zadania minimalizacji z ograniczeniami (2.7) w danym punkcie dopuszczalnym $\bar{x}$ był spełniony był warunek regularności Kuhna–Tuckera $T_{lin}(\bar{x}) = T(\bar{x})$ (zwany też warunkiem regularności Abadiego). Spełnienie jednego z tych warunków pociąga więc w szczególności spełnienie podstawowego warunku regularności.

Definicja 2.3.29 Niech $\bar{x} \in X$. Jeśli wszystkie ograniczenia aktywne $i \in A(\bar{x})$ są liniowe, to mówimy, że w punkcie $\bar{x}$ spełniony jest *warunek regularności* (*ograniczeń*) *Karlina.*

Twierdzenie 2.3.30 *Niech $\bar{x} \in X$. Jeśli w punkcie $\bar{x}$ spełniony jest warunek regularności Karlina, to w punkcie tym spełniony jest warunek regularności Kuhna–Tuckera lub Abadiego (ang. Abadie constraint qualification – ACQ).*

Dowód. Niech $\bar{x} \in X$. Przypuśćmy, że ograniczenia $i \in A(\bar{x})$ są liniowe. Ponieważ $\bar{x} \in X$, więc zgodnie z uwagą 2.3.7 zbiór $T(\bar{x})$ nie zmieni się po usunięciu ograniczeń nieaktywnych. Po ich usunięciu pozostaną tylko ograniczenia liniowe i wobec tego $T(\bar{x}) = T_{lin}(\bar{x})$. ■

Definicja 2.3.31 Niech $\bar{x} \in X$. Jeśli gradienty wszystkich ograniczeń aktywnych $i \in A(\bar{x})$ są liniowo niezależne, to mówimy, że w punkcie $\bar{x}$ spełniony jest *warunek regularności* (*ograniczeń*) *Fiacco–McCormicka* (ang. *linear independence constraint qualification* – LICQ).

Twierdzenie 2.3.32 *Niech $\bar{x} \in X$. Jeśli w punkcie $\bar{x}$ spełniony jest warunek regularności Fiacco–McCormicka (LICQ), to w punkcie tym spełniony jest warunek regularności Kuhna–Tuckera.*

Dowód. Niech $\bar{x} \in X$ i niech wektory $a_i = \nabla c_i(\bar{x}), i \in A(\bar{x})$ będą liniowo niezależne. Bez szkody dla ogólności rozważań możemy przyjąć, że $A(\bar{x}) = \{1, ...l\}$. Uzupełnijmy te wektory o wektory $b_i, i = l+1, ..., n$ do bazy w $\mathbb{R}^n$. Oznaczmy $J = [a_1, ..., a_l, b_{l+1}, ..., b_n]$. Niech $s \in T_{lin}(\bar{x})$. Pokażemy, że $s \in T(\bar{x})$. W tym celu dla ustalonego $t \in \mathbb{R}$ rozważmy układ n równań ze względu na x:

$$\begin{array}{ll} r_i(x,t) = c_i(x) - ta_i^T s = 0, & i = 1, ..., l, \\ r_i(x,t) = b_i^T(x - \bar{x}) - tb_i^T s = 0, & i = l+1, ..., n, \end{array}$$

który będziemy zapisywać skrótowo $r(x,t) = 0$. Dla $t = 0$ układ ten posiada rozwiązanie $x = \bar{x}$. Ponadto dla dostatecznie małych $t > 0$ każde rozwiązanie l pierwszych równań powyższego układu (a więc i każde rozwiązanie x całego układu) jest rozwiązaniem dopuszczalnym. Wynika to z postaci zbioru $T_{lin}(\bar{x})$ danej równością (2.15). Zauważmy, że $J = \nabla_x r(\bar{x}, t)$ i że macierz ta typu $n \times n$ jest nieosobliwa, ponieważ jest pełnego rzędu kolumnowego. Zatem – zgodnie z twierdzeniem 1.5.16 o funkcji uwikłanej – równanie $r(x,t) = 0$ przedstawia w pewnym otoczeniu punktu $(\bar{x}, 0) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}$ funkcję $x : \mathbb{R} \to \mathbb{R}^n$ taką, że $r(x(t), t) = 0$. Ponadto funkcja ta jest określona jednoznacznie i jest klasy C_1. Oznaczmy

$$\frac{dx(t)}{dt} := \left[\frac{dx_1(t)}{dt}, ..., \frac{dx_n(t)}{dt}\right],$$

$$\nabla r(x(t), t) := \begin{bmatrix} \frac{\partial r_1(x(t),t)}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial r_n(x(t),t)}{\partial x_1} \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ \frac{\partial r_1(x(t),t)}{\partial x_n} & \cdots & \frac{\partial r_n(x(t),t)}{\partial x_n} \\ \frac{\partial r_1(x(t),t)}{\partial t} & \cdots & \frac{\partial r_n(x(t),t)}{\partial t} \end{bmatrix}$$

oraz

$$\nabla_x r(x(t),t) := \begin{bmatrix} \frac{\partial r_1(x(t),t)}{\partial x_1} & ... & \frac{\partial r_n(x(t),t)}{\partial x_1} \\ ... & ... & ... \\ \frac{\partial r_1(x(t),t)}{\partial x_n} & ... & \frac{\partial r_n(x(t),t)}{\partial x_n} \end{bmatrix}$$

i

$$\frac{\partial r(x(t),t)}{\partial t} := (\frac{\partial r_1(x(t),t)}{\partial t}, ..., \frac{\partial r_n(x(t),t)}{\partial t}) = -s^T[a_1,...,a_l,b_{l+1},...,b_n] = -s^T J.$$

Mamy oczywiście

$$\nabla r(x(t),t) = \begin{bmatrix} \nabla_x r(x(t),t) \\ \frac{\partial r(x(t),t)}{\partial t} \end{bmatrix}$$

oraz $\frac{d(x(t),t)}{dt} = [\frac{dx(t)}{dt}, 1]$. Stosując teraz wzór na pochodną funkcji złożonej (patrz twierdzenie 1.5.13) otrzymamy w otoczeniu punktu $(\bar{x}, 0)$

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{dr(x(t),t)}{dt} \\ &= \frac{d(x(t),t)}{dt} \cdot \nabla r(x(t),t) \\ &= \left[\frac{dx(t)}{dt}, 1\right] \begin{bmatrix} \nabla_x r(x(t),t) \\ \frac{\partial r(x(t),t)}{\partial t} \end{bmatrix} \\ &= \frac{dx(t)}{dt} \cdot \nabla_x r(x(t),t) + 1 \cdot \frac{\partial r(x(t),t)}{\partial t} \\ &= \frac{dx(t)}{dt} \cdot \nabla_x r(x(t),t) - s^T J, \end{aligned}$$

czyli dla $t = 0$

$$0 = \left(\frac{dx(t)}{dt}\right)_{t=0} \cdot \nabla_x r(x(0),0) - s^T J.$$

Biorąc pod uwagę, że $\nabla_x r(x(0),0) = J$ mamy więc

$$0 = \left(\frac{dx(t)}{dt}\right)_{t=0} \cdot J - s^T J$$

Ponieważ macierz J jest nieosobliwa, więc mnożąc powyższą równość z prawej strony przez macierz J^{-1} otrzymamy $\left(\frac{dx(t)}{dt}\right)_{t=0} = s^T$, co zgodnie z definicją kierunku dopuszczalnego oznacza, że $s \in T(\bar{x})$. Zatem $T_{lin}(\bar{x}) \subseteq T(\bar{x})$. Ponieważ inkluzja w drugą stronę jest zawsze prawdziwa (patrz lemat 2.3.12), więc $T_{lin}(\bar{x}) = T(\bar{x})$, czyli spełniony jest warunek regularności ograniczeń Kuhna–Tuckera. ■

Definicja 2.3.33 Niech $\bar{x} \in X$. Jeśli gradienty wszystkich ograniczeń równościowych $\nabla c_i(\bar{x})$, $i \in E$, są liniowo niezależne oraz istnieje wektor $d \in \mathbb{R}^n$, taki że $d^T \nabla c_i(\bar{x}) < 0$ dla wszystkich aktywnych ograniczeń nierównościowych $i \in I(\bar{x})$ i $d^T \nabla c_i(\bar{x}) = 0$ dla wszystkich ograniczeń równościowych $i \in E$, to mówimy, że w punkcie $\bar{x}$ spełniony jest *warunek regularności* (*ograniczeń*) *Mangasariana–Fromovitza* (ang. *Mangasarian–Fromovitz constraint qualification* – MFCQ).

Ćwiczenie 2.3.34 Sprawdzić, że dla zadania

$$\begin{array}{rr} \text{minimalizować} & x_2 \\ \text{względem} & x \in \mathbb{R}^2 \\ \text{przy ograniczeniach} & -x_2 \leq 0 \\ & x_1 - x_2 \leq 0 \\ & -x_1 - x_2 \leq 0 \end{array}$$

w punkcie $x = 0$ spełniony jest warunek regularności *Mangasariana–Fromovitza (MFCQ), natomiast nie jest spełniony w tym punkcie warunek regularności Fiacco–McCormicka (LICQ).*

Twierdzenie 2.3.35 *Niech $\bar{x} \in X$. Jeśli w punkcie $\bar{x}$ spełniony jest warunek regularności Mangasariana–Fromovitza (MFCQ), to w punkcie tym spełniony jest warunek regularności Kuhna–Tuckera.*

Dowód pomijamy, a zainteresowanych odsyłamy do podręcznika Geigera i Kanzowa [GK02, twierdzenie 2.41].

Uwaga 2.3.36 Jeśli spełniony jest warunek regularności Fiacco–McCormicka (LICQ), to spełniony jest warunek regularności Mangasariana–Fromovitza (MFCQ). Istotnie. Przypuśćmy, że gradienty wszystkich ograniczeń aktywnych $\nabla c_i(\bar{x})$, $i \in E \cup I(\bar{x})$, stanowią liniowo niezależny układ wektorów. Oczywiście ich liczba nie może przekroczyć n. Oznaczmy

$$A = [\nabla c_E(\bar{x}), \nabla c_{I(\bar{x})}(\bar{x}), A'],$$

gdzie kolumny bloku A' stanowią uzupełnienie układu złożonego z pozostałych kolumn tej macierzy do bazy w $\mathbb{R}^n$. Takie uzupełnienie istnieje, gdyż układ złożony z kolumn dwóch pierwszych bloków jest liniowo niezależny, zgodnie z warunkiem regularności Fiacco–McCormicka. Niech $r = \#I(\bar{x})$ i niech $b = [0, -e^T, 0]^T \in \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^r \times \mathbb{R}^{n-m-r}$. Ponieważ A jest macierzą nieosobliwą, więc układ równań $A^T d = b$ posiada dokładnie jedno rozwiązanie. Nietrudno zauważyć, że rozwiązanie to spełnia warunki $d^T \nabla c_i(\bar{x}) = 0$ dla $i \in E$ i $d^T \nabla c_i(\bar{x}) = -1$ dla $i \in I(\bar{x})$. Spełniony jest więc warunek regularności Mangasariana–Fromovitza.

Kolejny warunek regularności stosowany jest dla zadań minimalizacji wypukłej. Zbiór rozwiązań dopuszczalnych ma wówczas postać

$$X = \{x \in \mathbb{R}^n : a_i^T x = b_i \text{ dla } i \in E,\ c_i(x) \leq 0 \text{ dla } i \in I\}, \tag{2.36}$$

gdzie $c_i : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, $i \in I$, są funkcjami wypukłymi.

Definicja 2.3.37 Przypuśćmy, że w zadaniu (2.7) wszystkie ograniczenia równościowe są liniowe, zaś ograniczenia nierównościowe są wypukłe. Mówimy, że spełniony jest warunek *regularności* (*ograniczeń*) *Slatera* (ang. *Slater costraint qualification – SCQ*), jeśli istnieje punkt dopuszczalny $x' \in X$, taki że $c_i(x') < 0$ dla $i \in I$.

W przeciwieństwie do innych warunków regularności, warunek Slatera dotyczy zadania (2.7), a nie konkretnego punktu dopuszczalnego tego zadania.

Twierdzenie 2.3.38 *Jeśli dla zbioru rozwiązań dopuszczalnych X postaci* (2.36) *spełniony jest warunek Slatera, to w dowolnym punkcie dopuszczalnym $\bar{x}$ spełniony jest warunek regularności ograniczeń Kuhna–Tuckera $T_{lin}(\bar{x}) = T(\bar{x})$.*

Dowód. Niech $\bar{x} \in X$ będzie dowolny. Oznaczmy

$$T_{int}(\bar{x}) = \{s \in \mathbb{R}^n : a_i^T s = 0 \text{ dla } i \in E \text{ oraz } \nabla c_i(\bar{x})^T s < 0 \text{ dla } i \in I(\bar{x})\}.$$

Dowód podzielimy na kilka etapów.

(a) Niech punkt $x' \in X$ będzie taki, że $a_i^T x' = b_i$ dla $i \in E$ i $c_i(x') < 0$ dla $i \in I$. Pokażemy, że wówczas

$$T_{int}(\bar{x}) \neq \emptyset.$$

Istotnie. Na mocy wypukłości funkcji c_i mamy dla dowolnego $x' \in X$

$$0 > c_i(x') \geq c_i(\bar{x}) + \nabla c_i(x)^T (x' - \bar{x}),$$

$i \in I$, oraz

$$a_i^T (x' - \bar{x}) = a_i^T x' - a_i^T \bar{x} = b_i - b_i = 0,$$

$i \in E$. Zatem $s = x' - \bar{x} \in T_{int}(\bar{x})$, a więc $T_{int}(\bar{x}) \neq \emptyset$.

(b) Pokażemy, że

$$T_{int}(\bar{x}) \subseteq T(\bar{x}). \tag{2.37}$$

Niech $s \in T_{int}(\bar{x})$ będzie wektorem unormowanym. Dla $i \in E$ mamy

$$a_i^T x(t) = a_i^T (\bar{x} + ts) = a_i^T \bar{x} + t a_i^T s = b_i.$$

Niech $\varepsilon > 0$ będzie takie, że dla $x \in B(\bar{x}, \varepsilon)$ zachodzą nierówności $c_i(x) \leq 0$ dla $i \notin I(\bar{x})$. Takie ε istnieje na mocy ciągłości funkcji c_i. Niech $x(t) = \bar{x} + ts$ dla $0 < t < \varepsilon$. Rozwińmy funkcję $c_i, i \in I(\bar{x})$, we wzór Taylora w otoczeniu punktu $\bar{x}$. Mamy

$$c_i(x(t)) = c_i(\bar{x}) + t s^T \nabla c_i(\bar{x}) + o(t),$$

czyli

$$\frac{c_i(x(t)) - c_i(\bar{x})}{t} = \underbrace{s^T \nabla c_i(\bar{x})}_{<0} + \underbrace{\frac{o(t)}{t}}_{\to 0 \text{ gdy } t \to 0+}.$$

W konsekwencji $c_i(x(t)) < c_i(\bar{x}) \leq 0$ dla $i \in I(\bar{x})$ i dla dostatecznie małego $t > 0$. Otrzymaliśmy więc, że $x(t) \in X$. Zatem $s \in T(\bar{x})$, gdyż $s = \frac{x(t) - \bar{x}}{t} = \lim_{t \to 0+} \frac{x(t) - \bar{x}}{t}$.

(c) Pokażemy teraz, że

$$\operatorname{cl} T_{int}(\bar{x}) = T_{lin}(\bar{x})$$

Niech $s \in T_{lin}(\bar{x})$ i niech $s' \in T_{int}(\bar{x})$. Zauważmy, że dla dowolnego $\lambda \in [0, 1)$

$$s(\lambda) = \lambda s + (1 - \lambda) s' \in T_{int}(\bar{x}).$$

Dalej mamy

$$\lim_{\lambda \to 1-} s(\lambda) = s \in T_{lin}(\bar{x}).$$

Otrzymaliśmy więc, że

$$T_{lin}(\bar{x}) \subseteq \operatorname{cl} T_{int}(\bar{x}). \tag{2.38}$$

Inkluzja przeciwna jest oczywista, gdyż iloczyn skalarny jest funkcją ciągłą.

(d) Na mocy (2.37) i lematu 2.3.12 mamy

$$T_{int}(\bar{x}) \subseteq T(\bar{x}) \subseteq T_{lin}(\bar{x}).$$

Inkluzja (2.38) oraz fakt, że dwa ostatnie zbiory w powyższych inkluzjach są domknięte dają

$$T_{lin}(\bar{x}) \subseteq \operatorname{cl} T_{int}(\bar{x}) \subseteq T(\bar{x}) \subseteq T_{lin}(\bar{x}).$$

Stąd

$$T_{lin}(\bar{x}) = T(\bar{x}),$$

czyli spełniony jest warunek regularności Kuhna–Tuckera, zwany inaczej warunkiem Abadiego (ACQ).

$\blacksquare$

Zależności między poszczególnymi warunkami regularności możemy ująć w następujący schemat

$$\begin{array}{ccccccc} & & & \boxed{\text{KCQ}} & & \\ & & & \Downarrow & & \\ \boxed{\text{LICQ}} & \Longrightarrow & \boxed{\text{MFCQ}} & \Longrightarrow & \boxed{\text{ACQ}} & \Longrightarrow & \boxed{\text{BRC}} \\ & & & \Uparrow & & \\ & & & \boxed{\text{SCQ}} & & \end{array}$$

Uwaga 2.3.39 Z twierdzenia 2.3.38 wynika, że warunek Slatera ma charakter globalny, w przeciwieństwie do innych warunków regularności ograniczeń.

2.3.3 Warunki rzędu drugiego istnienia minimum

Przypomnijmy, że w warunkach koniecznych/wystarczających dla zadań minimalizacji bez ograniczeń występuje stacjonarność i nieujemna/dodatnia krzywizna funkcji celu. W ustępie 2.3.1 pokazaliśmy, że dla zadań minimalizacji z ograniczeniami warunkiem koniecznym rzędu pierwszego jest stacjonarność funkcji Lagrange'a (przy zajściu podstawowego warunku regularności). Możemy więc się spodziewać, że w warunkach rzędu drugiego dla tych zadań występować będzie nieujemna/dodatnia krzywizna funkcji Lagrange'a. Rzeczywiście tak jest, przy czym krzywizna ta dotyczy kierunków dopuszczalnych.

W ustępie tym zakładamy, że funkcje f, c_i, $i \in E \cup I$ są klasy C_2.

Definicja 2.3.40 Macierz

$$W(x,y) := \nabla^2_{xx} L(x,y) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 L(x,y)}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 L(x,y)}{\partial x_1 \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 L(x,y)}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \frac{\partial^2 L(x,y)}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 L(x,y)}{\partial x_2^2} & \cdots & \frac{\partial^2 L(x,y)}{\partial x_2 \partial x_n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial^2 L(x,y)}{\partial x_n \partial x_1} & \frac{\partial^2 L(x,y)}{\partial x_n \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 L(x,y)}{\partial x_n^2} \end{bmatrix}$$

nazywamy *hesjanem funkcji Lagrange'a* $L(x,y) = f(x) + y^T c(x)$.

Ponieważ funkcje f, c_i, $i \in E \cup I$ są klasy C_2, więc macierz $W(x,y)$ jest symetryczna.

Warunki rzędu drugiego dla ograniczeń równościowych

Rozważmy zadanie minimalizacji z ograniczeniami wyłącznie równościowymi, czyli zadanie (2.7), w którym $I = \emptyset$.

Twierdzenie 2.3.41 (warunki konieczne rzędu drugiego) *Niech dla zadania minimalizacji z ograniczeniami równościowymi*

$$\begin{array}{rl} \textit{minimalizować} & f(x) \\ \textit{względem} & x \in \mathbb{R}^n \\ \textit{przy ograniczeniach} & c_i(x) = 0, \quad i \in E = \{1, ..., m\}, \end{array} \tag{2.39}$$

istnieje lokalne rozwiązanie optymalne x^*, dla którego spełniony jest podstawowy warunek regularności. Niech y^* będzie odpowiadającym temu rozwiązaniu wektorem mnożników Lagrange'a. Wówczas funkcja Lagrange'a ma w punkcie (x^*, y^*) nieujemną krzywiznę w każdym kierunku dopuszczalnym, czyli

$$\forall_{s \in T(x^*)} \quad s^T W(x^*, y^*) s \geq 0. \tag{2.40}$$

Dowód. Niech x^* będzie rozwiązaniem optymalnym zadania (2.39) i niech w punkcie tym spełniony będzie podstawowy warunek regularności. Wówczas na mocy twierdzenia Kuhna–Tuckera istnieje odpowiadający temu rozwiązaniu wektor mnożników Lagrange'a y^*. Weźmy teraz $s \in T(x^*)$. Istnieją więc ciągi $t_k \downarrow 0$ i $x_k \in X$, $x_k \to x^*$, takie, że $s_k = \frac{x_k - x^*}{t_k} \to s$. Oznaczmy $d_k = x_k - x^* = t_k s_k$. Jasne jest, że $c(x^* + d_k) = 0$ i w konsekwencji

$$f(x^* + d_k) = L(x^* + d_k, y)$$

dla dowolnego y. Na mocy uwagi 2.3.23 mamy $f(x^*) = L(x^*, y^*)$. Zatem, po rozwinięciu funkcji Lagrange'a we wzór Taylora z resztą Peana w otoczeniu punktu (x^*, y^*) mamy

$$f(x^*) \leq f(x^* + d_k) = L(x^* + d_k, y^*) =$$

$$\underbrace{L(x^*, y^*)}_{=f(x^*)} + d_k^T \underbrace{\nabla_x L(x^*, y^*)}_{=0} + \frac{1}{2} d_k^T W(x^*, y^*) d_k + o(\|d_k\|^2),$$

czyli

$$\frac{1}{2} t_k^2 s_k^T W(x^*, y^*) s_k + o(\|d_k\|^2) \geq 0.$$

Po podzieleniu przez $t_k^2 > 0$ otrzymamy

$$\frac{1}{2} s_k^T W(x^*, y^*) s_k + \frac{o(\|d_k\|^2)}{t_k^2} \geq 0.$$

Ponieważ

$$\frac{o(\|d_k\|^2)}{t_k^2} = \frac{o(\|d_k\|^2)}{\|d_k\|^2} \cdot \|s_k\|^2 \to 0$$

więc granicy mamy

$$s^T W(x^*, y^*) s \geq 0.$$

■

Twierdzenie 2.3.42 (warunki wystarczające rzędu drugiego) *Niech dla zadania minimalizacji z ograniczeniami równościowymi* (2.39) *istnieje punkt Kuhna–Tuckera* (x^*, y^*) *(np. spełniony będzie podstawowy warunek regularności). Jeśli funkcja Lagrange'a ma w punkcie* (x^*, y^*) *dodatnią krzywiznę w każdym niezerowym kierunku dopuszczalnym, czyli*

$$\forall_{0 \neq s \in T(x^*)} \quad s^T W(x^*, y^*) s > 0, \tag{2.41}$$

to punkt x^* *jest rozwiązaniem optymalnym tego zadania.*

Dowód. (szkic). Najpierw rozwija się funkcję Lagrange'a we wzór Taylora z resztą Lagrange'a. Następnie, podobnie jak w dowodzie twierdzenia 2.2.2, korzystając z twierdzenia 1.4.8 pokazuje się, że $s^T W^* s \geq \lambda s^T s$ dla pewnej stałej $\lambda > 0$. ■

Niech $s \in T(x^*)$, $s \neq 0$. Zgodnie z lematem 2.3.12 i z równością 2.15 zachodzą równości

$$(\nabla c_i(x^*))^T s = 0, i = 1, 2, ..., m. \tag{2.42}$$

Ten układ równań opisuje podprzestrzeń liniową $\ker(\nabla c(x^*))^T$ wymiaru $p \geq n - m$. Niech $\mathcal{Z} := \{z_1, ..., z_p\}$ będzie bazą tej podprzestrzeni i niech $Z = [z_1, ..., z_p]$. Bez szkody dla ogólności rozważań załóżmy, że spełniony jest warunek LICQ (macierz $A := (\nabla c(x^*))^T$ jest pełnego rzędu wierszowego), wówczas $p = n - m$. W razie potrzeby możemy bowiem usunąć ograniczenia aktywne w punkcie x^*, których gradienty są liniowo zależne od pozostałych. Przy spełnieniu LICQ w punkcie x^* mamy $T(x^*) = T_{lin}(x^*) = \ker(\nabla c(x^*))^T$(patrz twierdzenie 2.3.32). Pokażemy teraz inny sosób zapisu warunków (2.40) i (2.41). W tym celu zapiszmy macierz A w postaci blokowej $A := [A_B, A_N]$, gdzie A_B jest macierzą nieosobliwą (A_B nazywamy macierzą bazową, zaś A_N – macierzą niebazową). Zgodnie z twierdzeniem Kroneckera-Capellego dowolne rozwiązanie układu (2.42) możemy zapisać w postaci $s = \begin{bmatrix} -A_B^{-1} A_N x_N \\ x_N \end{bmatrix}$, gdzie x_N jest $(n-m)$-wymiarowym wektorem parametrów. Przyjmując $x_N = e_i$ otrzymamy wektor $z_i := \begin{bmatrix} -A_B^{-1} A_{m+i} \\ e_i \end{bmatrix}$, gdzie $e_i \in \mathbb{R}^{n-m}$ jest i-tym wersorem jednostkowym, $i = 1, 2, ..., n - m$. Wektory $z_i, i = 1, 2, ..., n - m$ stanowią bazę przestrzeni $\ker(\nabla c(x^*))^T$, zaś macierz Z . której kolumnami są z_i, $i = 1, 2, ..., n-m$, ma postać

$$Z = \begin{bmatrix} -A_B^{-1} A_N \\ I \end{bmatrix}.$$

Niezależnie od przyjętej bazy $\mathcal{Z}$ przestrzeni $\ker(\nabla c(x^*))^T$, dowolny wektor $s \in \ker(\nabla c(x^*))^T$ ma postać $s = Zu$, gdzie $u \in \mathbb{R}^{n-m}$. Zatem warunki (2.40) i (2.41) możemy zapisać w postaci

$$\forall_{u \in \mathbb{R}^{n-m}} \quad u^T Z^T \nabla^2_{xx} L(x^*, y^*) Zu \geq 0$$

i

$$\forall_{0 \neq u \in \mathbb{R}^{n-m}} \quad u^T Z^T \nabla^2_{xx} L(x^*, y^*) Zu > 0.$$

Inne sposoby wyboru macierzy Z będą przedstawione w ustępie 4.1.1. Macierz $Z^T \nabla^2_{xx} L(x^*, y^*) Z$ nazywa się *hesjanem zredukowanym* (ang. *reduced Hessian*) Zatem twierdzenia 2.3.56 i 2.3.42 możemy przedstawić w następujących postaciach.

Twierdzenie 2.3.43 *Niech dla zadania minimalizacji z ograniczeniami równościowymi* (2.39) *istnieje lokalne rozwiązanie optymalne x^*, dla którego spełniony jest LICQ. Niech y^* będzie odpowiadającym temu rozwiązaniu wektorem mnożników Lagrange'a. Wówczas hesjan zredukowany $Z^T \nabla^2_{xx} L(x^*, y^*) Z$ jest określony nieujemnie, czyli*

$$\forall_{u \in \mathbb{R}^{n-m}} \quad u^T Z^T \nabla^2_{xx} L(x^*, y^*) Zu \geq 0. \tag{2.43}$$

Twierdzenie 2.3.44 *Niech dla zadania minimalizacji z ograniczeniami równościowymi* (2.39) *istnieje punkt Kuhna–Tuckera (x^*, y^*) (np. spełniony będzie LICQ) i niech Z będzie macierzą typu $n \times p$, której kolumny stanowią bazę przestrzeni $\ker(\nabla c(x^*))^T$. Jeśli hesjan zredukowany $Z^T \nabla^2_{xx} L(x^*, y^*) Z$ jest określony dodatnio, czyli*

$$\forall_{0 \neq u \in \mathbb{R}^{n-m}} \quad u^T Z^T \nabla^2_{xx} L(x^*, y^*) Zu > 0, \tag{2.44}$$

to punkt x^* jest rozwiązaniem optymalnym tego zadania.

W wielu podręcznikach, szczególnie z zakresu ekonomii matematycznej, powyższe twierdzenie zapisywane jest przy użyciu tzw. hesjanu obrzeżonego.

Definicja 2.3.45 Macierz

$$H(x, y) := \nabla^2 L(x, y) = \begin{bmatrix} \nabla^2_{xx} L(x, y) & \nabla c(x) \\ (\nabla c(x))^T & 0 \end{bmatrix} \tag{2.45}$$

nazywamy hesjanem obrzeżonym (ang: *bordered hessian*).

Zauważmy, że $\nabla^2_{yx} L(x, y) = \nabla c(x)$ oraz $\nabla^2_{xy} L(x, y) = (\nabla c(x))^T$, gdzie $\nabla c(x) := [\nabla c_1(x), ...\nabla c_m(x)]$ oznacza macierz Jacobi'ego odwzorowania $c : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$. Wobec tego hesjan obrzeżony możemy przedstawić w postaci blokowej

$$H(x, y) = \begin{bmatrix} \nabla^2_{xx} L(x, y) & \nabla^2_{yx} L(x, y) \\ \nabla^2_{xy} L(x, y) & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \nabla^2_{xx} L(x, y) & \nabla c(x) \\ (\nabla c(x))^T & 0 \end{bmatrix}$$

albo w postaci rozwiniętej

$$H(x, y) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 L(x,y)}{\partial x_1^2} & \cdots & \frac{\partial^2 L(x,y)}{\partial x_1 \partial x_n} & \frac{\partial c_1(x)}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial c_m(x)}{\partial x_1} \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial^2 L(x,y)}{\partial x_n \partial x_1} & \cdots & \frac{\partial^2 L(x,y)}{\partial x_n^2} & \frac{\partial c_1(x)}{\partial x_n} & \cdots & \frac{\partial c_m(x)}{\partial x_n} \\ \frac{\partial c_1(x)}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial c_1(x)}{\partial x_n} & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial c_m(x)}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial c_m(x)}{\partial x_n} & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix}. \tag{2.46}$$

Przykład 2.3.46 Dane jest zadanie minimalizacji kwadratowej

$$\begin{array}{ll} \text{minimalizować} & f(x) = \frac{1}{2}x^T G x + c^T x \\ \text{przy ograniczeniach} & Ax = b, \end{array}$$

posiadające rozwiązanie optymalne x^*, gdzie G jest nieosobliwą macierzą symetryczną typu $n \times n$, $c \in \mathbb{R}^n$ zaś A jest macierzą typu $m \times n$. Bes szkody dla ogólności rozważań możemy założyć, że macierz A ma liniowo niezależne wiersze. Oznacza to, że spełniony jest warunek LICQ. Zgodnie z twierdzeniem KKT istnieje punkt Kuhna-Tuckera (x^*, y^*) dla tego zadania. Układ KT ma postać

$$\begin{aligned} Gx + A^T y &= -c \\ Ax &= b \end{aligned}$$

albo w zapisie blokowym

$$\begin{bmatrix} G & A^T \\ A & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -c \\ b \end{bmatrix}.$$

Zauważmy, że macierz tego układu jest hesjanem obrzeżonym tego zadania. Można pokazać, że układ ten ma dokładnie jedno rozwiązanie (ogólniejszy fakt pokażemy w lemacie 2.3.61), zatem hesjan obrzeżony dla tego zadania jest macierzą nieosobliwą.

Hesjan obrzeżony jest często przestawiany w równoważnej postaci

$$H(x,y) = \begin{bmatrix} 0 & (\nabla c(x))^T \\ \nabla c(x) & \nabla^2_{xx} L(x,y) \end{bmatrix} \tag{2.47}$$

wynikającej z różniczkowania najpierw względem mnożników Lagrange'a, a potem względem zmiennych zadania. W dalszej części będziemy używać tej ostatniej konwencji. W postaci rozwiniętej hesjan obrzeżony można więc zapisać jako

$$H(x,y) = \begin{bmatrix} 0 & \dots & 0 & \frac{\partial c_1(x)}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial c_1(x)}{\partial x_n} \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & \frac{\partial c_m(x)}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial c_m(x)}{\partial x_n} \\ \frac{\partial c_1(x)}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial c_m(x)}{\partial x_1} & \frac{\partial^2 L(x,y)}{\partial x_1^2} & \dots & \frac{\partial^2 L(x,y)}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial c_1(x)}{\partial x_n} & \dots & \frac{\partial c_m(x)}{\partial x_n} & \frac{\partial^2 L(x,y)}{\partial x_n \partial x_1} & \dots & \frac{\partial^2 L(x,y)}{\partial x_n^2} \end{bmatrix}. \tag{2.48}$$

Niech $H_i(x,y)$ oznacza i-ty wiodący minior główny hesjanu obrzeżonego $H(x,y)$ danego równością (2.48), $i = 1, ..., n+m$, czyli $H_i(x,y) = 0$ dla $i = 1, ..., m$, i

$$H_i(x,y) = \det \begin{bmatrix} 0 & \dots & 0 & \frac{\partial c_1(x)}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial c_1(x)}{\partial x_{i-m}} \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & \frac{\partial c_{pm}(x)}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial c_m(x)}{\partial x_{i-m}} \\ \frac{\partial c_1(x)}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial c_m(x)}{\partial x_1} & \frac{\partial^2 L(x,y)}{\partial x_1^2} & \dots & \frac{\partial^2 L(x,y)}{\partial x_1 \partial x_{i-m}} \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial c_1(x)}{\partial x_{i-m}} & \dots & \frac{\partial c_m(x)}{\partial x_{i-m}} & \frac{\partial^2 L(x,y)}{\partial x_{i-m} \partial x_1} & \dots & \frac{\partial^2 L(x,y)}{\partial x_{i-m}^2} \end{bmatrix}$$

dla $i = m+1, ..., n+m$. Bez szkody dla ogólności rozważań możemy przyjąć, że $m < n$. Zachodzi następujące twierdzenie, które pozostawiamy bez dowodu. Zainteresowanych odsyłamy do artykułu [Man13].

Twierdzenie 2.3.47 *Niech $(x^*, y^*) \in \mathbb{R}^n \times R^m$ będzie punktem Kuhna–Tuckera dla zadania minimalizacji z ograniczeniami równościowymi (2.39). Załóżmy, że $\nabla c(x^*)$ jest pełnego rzędu kolumnowego (spełniony jest LICQ). Jeśli*

$$(-1)^m H_i(x^*, y^*) > 0 \tag{2.49}$$

dla $i = 2m+1, ..., n+m$, to punkt x^* jest rozwiązaniem optymalnym tego zadania.

Założenie o pełnym rzędzie kolumnowym macierzy $\nabla c(x^*)$ można w zasadzie opuścić. Jeśli bowiem ono nie zajdzie, to nietrudno zauważyć, że $H_{n+m}(x^*, y^*) = 0$, gdyż pierwsze m kolumn hesjanu obrzeżonego będzie liniowo zależnych.

Korzystanie z twierdzenia 2.3.47 dla dużych n i $m \ll n$ jest dość niewygodne. Trzeba bowiem wówczas obliczyć $n - m$ wyznaczników wysokiego stopnia. W tej sytuacji lepiej jest korzystać z twierdzeń 2.3.43 i 2.3.44, gdzie wystarczy zbadać określoność hesjanu zredukowanego wymiaru $n - m$.

Uwaga 2.3.48 Twierdzenie 2.3.47 podaje jedynie warunki wystarczające na to, aby dany punkt x^* był rozwiązaniem zadania (2.39). Nawet jeśli zastapimy w nierówności sotre słabymi w (2.49), to nie będą one warunkami koniecznymi. Dokładniej: Jeśli punkt x^* jest rozwiązaniem optymalnym zadania (2.39) dla którego istnieje wektor mnożników Lagrange'a y^* (ma to miejsce na przykład wówczas, gdy w punkcie x^* spełniony jest podstawowy warunek regularności), to dla hesjanu obrzeżonego $H(x^*, y^*)$ nie muszą zachodzić nierówności $(-1)^m H_i \geq 0$ dla $i = 2m+1, ..., n+m$. Innymi słowy zajście tych nierówności te nie jest warunkiem koniecznym osiągania minimum z ograniczeniami nawet przy spełnieniu podstawowego warunku regularności.

Ćwiczenie 2.3.49 Dane jest zadanie minimalizacji kwadratowej

$$\begin{array}{ll} \text{minimalizować} & f(x) = \frac{1}{2}x^T Gx + c^T x \\ \text{przy ograniczeniach} & Ax = b, \end{array}$$

gdzie $G = \begin{bmatrix} g_{11} & g_{12} \\ g_{12} & g_{22} \end{bmatrix}$ i $A = [a_1, a_2]$. Porównać dla tego zadania warunki (2.44) i (2.49).

Przykład 2.3.50 Rozważmy zadanie

$$\begin{array}{rr} \text{minimalizować} & f(x_1, x_2) = x_1^2 - (x_2 - 1)^2 \\ \text{względem} & x = (x_1, x_2) \\ \text{przy ograniczeniu} & x_1^2 + x_2^2 = 1. \end{array}$$

Funkcja Lagrange'a ma postać

$$L(x, \lambda) = x_1^2 - (x_2 - 1)^2 + \lambda(x_1^2 + x_2^2 - 1).$$

Nietrudno zauważyć, że punkt $x^* = (0, 1)$ jest rozwiązaniem tego zadania. Ponadto punkt $(x^*, \lambda^*) = (0, 1, 0)$ jest punktem KT, ale hesjan funkcji Lagrange'a

$$W(x^*, \lambda^*) = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & -2 \end{bmatrix}$$

nie jest określony. Zauważmy jednak, że $T(x^*) = \{s = (\sigma_1, \sigma_2) \in \mathbb{R}^2 : \sigma_2 = 0\}$ i $s^T W(x^*, \lambda^*) s = 2\sigma_1^2 \geq 0$ dla dowolnego kierunku dopuszczalnego $s \in T(x^*)$. Widzimy więc, że zgodnie z twierdzeniem 2.3.41 funkcja Lagrange'a ma nieujemną krzywiznę w dowolnym kierunku dopuszczalnym. Krzywizna ta jest nawet dodatnia, co zgodnie z twierdzeniem 2.3.42 również pozwala na stwierdzenie, że punkt x^* jest rozwiązaniem zadania. Możemy to również wywnioskować z twierdzenia 2.3.44. Jako bazę w (jednowymiarowej) przestrzeni $\ker(\nabla c(x^*))^T = T_{lin}(x^*) = T(x^*)$ możemy wziąć $z = (1, 0)^T$. Wówczas hesjan zredukowany ma postać

$$Z^T W(x^*, \lambda^*) Z = [1, 0] \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = 2 > 0,$$

a więc jest on dodatnio określonym, a więc x^* jest rozwiązaniem zadania. Zauważmy przy okazji, że hesjan obrzeżony ma postać

$$H(x^*, \lambda^*) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 2 \\ 0 & 2 & 0 \\ 2 & 0 & -2 \end{bmatrix},$$

zatem $H_3 = -8 < 0$. Wobec tego z twierdzenia 2.3.47 wynika również, że x^* jest rozwiązaniem zadania.

Ćwiczenie 2.3.51 Wyznaczyć punkty KT dla zadania

$$\begin{array}{rr} \text{minimalizować} & f(x) = \frac{1}{2}[(x_1 - 1)^2 + x_2^2] \\ \text{względem} & x = (x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2 \\ \text{przy ograniczeniach} & c(x) = -x_1 + \beta \xi_2^2 = 0, \end{array}$$

gdzie $\beta > 0$ jest parametrem. Zauważyć, że dla dowolnego $\beta > 0$ punktowi $x^* = (0, 0)$ odpowiada mnożnik Lagrange'a.

(a) Dla jakich β spełniony jest warunek konieczny rzędu drugiego w punkcie x^*?

(b) Dla jakich β spełniony jest warunek wystarczający rzędu drugiego w punkcie x^*?

(c) Dla jakich β punkt x^* jest rozwiązaniem zadania?

Przykład 2.3.52 Niech A będzie niezerową macierzą typy $m \times n$. Znany jest fakt, że $\|A\| := \sup_{\|x\|=1} \|Ax\| = \sqrt{\lambda_{\max}(A^T A)}$ oraz, że kres ten jest osiągnięty dla $x \in \mathbb{R}^n$ będącego wektorem własnym odpowiadającym największej wartości własnej macierzy $A^T A$ (patrz wnioski 1.4.14 i 1.4.15). W oparciu o warunek konieczny rzędu drugiego pokażemy, że kres ten jest osiągnięty wyłącznie dla takich punktów. W tym celu rozważymy zadanie

$$\begin{array}{rr} \text{minimalizować} & f(x) = -\|Ax\|^2 \\ \text{przy ograniczeniu} & \|x\|^2 = 1. \end{array}$$

i niech x będzie jego rozwiązaniem. Jest jasne, że dla dowolnego dopuszczalnego punktu x spełniony jest warunek LICQ. Zgodnie z warunkami rzędu pierwszego, istnieje mnożnik Lagrange'a λ taki, że spełnione są warunki KKT:

$$\begin{array}{rcl} -A^T Ax + \lambda x & = & 0, \\ \|x\|^2 & = & 1. \end{array}$$

Po pomnożeniu pierwszego warunku przez x^T otrzymamy $\lambda = \|Ax\|^2$. Ponieważ $A^T A$ jest nieujemnie określona, istnieje macierz ortogonalna U i macierz diagonalna D o nieujemnych elementach d_i na głównej przekątnej, $i = 1, 2, ..., n$, takie że $A^T A = UDU^T$. Bez szkody dla ogólności rozważań możemy przyjąć, że $d_1 = d_2 = ... = d_p \geq d_{p+1} ... \geq d_r > d_{r+1} = ... = d_n = 0$ dla pewnego $r = 1, 2, ..., n$. Pierwszy warunek KKT zapisujemy w postaci

$$A^T Ax = \lambda x, \tag{2.50}$$

czyli

$$Du = \lambda u, \tag{2.51}$$

gdzie $u = U^T x$. Zatem otrzymaliśmy układ jednorodny

$$(d_j - \lambda)u_j = 0,\ j = 1, 2, ..., n. \tag{2.52}$$

Hesjan funkcji Lagrange'a wynosi $W(x, \lambda) = -2A^T A + 2\lambda I$. Ponieważ $\|x\| = 1$, więc nietrudno zauważyć, że kierunek s jest dopuszczalny w punkcie x wtedy i tylko wtedy, gdy $s^T x = 0$. Zatem warunek konieczny rzędu drugiego ma postać

$$s^T W(x, \lambda)s = 2s^T(\lambda I - A^T A)s = 2s^T(\lambda UU^T - UDU^T)s = 2(U^T s)^T(\lambda I - D)(U^T s) = \sum_{j=1}^{n}(\lambda - d_j)v_j^2 \geq 0$$

dla $v = U^T s$ i dla dowolnego $s \in \mathbb{R}^n$ spełniającego warunek $s^T x = 0$. Zgodnie z twierdzeniem Cramera układ (2.52) posiada niezerowe rozwiązanie wtedy i tylko wtedy, gdy $\lambda = d_j$ dla pewnego $j = 1, 2, ..., r$. Pokażemy, że w istocie $\lambda = d_1$, co wobec $\lambda = \|Ax\|^2$ oznacza, że minimalna wartość funkcji celu wynosi $-d_1$. Przypuśćmy więc, że $\lambda < d_1$. Wówczas z (2.52) wynika, że $u_1 = 0$. Niech $s = Uv$, gdzie $v = (1, 0, .., 0)$. Dla takiego s zachodzi

$$s^T W(x, \lambda)s = \sum_{j=1}^{n}(\lambda - d_j)v_j^2 = \lambda_1 - d_1 < 0,$$

przy czym s spełnia warunek $s^T x = 0$, gdyż

$$s^T x = s^T UU^T x = (U^T s)^T(U^T x) = v^T u = 0.$$

Pokazaliśmy więc, że punktu (x, λ) warunek rzędu drugiego nie jest spełniony, a więc uzyskana sprzeczność dowodzi, że $\lambda = d_1$, co wobec równości (2.50) oznacza, że x jest wektorem własnym odpowiadającym największej wartości własnej macierzy $A^T A$.

Warunki rzędu drugiego dla ograniczeń nierównościowych

Wprowadzimy najpierw pewne pojęcia.

Definicja 2.3.53 Niech (x^*, y^*) będzie punktem KT zadania minimalizacji z ograniczeniami (2.7). Zbiór

$$A_+^* = \{i : i \in E \text{ lub } \lambda_i^* > 0\}$$

nazywa się *zbiorem ograniczeń mocno aktywnych*, zaś element tego zbioru – *ograniczeniem mocno aktywnym.* Ograniczenie aktywne, które nie jest mocno aktywne nazywa się *ograniczeniem słabo aktywnym.*

Uwaga 2.3.54 Ograniczenie mocno aktywne jest ograniczeniem aktywnym. Fakt ten wynika z warunku komplementarności (2.17e). Oznaczmy symbolem I_+^* ograniczenia nierównościowe mocno aktywne. Dla danego punktu KT (x^*, y^*) ograniczenia zadania możemy przedstawić w następującym diagramie:

$$\overbrace{\underbrace{\underbrace{\overbrace{[E \cup I_+^*]}^{A_+^*}}_{\text{mocno aktywne}} \cup \underbrace{\overbrace{[I^* \setminus I_+^*]}^{A^* \setminus A_+^*}}_{\text{słabo aktywne}}}_{\text{ograniczenia aktywne}} \cup \underbrace{[I \setminus I^*]}_{\text{nieaktywne}}}^{\text{ograniczenia}}$$

Uwaga 2.3.55 To czy dane ograniczenie jest mocno bądź słabo aktywne zależy nie tylko od rozwiązania lokalnego x^* problemu 2.7, ale również od wektora mnożników Lagrange'a y^* odpowiadającego punktowi x^*. Przypominamy, że na mocy twierdzenie Kuhna–Tuckera mamy zagwarantowane istnienie przynajmniej jednego takiego wektora, o ile spełniony jest podstawowy warunek regularności. Może się jednak zdarzyć, że dla danemu rozwiązaniu lokalnemu odpowiada wiele takich wektorów. Okazuje się jednak, że w przypadku, gdy spełniony jest warunek regularności Fiacco–McCormicka (LICQ) dla danego rozwiązania lokalnego x^* problemu 2.7 istnieje dokładnie jeden wektor mnożników Lagrange'a. Fakt ten udowodnimy w kolejnym ustępie (lemat 2.3.61).

Niech (x^*, y^*) będzie punktem KT zadania minimalizacji z ograniczeniami (2.7). Rozważmy pomocnicze zadanie

$$\begin{array}{rll} \text{minimalizować} & f(x) & \\ \text{względem} & x \in \mathbb{R}^n & \\ \text{przy ograniczeniach} & c_i(x) = 0, & i \in A_+^* \\ & c_i(x) \leq 0, & i \in A^* \setminus A_+^* \end{array} \tag{2.53}$$

Powstało ono przez modyfikację zadania (2.7) w ten sposób, że dla punktu KT (x^*, y^*) usunięto ograniczenia nieaktywne w punkcie x^*, zaś ograniczenia nierównościowe mocno aktywne zastąpiono ograniczeniami równościowymi. Zbiór rozwiązań dopuszczalnych dla tego zadania oznaczać będziemy symbolem X_+^*, zaś zbiór kierunków dopuszczalnych dla tego zadania – symbolem $T_+(x^*)$ lub w skrócie T_+^* oraz zbiór kierunków dopuszczalnych dla ograniczeń zlinearyzowanych tego zadania – symbolem $T_{+lin}(x^*)$ lub w skrócie T_{+lin}^*. Mamy więc

$$T_{+lin}^* = \{s : s^T \nabla c_i(x^*) = 0 \text{ dla } i \in A_+^*,\ s^T \nabla c_i(x^*) \leq 0 \text{ dla } i \in A^* \setminus A_+^*\}$$

Podobnie jak w lemacie 2.3.12 mamy $T_+^* \subseteq T_{+lin}^*$. Aby sformułować warunki konieczne rzędu drugiego będziemy potrzebować warunku regularności ograniczeń postaci

$$T_+^* = T_{+lin}^*.$$

Dla zadania (2.53) jest to oczywiście warunek regularności ograniczeń Kuhna –Tuckera. Zauważmy, że $T_+^* \subseteq T^*$, $T_{+lin}^* \subseteq T_{lin}^*$ oraz że w przypadku braku nierównościowych ograniczeń mocno aktywnych (np. dla zadania wyłącznie z ograniczeniami równościowymi) zachodzą równości w ostatnich dwóch inkluzjach.

Twierdzenie 2.3.56 (warunki konieczne rzędu drugiego) *Niech x^* będzie punktem dopuszczalnym zadania (2.7) i niech w punkcie tym spełniony będzie podstawowy warunek regularności $T(x^*) \cap D(x^*) = T_{lin}(x^*) \cap D(x^*)$. Jeśli x^* jest lokalnym rozwiązaniem zadania (2.7) i y^* odpowiadającym mu wektorem mnożników Lagrange'a i jeśli zachodzi warunek regularności ograniczeń $T_+^* = T_{+lin}^*$, to*

$$\forall_{s \in T_{+lin}^*} \quad s^T W^* s \geq 0. \tag{2.54}$$

Dowód. Niech $s \in T_{+lin}^*$. Wówczas na mocy założeń twierdzenia $s \in T_+^*$. Istnieją więc ciągi $t_k \downarrow 0$ i $x_k \in X_+^*$, $x_k \to x^*$, takie, że $s_k = \frac{x_k - x^*}{t_k} \to s$. Mamy więc $c_i(x_k) = 0$ dla $i \in A_+^*$ oraz $\lambda_i^* = 0$ dla $i \notin A_+^*$. Wobec tego $f(x_k) = L(x_k, y^*)$. Oznaczmy $d_k = x_k - x^* = t_k s_k$. Rozwijając teraz funkcję Lagrange'a we wzór Taylora w otoczeniu punktu (x^*, y^*) otrzymamy

$$f(x^*) \leq f(x_k) = L(x_k, y^*) = L(x^* + d_k, y^*) =$$

$$\underbrace{L(x^*, y^*)}_{=f(x^*)} + d^T \underbrace{\nabla_x L(x^*, y^*)}_{=0} + \frac{1}{2} d_k^T W(x^*, y^*) d_k + o(\|d_k\|^2) =$$

$$f(x^*) + \frac{1}{2}t_k^2 s_k^T W(x^*, y^*) s_k + o(\|d_k\|^2)$$

Dalej postępujemy podobnie jak w dowodzie twierdzenia 2.3.41. ■

Twierdzenie 2.3.57 (warunki wystarczające rzędu drugiego) *Jeśli* (x^*, y^*) *jest punktem Kuhna–Tuckera zadania* (2.7) *i jeśli*

$$\forall_{0 \neq s \in T^*_{+lin}} \quad s^T W^* s > 0, \tag{2.55}$$

to x^* *jest izolowanym rozwiązaniem lokalnym tego zadania.*

Dowód. jest podobny do dowodu twierdzenia 2.3.42 z wykorzystaniem pewnych własności użytych również w dowodzie twierdzenia 2.3.56. ■

Uwaga 2.3.58 W przypadku, gdy dla punktu KT (x^*, y^*) brak jest ograniczeń słabo aktywnych, warunki wystarczające rzędu drugiego dla zadania z ograniczeniami równościowymi (2.39) i dla zadania z dowolnymi ograniczeniami (2.7) są sobie równoważne. Podobna uwaga dotyczy warunków koniecznych rzędu drugiego.

Uwaga 2.3.59 W przypadku, gdy zbiór ograniczeń aktywnych $A(x^*)$ jest pusty (wówczas oczywiście nie mogą występować ograniczenia równościowe), to wszystkie mnożniki Lagrange'a są równe zeru i $T(x^*) = \mathbb{R}^n$. W tej sytuacji założenia powyższego twierdzenia sprowadzają się do dodatniej określoności hesjanu funkcji celu, czyli do warunków wystarczających dla zadania minimalizacji bez ograniczeń.

Przykład 2.3.60 Rozważmy zadanie

$$\begin{array}{ll} \text{minimalizować} & f(x) = x_1^2 + x_2^2, \\ \text{względem} & x = (x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2, \\ \text{przy ograniczeniach} & 4x_1 + 3x_2 \geq 25, \\ & x_1 \leq 4. \end{array}$$

Funkcja Lagrange'a $L : \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^2$ ma postać

$$L(x, y) = x_1^2 + x_2^2 + \lambda_1(-4x_1 - 3x_2 + 25) + \lambda_2(x_1 - 4).$$

Warunki KKT mają postać

$$\begin{aligned} \frac{\partial L}{\partial x_1} &= 2x - 4\lambda_1 + \lambda_2 = 0 \\ \frac{\partial L}{\partial x_2} &= 2y - 3\lambda_1 = 0 \\ 4x_1 + 3x_2 &\geq 25 \\ x_1 &\leq 4 \\ \lambda_1, \lambda_2 &\geq 0 \\ \lambda_1(-4x_1 - 3x_2 + 25) &= 0 \\ \lambda_2(x_1 - 4) &= 0 \end{aligned}$$

Punkt $(x^*, y^*) = (4, 3, 2, 0)$ jest punktem KKT i w punkcie tym spełniony jest warunek regularności Fiacco–McCormicka (LICQ) – gradienty ograniczeń aktywnych są liniowo niezależne. Pierwsze ograniczenie jest mocno aktywne ($\lambda_1^* \neq 0$), drugie zaś słabo aktywne ($\lambda_2^* = 0$). Zatem

$$T^*_{+lin} = \{s \in \mathbb{R}^2 : 4s_1 + 3s_2 = 0, s_1 \leq 0\}.$$

Zatem dowolny element zbioru T^*_{+lin} jest postaci $(s_1, -\frac{4}{3}s_1)$, gdzie $s_1 \leq 0$. Hesjan funkcji Lagrange'a ma postać

$$W^* = \nabla^2_{xx} L(x^*, y^*) = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}.$$

czyli dla $s \in T^*_{+lin}$, $s \neq 0$, mamy

$$s^T W^* s = \begin{bmatrix} s_1 & -\frac{4}{3}s_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} s_1 \\ -\frac{4}{3}s_1 \end{bmatrix} = 2s_1^2 + \frac{16}{9}s_1^2 > 0.$$

Widzimy więc, że warunek (2.55) jest spełniony, a więc $x^* = (4, 3)$ jest rozwiązaniem zadania.

2.3.4 Rola mnożników Lagrange'a

Mnożniki Lagrange'a dostarczają ważnych informacji, z których korzysta się w różnych metodach minimalizacji. Najpierw podamy warunki wystarczające na to, aby wektor mnożników Lagrange'a był określony jednoznacznie.

Lemat 2.3.61 *Niech zadanie minimalizacji* (2.7) *posiada rozwiązanie optymalne x^* i niech w punkcie tym spełniony będzie warunek regularności Fiacco–McCormicka (LICQ). Wówczas istnieje dokładnie jeden wektor mnożników Lagrange'a y^* odpowiadający punktowi x^*.*

Dowód. Istnienie wektora mnożników Lagrange'a wynika z twierdzenia Kuhna–Tuckera i z twierdzenia 2.3.32. Pokażemy jego jednoznaczność. Niech y^* będzie wektorem mnożników Lagrange'a odpowiadającym punktowi x^*. Oznaczmy

$$J = \nabla c(x^*) = (\nabla c_1(x^*), ..., \nabla c_p(x^*)),$$

Niech J' będzie podmacierzą macierzy J powstałą przez usunięcie w niej kolumn odpowiadających ograniczeniom nieaktywnym w punkcie x^*, czyli $J' = J_{A(x^*)}$. Podobnie, niech y' będzie wektorem powstałym z wektora y^* przez usunięcie współrzędnych odpowiadających ograniczeniom nieaktywnym w punkcie x^*. Zgodnie z założeniem, macierz J' ma pełny rząd kolumnowy. Ponieważ (x^*, y^*) jest punktem KT, więc $g^* + Jy^* = 0$. Zauważmy, że $Jy^* = J'y'$. Wobec tego $g^* + J'y' = 0$. Mnożąc ostatnią równość z lewej strony przez J'^T i po skorzystaniu z faktu, że macierz $J'^T J'$ jest nieosobliwa otrzymamy

$$y' = -(J'^T J')^{-1} J'^T g^*.$$

Z warunków komplementarności (2.17e) wynika, że pozostałe współrzędne wektora y^* są równe zeru. Zatem wektor mnożników Lagrange'a jest określony jednoznacznie. ■

W dalszej części tego ustępu rozważać będziemy zadanie minimalizacji z ograniczeniami równościowymi

$$\begin{array}{rl} \text{minimalizować} & f(x) \\ \text{względem} & x \in \mathbb{R}^n \\ \text{przy ograniczeniach} & c_i(x) = 0, \quad i \in E, \end{array} \tag{2.56}$$

gdzie funkcje f i $c_i, i \in E$ są różniczkowalne.

Podamy teraz interpretację mnożników Lagrange'a dla tego zadania.

Lemat 2.3.62 *Niech zadanie minimalizacji z ograniczeniami równościowymi* (2.56) *posiada rozwiązanie optymalne x^* i w punkcie tym spełniony będzie warunek regularności Fiacco–McCormicka (LICQ). Niech (x^*, y^*) będzie odpowiadającym mu punktem KT. Jeśli $\lambda_j^* < 0$, to dla zadania*

$$\begin{array}{rl} \textit{minimalizować} & f(x) \\ \textit{względem} & x \in \mathbb{R}^n \\ \textit{przy ograniczeniach} & c_i(x) = 0, \quad i \in E, i \neq j \\ & c_j(x) \leq 0. \end{array}$$

istnieje dopuszczalny kierunek spadkowy.

Dowód. Niech $d \in \mathbb{R}^n$ będzie rozwiązaniem układu równań

$$\begin{aligned} \nabla c_i(x^*)^T d &= 0, i \in E, i \neq j, \\ \nabla c_j(x^*)^T d &= -1. \end{aligned} \tag{2.57}$$

Takie rozwiązanie istnieje na mocy twierdzenia Kroneckera–Capellego bo wektory $\nabla c_i(x^*), i \in E$ są na mocy założenia liniowo niezależne. Ponieważ punkt (x^*, y^*) jest punktem KT, więc

$$\nabla f(x^*) + \sum_{i \in E} \lambda_i^* \nabla c_i(x^*) = 0$$

i w konsekwencji

$$\nabla f(x^*)^T d = -\sum_{i \in E} \lambda_i^* \nabla c_i(x^*)^T d = \lambda_j^* < 0. \tag{2.58}$$

Rozważmy teraz zadanie

$$\begin{array}{rll} \text{minimalizować} & f(x) & \\ \text{względem} & x \in \mathbb{R}^n & \\ \text{przy ograniczeniach} & c_i(x) = 0, & i \in E, i \neq j \\ & c_j(x) \leq 0. & \end{array}$$

Zauważmy, że dla tego zadania w punkcie x^* spełniony jest warunek regularności Kuhna–Tuckera $T_{lin}(x^*) = T(x^*)$, gdyż dla zadania (2.56) w punkcie x^* spełniony jest warunek regularności Fiacco–McCormicka. Ponieważ wektor d spełnia układ równań (2.57), więc

$$\begin{array}{rcl} d & \in & \{s : \nabla c_i(x^*)^T s = 0,\ i \in E,\ i \neq j,\ \nabla c_j(x^*)^T s \leq 0\} \\ & = & T_{lin}(x^*) = T(x^*). \end{array}$$

Z nierówności (2.58) wynika, że $d \in D(x^*)$, a więc $d \in T(x^*) \cap D(x^*)$, czyli w punkcie x^* istnieje dopuszczalny kierunek spadku funkcji f. ■

Zaburzmy jedno z ograniczeń w zadaniu (2.56), czyli rozważmy zadanie

$$\begin{array}{rll} \text{minimalizować} & f(x) & \\ \text{względem} & x \in \mathbb{R}^n & \\ \text{przy ograniczeniach} & c_i(x) = 0 & i \in E, i \neq j \\ & c_j(x) = t, & \end{array}$$

gdzie $j \in E$, zakładając – podobnie jak w lemacie 2.3.62 – spełnienie LICQ. Zobaczymy teraz, jak zaburzenie to wpływa na zmianę optymalnej wartości funkcji celu. Przypuśćmy, że rozwiązanie optymalne $x(t)$ zaburzonego zadania zmienia się w sposób ciągły w zależności od zaburzenia t. Niech $L(x, y, t)$ będzie funkcją Lagrange'a tego zadania, czyli

$$L(x, y, t) = f(x) + \sum_{i \neq j} \lambda_i c_i(x) + \lambda_j (c_j(x) - t).$$

Dla dostatecznie małego t, dla zaburzonego zadania spełniony jest warunek regularności Fiacco–McCormicka w punkcie $x(t)$, gdyż gradienty ograniczeń są ciągłe oraz warunek ten spełniony jest w punkcie x^*. Wobec tego istnieje punkt KT $(x(t), y(t))$ dla $t \in [0, \varepsilon)$ dla pewnego $\varepsilon > 0$. W szczególności $(x(0), y(0)) = (x^*, y^*)$. Optymalna wartość funkcji celu dla zaburzonego zadania wynosi $f(x(t))$. W szczególności $f(x(0)) = f^*$. Ponieważ $f(x(t)) = L(x(t), y(t), t)$ (patrz uwaga 2.3.23), więc korzystając ze wzorów na pochodne cząstkowe funkcji złożonej i z warunków KT otrzymamy

$$\begin{aligned}\frac{df(x(t))}{dt} &= \frac{dL(x(t),y(t),t)}{dt}\\ &= \frac{dx(t)}{dt}\underbrace{\nabla_x L(x(t),y(t),t)}_{=0}\\ &\quad+\frac{dy(t)}{dt}\underbrace{\nabla_y L(x(t),y(t),t)}_{=0}+1\cdot\frac{\partial L(x(t),y(t),t)}{\partial t}\\ &= -\lambda_j(t)\end{aligned}$$

W szczególności $\frac{df(x(0))}{dt} = -\lambda_j^*$. Widzimy więc, że mnożnik Lagrange'a λ_j^* jest równy szybkości spadku optymalnej wartości funkcji celu względem zmiany prawej strony j-tego ograniczenia. Własność ta będzie wykorzystana w niektórych metodach minimalizacji. Własność o podobnym charakterze zachodzi dla zadania programowania liniowego (porównaj skrypt *Programowanie liniowe* [Ceg02, Uwaga 4.2.10 h)]).

2.4 Elementy teorii dualności

Chodzi mi o to, aby język giętki powiedział wszystko, co pomyśli głowa.

J. Słowacki

2.4.1 Zadanie pierwotne i dualne

Rozważmy zadanie minimalizacji z ograniczeniami w postaci

$$\begin{array}{rl} \text{minimalizować} & f(x) \\ \text{względem} & x \in \mathbb{X}, \\ \text{przy ograniczeniach} & c_i(x) \leq 0, \quad i \in I = \{1, ..., m\} \end{array} \tag{2.59}$$

gdzie $\mathbb{X}$ jest pewnym podzbiorem $\mathbb{R}^n$. Zbiór $\mathbb{X}$ może przyjmować różne postaci, np. $\mathbb{X} = \mathbb{R}^n$, $\mathbb{X} = \mathbb{R}^n_+$, $\mathbb{X} = \mathbb{Z}^n$. Czasami niektóre z ograniczeń nierównościowych włącza się do zbioru $\mathbb{X}$. Zbiór rozwiązań dopuszczalnych dla zadania (2.59) ma postać

$$X = \{x \in \mathbb{R}^n : x \in \mathbb{X}, c_i(x) \leq 0, i \in I\},$$

zaś funkcja Lagrange'a $L : \mathbb{X} \times \mathbb{Y} \longrightarrow \mathbb{R}$ – postać

$$L(x, y) = f(x) + y^T c(x),$$

gdzie $\mathbb{Y} = \mathbb{R}^m_+$ i $c(x) = (c_1(x), .., c_m(x))$. Zdefiniujmy funkcję $L_P : \mathbb{X} \longrightarrow \overline{\mathbb{R}}$

$$L_P(x) = \sup_{y \in \mathbb{Y}} L(x, y),$$

gdzie $\overline{\mathbb{R}} = [-\infty, +\infty]$. Zauważmy, że

$$L_P(x) = \begin{cases} f(x) & c(x) \leq 0, \\ +\infty & \text{poza tym.} \end{cases}$$

Wobec tego zadanie (2.59) można zapisać w postaci

$$\begin{array}{rl} \text{minimalizować} & L_P(x) \\ \text{względem} & x \in \mathbb{X}. \end{array}$$

Zdefiniujmy funkcję $L_D : \mathbb{Y} \longrightarrow \overline{\mathbb{R}}$

$$L_D(y) = \inf_{x \in \mathbb{X}} L(x, y)$$

i rozpatrzymy zadanie

$$\begin{array}{rl} \text{maksymalizować} & L_D(y) \\ \text{względem} & y \in \mathbb{Y}. \end{array} \tag{2.60}$$

Definicja 2.4.1 Zadanie (2.60) nazywa się *zadaniem dualnym* do zadania (2.59). Zadanie (2.59) nazywa się wówczas *zadaniem pierwotnym.*

Uwaga 2.4.2 Zadanie (2.60) można zapisać w postaci

$$\begin{array}{ll} \text{maksymalizować} & L(u, y) \\ \text{względem} & (u, y) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \\ \text{przy ograniczeniach} & u \in \mathbb{X}, y \in \mathbb{Y}, L(u, y) = \inf_{x \in \mathbb{X}} L(x, y). \end{array}$$

Wówczas zbiór

$$X_D = \{(u, y) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m : u \in \mathbb{X}, y \in \mathbb{Y}, L(u, y) = \inf_{x \in \mathbb{X}} L(x, y)\}$$

nazywamy *zbiorem rozwiązań dopuszczalnych zadania dualnego*, a parę $(u, y) \in X_D$ – parą *dualnie dopuszczalną.*

2.4.2 Twierdzenia o dualności

Twierdzenie 2.4.3 (słabe twierdzenie o dualności) *Niech $x \in X$ i niech $(u, y) \in X_D$. Wówczas*

$$f(x) \geq L(u, y).$$

Dowód. Dla $x \in X$ i dla $(u, y) \in X_D$ mamy

$$f(x) \underset{\text{bo } x \in X, y \in \mathbb{Y}}{\geq} L(x, y) \underset{\text{bo } (u,y) \in X_D}{\geq} L(u, y)$$

■

Uwaga 2.4.4 Zgodnie z przyjętymi oznaczeniami nierówność w twierdzeniu możemy dla $x \in X$ i dla $(u, y) \in X_D$ zapisać w postaci

$$L_P(x) \geq L_D(y),$$

zaś całe twierdzenie – w postaci

$$\inf_{x \in \mathbb{X}} \sup_{y \in \mathbb{Y}} L(x, y) \geq \sup_{y \in \mathbb{Y}} \inf_{x \in \mathbb{X}} L(x, y). \tag{2.61}$$

Różnicę między lewą a prawą stroną powyższej nierówności nazywamy *luką dualności* (ang. *duality gap*).

Załóżmy teraz, że rozpatrywane przez nas zadanie minimalizacji (2.59) jest wypukłe i różniczkowalne, czyli $f, c_i, i \in I$, są wypukłe, różniczkowalne i, że $\mathbb{X} = \mathbb{R}^n$. Mamy wówczas

$$X_D = \{(x, y) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m : \nabla_x L(x, y) = 0, y \geq 0\},$$

gdyż funkcja wypukła określona na $\mathbb{R}^n$ osiąga minimum wtedy i tylko wtedy gdy jej gradient się zeruje. Zatem zadanie dualne do zadania minimalizacji wypukłej różniczkowalnej ma postać

$$\begin{array}{ll} \text{maksymalizować} & L(x, y) \\ \text{względem} & (x, y) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \\ \text{przy ograniczeniach} & \nabla_x L(x, y) = 0, y \geq 0. \end{array} \tag{2.62}$$

Zadanie to nazywa się w ogólnym przypadku (nawet bez zakładania wypukłości) *zadaniem dualnym w sensie Wolfe'a.*

Twierdzenie 2.4.5 (mocne twierdzenie o dualności) *Jeśli x^* jest rozwiązaniem zadania minimalizacji wypukłej różniczkowalnej*

$$\begin{array}{rl} \textit{minimalizować} & f(x) \\ \textit{względem} & x \in \mathbb{R}^n \\ \textit{przy ograniczeniach} & c_i(x) \leq 0, \quad i \in I \end{array}$$

i jeśli w punkcie tym spełniony jest podstawowy warunek regularności

$$T(x^*) \cap D(x^*) = T_{lin}(x^*) \cap D(x^*)$$

(np. spełniony jest warunek Slatera), to punkt KT (x^*, y^*) dla tego zadania jest rozwiązaniem zadania dualnego (2.62)*. Ponadto minimalna wartość funkcji celu zadania pierwotnego i maksymalna wartość funkcji celu zadania dualnego są sobie równe, tzn. $f(x^*) = L(x^*, y^*)$.*

Dowód. Przy spełnieniu założeń twierdzenia istnieje punkt KT (x^*, y^*) na mocy twierdzenia Kuhna–Tuckera. Punkt ten jest oczywiście dualnie dopuszczalny. Ze słabego twierdzenia o dualności mamy $f(x^*) \geq L(x, y)$ dla $(x, y) \in X_D$. Z warunków Kuhna–Tuckera otrzymujemy $L(x^*, y^*) = f(x^*)$. Zatem L osiąga maksimum na X_D w punkcie (x^*, y^*). ■

Uwaga 2.4.6 Mocne twierdzenie o dualności podaje warunki wystarczające na to, aby luka dualności była równa zeru.

Przykład 2.4.7 Rozważmy zadanie programowania liniowego w postaci

$$\begin{array}{ll} \text{minimalizować} & c^T x \\ \text{względem} & x \in \mathbb{R}^n \\ \text{przy ograniczeniach} & A^T x \geq b \end{array}$$

Zadanie dualne w sensie Wolfe'a ma postać

$$\begin{array}{ll} \text{maksymalizować} & c^T x + y^T(b - A^T x) \\ \text{względem} & (x, y) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \\ \text{przy ograniczeniach} & c - Ay = 0, \\ & y \geq 0. \end{array}$$

Eliminując x z funkcji celu (korzystając z równości $c - Ay = 0$) otrzymamy zadanie

$$\begin{array}{ll} \text{maksymalizować} & b^T y \\ \text{względem} & y \in \mathbb{R}^m \\ \text{przy ograniczeniach} & Ay = c, \\ & y \geq 0, \end{array}$$

które jest zadaniem programowania liniowego w postaci standardowej. Zgodnie z mocnym twierdzeniem o dualności, jeśli zadanie pierwotne posiada rozwiązanie optymalne, to zadanie dualne również je posiada i wartości optymalne obu zadań są sobie równe.

Ćwiczenie 2.4.8 Podać postać zadania dualnego w sensie Wolfe'a do zadania programowania liniowego w postaci

$$\begin{array}{ll} \text{minimalizować} & c^T x \\ \text{względem} & x \in \mathbb{R}^n \\ \text{przy ograniczeniach} & A^T x \geq b, \\ & x \geq 0. \end{array}$$

Przykład 2.4.9 Rozważmy *zadanie programowania kwadratowego* w postaci

$$\begin{array}{ll} \text{minimalizować} & \frac{1}{2} x^T G x + g^T x \\ \text{względem} & x \in \mathbb{R}^n \\ \text{przy ograniczeniach} & A^T x \geq b, \end{array}$$

gdzie G jest macierzą dodatnie określoną. Ponieważ funkcja celu jest mocno wypukła, więc zadanie to posiada rozwiązanie optymalne, o ile tylko ograniczenia są niesprzeczne. Zadanie doń dualne w sensie Wolfe'a ma postać

$$\begin{array}{ll} \text{maksymalizować} & \frac{1}{2} x^T G x + g^T x + y^T(b - A^T x) \\ \text{względem} & (x, y) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \\ \text{przy ograniczeniach} & Gx + g - Ay = 0, y \geq 0, \end{array}$$

Z ograniczenia równościowego możemy wyznaczyć x. Otrzymamy

$$x = G^{-1}Ay - G^{-1}g.$$

Wstawiając je do funkcji celu otrzymamy zadanie

$$\begin{array}{ll} \text{maksymalizować} & -\frac{1}{2}y^T A^T G^{-1} Ay + y^T(b + A^T G^{-1} g) - \frac{1}{2} g^T G^{-1} g \\ \text{względem} & y \in \mathbb{R}^m, \\ \text{przy ograniczeniach} & y \geq 0 \end{array}$$

równoważne zadaniu

$$\begin{array}{ll} \text{minimalizować} & \frac{1}{2}y^T A^T G^{-1} Ay - y^T(b + A^T G^{-1} g) \\ \text{względem} & y \in \mathbb{R}^m, \\ \text{przy ograniczeniach} & y \geq 0 \end{array}$$

Zadanie dualne do zadania programowania kwadratowego jest więc znowu zadaniem programowania kwadratowego. Zgodnie z mocnym twierdzeniem o dualności, zadanie dualne posiada rozwiązanie optymalne i wartości optymalne obu zadań są sobie równe.

2.4.3 Zastosowanie: relaksacja Lagrange'a

Opiszemy teraz pewną metodę, tzw. metodę *relaksacji Lagrange'a*, stosowaną między innymi w zadaniach programowania liniowego całkowitoliczbowego. W zadaniach tych często występują ograniczenia, które są niewygodne przy bezpośrednim rozwiązaniu zadania. Przykładem tego może być zagadnienie komiwojażera, dla którego takim niewygodnym ograniczeniem jest ograniczenie wyrażone słownie "krótkie cykle są zabronione", a które można przedstawić również w postaci odpowiednich nierówności. Ze względu na zastosowania przedstawimy więc relaksację Lagrange'a dla zadania programowania liniowego całkowitoliczbowego postaci

$$\begin{array}{ll} \text{minimalizować} & c^T x \\ \text{względem} & x \in \mathbb{Z}^n \\ \text{przy ograniczeniach} & A^T x \geq b, \end{array} \tag{2.63}$$

dla którego ograniczenia nierównościowe rozbito na dwie części: $A_1^T x \geq b_1$ i $A_2^T x \geq b_2$, gdzie $A = [A_1, A_2]$ i $b = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix}$. Zdefiniujmy zbiór $\mathbb{X}$ w postaci $\mathbb{X} = \{x \in \mathbb{Z}^n : A_2^T x \geq b_2\}$. Możemy więc powiedzieć, że pewne (niewygodne) ograniczenia zostały włączone do zbioru $\mathbb{X}$. Rozważane zadanie przyjmuje zatem postać

$$\begin{array}{ll} \text{minimalizować} & c^T x \\ \text{względem} & x \in \mathbb{X} \\ \text{przy ograniczeniach} & A_1^T x \geq b_1. \end{array} \tag{2.64}$$

Funkcja Lagrange'a tego zadania ma postać

$$L(x, y) = c^T x + y^T(b_1 - A_1^T x)$$

Mamy wobec tego

$$\begin{aligned} L_D(y) &= \inf_{x \in \mathbb{X}} \{c^T x + y^T(b_1 - A_1^T x)\} \\ &= b_1^T y + \inf_{x \in \mathbb{X}} \{(c - A_1 y)^T x\} \\ &= -(-b_1^T y + \sup_{x \in \mathbb{X}} \{(A_1 y - c)^T x\}). \end{aligned}$$

Zadaniem dualnym do zadania (2.64) jest zadanie

$$\begin{array}{ll} \text{minimalizować} & h(y) = -b_1^T y + \sup_{x\in\mathbb{X}}\{(A_1 y - c)^T x\} \\ \text{względem} & \hfill y \geq 0. \end{array}$$

Zadanie to jest zadaniem minimalizacji wypukłej, ale najczęściej nieróżniczkowalnej. Istnieją jednak efektywne metody rozwiązania takiego zadania. Jest to o tyle ważne, że mając takie rozwiązanie y^* (nawet przybliżone), możemy zgodnie ze słabym twierdzeniem o dualności traktować $L_D(y^*) = -h(y^*)$ jako (w pewnym sensie najlepsze) ograniczenie dolne optymalnej wartości funkcji celu zadania (2.63). Niestety, w ogólnym przypadku luka dualności jest najczęściej większa od zera.

2.4.4 Punkty siodłowe funkcji Lagrange'a

Podamy teraz pewne związki pomiędzy rozwiązaniem zadania minimalizacji z ograniczeniami nierównościowymi (2.59) a punktem siodłowym funkcji Lagrange'a.

Definicja 2.4.10 Mówimy, że para $(\bar{x}, \bar{y}) \in \mathbb{X}\times\mathbb{Y}$ jest *punktem siodłowym* funkcji $K : \mathbb{X}\times\mathbb{Y} \longrightarrow \mathbb{R}$ jeśli

$$\forall_{x\in\mathbb{X}}\forall_{y\in\mathbb{Y}} \quad K(\bar{x}, y) \leq K(\bar{x}, \bar{y}) \leq K(x, \bar{y}).$$

Twierdzenie 2.4.11 *Para* $(\bar{x}, \bar{y}) \in \mathbb{X} \times \mathbb{R}^m_+$ *jest punktem siodłowym funkcji Lagrange'a dla zadania* (2.59) *wtedy i tylko wtedy gdy*

(i) $\bar{x}$ *minimalizuje* $L(\cdot, \bar{y})$ *na* $\mathbb{X}$,

(ii) $c_i(\bar{x}) \leq 0, i \in I$,

(iii) $\bar{\lambda}_i c_i(\bar{x}) = 0, i \in I$.

Dowód.

($\Rightarrow$) Niech $(\bar{x}, \bar{y})$ będzie punktem siodłowym funkcji Lagrange'a. Warunek (i) wynika bezpośrednio z drugiej nierówności w definicji punktu siodłowego. Natomiast z pierwszej z tych nierówności mamy dla dowolnego $y \in \mathbb{R}^n_+$

$$f(\bar{x}) + y^T c(\bar{x}) \leq f(\bar{x}) + \bar{y}^T c(\bar{x}).$$

Stąd

$$(y - \bar{y})^T c(\bar{x}) \leq 0$$

dla dowolnego $y \in \mathbb{R}^n_+$. Biorąc w ostatniej nierówności

$$y = (\bar{\lambda}_1, ..., \bar{\lambda}_{i-1}, \bar{\lambda}_i + 1, \bar{\lambda}_{i+1}, ..., \bar{\lambda}_m)$$

dla $i \in I$ otrzymamy warunek (ii). Natomiast biorąc w niej $y = 0$ otrzymamy $\bar{y}^T c(\bar{x}) \geq 0$. Ponieważ $\bar{y} \geq 0$ i (na mocy udowodnionego już warunku (ii)) $c(\bar{x}) \leq 0$, więc stąd otrzymujemy prosto warunek (iii).

($\Leftarrow$) Przypuśćmy teraz, że spełnione są warunki (i)-(iii). Pierwszy z nich oznacza, że

$$L(\bar{x}, \bar{y}) \leq L(x, \bar{y}).$$

Dalej mamy dla dowolnego $y \geq 0$

$$L(\bar{x}, y) = f(\bar{x}) + y^T c(\bar{x}) \underset{\text{(ii)}}{\leq} f(\bar{x}) \underset{\text{(iii)}}{=} f(\bar{x}) + \bar{y}^T c(\bar{x}) = L(\bar{x}, \bar{y})$$

■

Uwaga 2.4.12 W dowodzie twierdzenia nie korzystaliśmy z różniczkowalności a nawet z ciągłości funkcji $f, c_i, i \in I$, więc jest ono prawdziwe nawet bez tych założeń.

Wniosek 2.4.13 *Jeśli para $(\bar{x}, \bar{y}) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m_+$ jest punktem siodłowym funkcji Lagrange'a zadania minimalizacji różniczkowalnej (2.59), gdzie $\mathbb{X} = \mathbb{R}^n$, to jest ona punktem Kuhna–Tuckera.*

Twierdzenie 2.4.14 *Jeśli dla zadania minimalizacji wypukłej para $(\bar{x}, \bar{y}) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m_+$ jest punktem Kuhna–Tuckera, to jest ona punktem siodłowym funkcji Lagrange'a.*

Dowód. Dla zadania minimalizacji wypukłej funkcja Lagrange'a $L : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m_+ \longrightarrow \mathbb{R}$ jest funkcją wypukłą pierwszej zmiennej x dla dowolnej ustalonej drugiej zmiennej $y \geq 0$. Wówczas warunek

(i) $\bar{x}$ minimalizuje $L(\cdot, \bar{y})$ na $\mathbb{R}^n$

jest oczywiście równoważny warunkowi

(i') $\nabla f(\bar{x}) + \sum_{i=1}^m \bar{\lambda}_i^T \nabla c_i(\bar{x}) = 0$

Zatem twierdzenie jest konsekwencją twierdzenia 2.4.11 i postaci warunków Kuhna–Tuckera dla zadania minimalizacji wypukłej. ■

Wniosek 2.4.15 *Dla zadania minimalizacji wypukłej różniczkowalnej para $(\bar{x}, \bar{y}) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m_+$ jest punktem Kuhna–Tuckera wtedy i tylko wtedy, gdy jest ona punktem siodłowym funkcji Lagrange'a.*

Twierdzenie 2.4.16 *Jeśli para $(\bar{x}, \bar{y}) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m_+$ jest punktem siodłowym funkcji Lagrange'a zadania (2.59), to $\bar{x}$ jest rozwiązaniem tego zadania.*

Dowód. Niech para $(\bar{x}, \bar{y}) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m_+$ będzie punktem siodłowym funkcji Lagrange'a zadania (2.59), czyli

$$f(\bar{x}) + y^T c(\bar{x}) \leq f(\bar{x}) + \bar{y}^T c(\bar{x}) \leq f(x) + \bar{y}^T c(x) \tag{2.65}$$

dla dowolnego $x \in \mathbb{R}^n$ i dowolnego $y \in \mathbb{R}^m_+$. Na mocy twierdzenia 2.4.11 mamy $c_i(\bar{x}) \leq 0, i \in I$, czyli $\bar{x}$ jest rozwiązaniem dopuszczalnym zadania (2.59). Niech x będzie dowolnym rozwiązaniem dopuszczalnym tego zadania, czyli $c_i(x) \leq 0, i \in I$. Z twierdzenia 2.4.11 i z drugiej nierówności (2.65) otrzymamy

$$f(\bar{x}) = f(\bar{x}) + \bar{y}^T c(\bar{x}) \leq f(x) + \bar{y}^T c(x) \leq f(x).$$

Oznacza to, że $\bar{x}$ jest rozwiązaniem zadania (2.59). ■

2.4.5 Interpretacja ekonomiczna dualności

Przypuśćmy, że na rynku działa producent wytwarzając pewne towary T_1,...,T_n, do produkcji których potrzebne są pewne surowce S_1,...,S_m. Z drugiej strony rynek ustala ceny tych surowców. Możemy więc rozważać dwuosobową grę o sumie zerowej (między producentem a rynkiem). Zadaniem producenta jest maksymalizacja swojego zysku, zaś zadaniem rynku jest minimalizacja zysku producenta (będącego jednocześnie stratą rynku). Wielkość produkcji określona jest przez wektor $x = (x_1, ..., x_n)$, gdzie x_j jest ilością jednostek wyprodukowanego towaru T_j, $j = 1, ..., n$. Z kolei wektor $y = (\lambda_1, ..., \lambda_m)$ określa ceny poszczególnych surowców. Niech $\mathbb{X} \subseteq \mathbb{R}^n$ będzie pewnym podzbiorem możliwych wektorów produkcji (np. $\mathbb{X} = \mathbb{R}^n_+$) i niech $\mathbb{Y} = \mathbb{R}^m_+$ będzie zbiorem możliwych wektorów cen. Przypuśćmy, że producent dysponuje zasobami surowcowymi $b = (\beta_1, ..., \beta_m)$. Niech $f(x)$ będzie zyskiem producenta odpowiadającym wektorowi produkcji

$x \in \mathbb{X}$ i niech $h_i(x)$ będzie odpowiadającą mu ilością i-tego zużytego surowca. Producent stara się więc wyznaczyć taki wektor produkcji $x \in \mathbb{X}$, który jest rozwiązaniem następującego zadania

$$\begin{array}{rl} \text{maksymalizować} & f(x) \\ \text{względem} & x \in \mathbb{X} \\ \text{przy ograniczeniach} & h_i(x) \le \beta_i \quad i = 1, ..., m. \end{array} \tag{2.66}$$

Zadanie to można zapisać w postaci (2.59). Funkcja Lagrange'a $L : \mathbb{X} \times \mathbb{Y} \to \mathbb{R}$ dla tego zadania ma więc postać

$$L(x, y) = -f(x) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i (h_i(x) - \beta_i).$$

Ponieważ $\beta_i - h_i(x)$ jest nadwyżką i-tego surowca odpowiadającym wektorowi produkcji x i producent może tę nadwyżkę sprzedać (lub kupić jeśli jest ona ujemna) po cenie jednostkowej λ_i, $i = 1, ..., m$, więc funkcję przeciwną do funkcji Lagrange'a

$$-L(x, y) = f(x) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i (\beta_i - h_i(x))$$

możemy interpretować jako całkowity zysk producenta powstały w wyniku produkcji towarów i sprzedaży (bądź zakupu) nadwyżki surowców. Przy określonym wektorze cen $y \in \mathbb{Y}$ dyktowanym przez rynek, wielkość

$$\begin{aligned} \sup_{x \in \mathbb{X}} [f(x) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i (\beta_i - h_i(x))] &= -\inf_{x \in \mathbb{X}} L(x, y) \\ &= -L_D(y) \end{aligned}$$

jest maksymalnym całkowitym zyskiem producenta. Z drugiej strony, dla określonego profilu produkcji $x \in \mathbb{X}$, wielkość

$$\begin{aligned} \inf_{y \in \mathbb{Y}} [f(x) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i (\beta_i - h_i(x))] &= -\sup_{y \in \mathbb{Y}} L(x, y) \\ &= -L_P(x) \end{aligned}$$

minimalną stratą rynku. Zauważmy, że para $(x^*, y^*) \in \mathbb{X} \times \mathbb{Y}$ jest punktem siodłowym funkcji Lagrange'a L wtedy i tylko wtedy gdy $L_P(x^*) = L_D(y^*)$. Równość ta oznacza, że maksymalny całkowity zysk producenta jest równy minimalnej całkowitej stracie rynku. Dla pary (x^*, y^*) zachodzi więc równowaga: producentowi nie opłaca się zmieniać profilu produkcji x^* i rynkowi nie opłaca się zmieniać wektora cen y^*.

Przypuśćmy teraz, że $\mathbb{X} = \mathbb{R}^n$ i niech $(x^*, y^*) \in \mathbb{X} \times \mathbb{Y}$ będzie punktem siodłowym funkcji Lagrange'a L. Zgodnie z wnioskiem 2.4.13 para (x^*, y^*) jest punktem Kuhna–Tuckera dla zadania (2.66). Z warunków komplementarności $\lambda_i^*(\beta_i - h_i(x^*)) = 0$, $i = 1, ..., m$, wynika, że jeśli nadwyżka i-tego surowca $\beta_i - h_i(x^*)$ jest dodatnia, to jego cena λ_i^* jest równa zeru, $i = 1, ..., m$. Fakt ten można również wywnioskować z przedstawionej interpretacji ekonomicznej. Przypuśćmy bowiem, że producent przy profilu produkcji x^* nie zużył całkowicie i-tego surowca, czyli $h_i(x^*) < \beta_i$. Gdyby cena λ_i^* tego surowca podyktowana przez rynek była dodatnia, to zwiększając ją i pozostawiając pozostałe ceny na dotychczasowym poziomie można by doprowadzić do zwiększenia zysku producenta. Byłoby to jednak sprzeczne z tym, że dla pary (x^*, y^*) zachodzi opisana wyżej równowaga. Pierwszy z warunków Kuhna–Tuckera $\nabla_x L(x^*, y^*) = 0$ ma również prostą interpretację ekonomiczną. Warunek ten oznacza bowiem, że $\nabla f(x^*) = \sum_{i=1}^{m} \lambda_i^* \nabla h_i(x^*)$. Zauważmy, że w sumie występującej po prawej stronie składniki odpowiadające dodatnim nadwyżkom surowców można pominąć. Wówczas bowiem odpowiadające im ceny surowców są równe zeru. Zatem ostatnia równość oznacza, że marginalny zysk ze sprzedaży towarów jest równy marginalnemu kosztowi zakupu surowców.