

Optimalizace

Lokální extrémý vázané rovnostmi

Tomáš Kroupa, Mirko Navara

8. 5. 2024

FEL ČVUT

Úloha s omezeními ve tvaru rovností

Hledáme extrémy funkce f **vázané rovnostmi**

$$g_i(x_1, \dots, x_n) = 0, \quad i = 1, \dots, m.$$

Úloha

$$\begin{array}{ll} \min & f(x_1, \dots, x_n) \\ \text{za podmíněk} & \mathbf{g(x) = 0} \end{array}$$

Předpokládáme f, \mathbf{g} **spojitě diferencovatelné**.

Speciální případy

- **afinní** kritérium, **afinní** omezení - není co řešit,
- **obecné** kritérium, **afinní** omezení - to bude rozcvička a inspirace,
- **afinní** kritérium, **obecné** omezení - ponecháme jako speciální případ následujícího:
- **obecné** kritérium, **obecné** omezení - to je cíl.

Speciální případ: **afinní** omezení

Úloha

$$\min f(x_1, \dots, x_n)$$

$$\text{za podmíněk } \mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{C}\mathbf{x} - \mathbf{d} = \mathbf{0},$$

kde $\mathbf{C} \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^m$.

$$\mathbf{g}'(\mathbf{x}) = \mathbf{C}, \text{ neboli } \nabla \mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{C}^T.$$

Tvrzení

Pro každý lokální extrém \mathbf{x} této úlohy existuje $\boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}^m$ tak, že

$$f'(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{C} = \mathbf{0}, \quad \text{tj.}$$

$$f'(\mathbf{x}) = -\boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{C} = -\boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{g}'(\mathbf{x}), \quad \text{neboli } \nabla f(\mathbf{x}) = -\mathbf{C}^T \boldsymbol{\lambda}.$$

Lagrangeovy multiplikátory

Vektor λ bude (i v obecnějším případě) vektor **Lagrangeových multiplikátorů**.

Na jejich znaménku nezáleží; můžeme si je vynásobit jakýmkoli nenulovým číslem (i každý jiným).

Mohli bychom je i vynásobit **regulární** maticí a použít $\mathbf{R}\lambda$ místo λ ; množina řešení takto upravených omezení se tím nezmění.

Jejich hodnoty poslouží jen během výpočtu, na jeho konci nás nezajímají.

Ještě speciálnější případ:

Úloha na nejmenší normu řešení nehomogenní soustavy

Hledáme řešení soustavy $\mathbf{C}\mathbf{x} = \mathbf{d}$ s nejmenší normou. Řešíme úlohu

$$\min \left\{ \frac{1}{2} \|\mathbf{x}\|^2 \mid \mathbf{C}\mathbf{x} = \mathbf{d} \right\}.$$

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \|\mathbf{x}\|^2 = \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{x}, \quad f'(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T.$$

Podmínky optimality (s využitím předchozího)

$$\mathbf{x} = f'(\mathbf{x})^T = -\mathbf{C}^T \boldsymbol{\lambda}, \quad \mathbf{C}\mathbf{x} = \mathbf{d}.$$

Má-li \mathbf{C} lineárně nezávislé řádky, pak optimálním řešením je

$$\mathbf{x} = \mathbf{C}^T (\mathbf{C}\mathbf{C}^T)^{-1} \mathbf{d}.$$

Méně speciální případ:

Úloha nejmenších čtverců s lineárními omezeními

Hledáme řešení úlohy nejmenších čtverců pro soustavu $\mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{b}$ s lineárními omezeními $\mathbf{C} \mathbf{x} = \mathbf{d}$. Tedy řešíme úlohu

$$\min \left\{ \frac{1}{2} \|\mathbf{A} \mathbf{x} - \mathbf{b}\|^2 \mid \mathbf{C} \mathbf{x} = \mathbf{d} \right\}.$$

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \|\mathbf{A} \mathbf{x} - \mathbf{b}\|^2 = \frac{1}{2} (\mathbf{A} \mathbf{x} - \mathbf{b})^T (\mathbf{A} \mathbf{x} - \mathbf{b}),$$
$$f'(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \mathbf{A}^T \mathbf{A} - \mathbf{b}^T \mathbf{A} = -\lambda^T \mathbf{C},$$

$$\mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{x} + \mathbf{C}^T \lambda = \mathbf{A}^T \mathbf{b}.$$

Podmínky optimality

$$\begin{bmatrix} \mathbf{A}^T \mathbf{A} & \mathbf{C}^T \\ \mathbf{C} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{x} \\ \lambda \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{A}^T \mathbf{b} \\ \mathbf{d} \end{bmatrix}.$$

Obecně: Metoda Lagrangeových multiplikátorů

Vyjdeme z lineární aproximace

$$\begin{aligned} \mathbf{g}(\mathbf{x}) &\approx \underbrace{\mathbf{g}(\mathbf{x}_0)}_0 + \mathbf{g}'(\mathbf{x}_0)(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) = \mathbf{g}'(\mathbf{x}_0)(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \\ &= \underbrace{\mathbf{g}'(\mathbf{x}_0)}_{\mathbf{C}} \mathbf{x} - \underbrace{\mathbf{g}'(\mathbf{x}_0) \mathbf{x}_0}_{\mathbf{d}} = \mathbf{C} \mathbf{x} - \mathbf{d}. \end{aligned}$$

Jako dříve, zavedeme **Lagrangeovy multiplikátory**

$\lambda := (\lambda_1, \dots, \lambda_m) \in \mathbb{R}^m$ a budeme řešit soustavu rovnic

$$f'(\mathbf{x}) + \lambda^T \mathbf{C} = \mathbf{0},$$

kde $\mathbf{C} := \mathbf{g}'(\mathbf{x})$ tedy

$$f'(\mathbf{x}) + \lambda^T \mathbf{g}'(\mathbf{x}) = \mathbf{0}.$$

To lze interpretovat také jako hledání stacionárních bodů

Lagrangeovy funkce $L: \mathbb{R}^{n+m} \rightarrow \mathbb{R}$

$$L(\mathbf{x}, \lambda) := f(\mathbf{x}) + \lambda^T \mathbf{g}(\mathbf{x}).$$

Tečné vektory

Množina všech přípustných řešení úlohy s omezeními ve tvaru rovností:

$$X := \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}\}.$$

Definice

Vektor $\mathbf{t} \in \mathbb{R}^n$ je **tečný k množině** X v bodě $\mathbf{x} \in X$, pokud je v \mathbf{x} tečným vektorem nějaké hladké křivky ležící v X .

Tečný prostor $T_{\mathbf{x}} :=$ je lineární prostor vektorů tečných k X v bodě \mathbf{x} .

Obvykle $\dim T_{\mathbf{x}} = n - m$.

$$\forall \mathbf{t} \in T_{\mathbf{x}} \forall i: \mathbf{t} \perp g'_i(\mathbf{x})^T,$$

jinak by \mathbf{t} nebyl tečný k vrstevnici funkce g_i . Stručněji

$$T_{\mathbf{x}} \subseteq \text{null } \mathbf{g}'(\mathbf{x}).$$

Prostor generovaný gradienty omezení

$$\begin{aligned} G_{\mathbf{x}} &:= \text{span}\{g'_1(\mathbf{x})^T, \dots, g'_m(\mathbf{x})^T\} = \text{span}\{\nabla g_1(\mathbf{x}), \dots, \nabla g_m(\mathbf{x})\} = \\ &= \text{rng } \mathbf{g}'(\mathbf{x})^T = \text{rng } \nabla \mathbf{g}(\mathbf{x}) = \\ &= \{\mathbf{g}'(\mathbf{x})^T \boldsymbol{\lambda} \mid \boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}^m\} \subseteq T_{\mathbf{x}}^{\perp}. \end{aligned}$$

$G_{\mathbf{x}}$ je lineární prostor parametrizovaný Lagrangeovými multiplikátory.

$$\forall \mathbf{v} \in G_{\mathbf{x}} \exists \boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}^m : \mathbf{v} = \mathbf{g}'(\mathbf{x})^T \boldsymbol{\lambda}.$$

$\dim G_{\mathbf{x}} \leq m$, $G_{\mathbf{x}} \perp T_{\mathbf{x}}$, může být $G_{\mathbf{x}} \subsetneq T_{\mathbf{x}}^{\perp}$ (a to bude problém).

Dvě interpretace Lagrangeových multiplikátorů

Lagrangeovy multiplikátory můžeme chápat jako

- argumenty Lagrangeovy funkce $L: \mathbb{R}^{n+m} \rightarrow \mathbb{R}$,
 $(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) \mapsto L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda})$,
- parametry funkce $\lambda L: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, $(\mathbf{x}) \mapsto \lambda L(\mathbf{x}) = L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda})$.

$$L'(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) = (f'(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{g}'(\mathbf{x}), \mathbf{g}(\mathbf{x})^T),$$

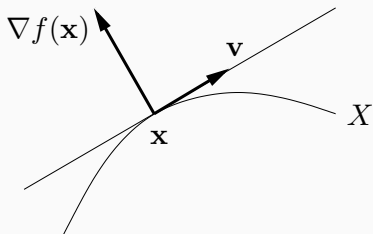
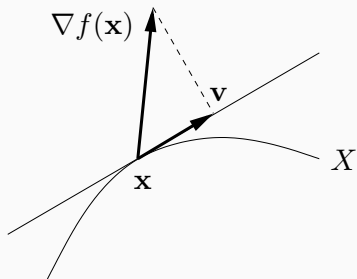
$$\lambda L'(\mathbf{x}) = f'(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{g}'(\mathbf{x}).$$

Lagrangeova funkce na **tečném prostoru**

Nechť funkce $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ má v \mathbf{x} **vázaný extrém** na X .

$$\forall \mathbf{v} \in T_{\mathbf{x}} : \mathbf{v} \perp f'(\mathbf{x})^T = \nabla f(\mathbf{x}),$$

jinak by ze směrů $\pm \mathbf{v}$ byl jeden vzestupný a jeden sestupný.



Lagrangeova funkce na **tečném prostoru**

Nechť funkce $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ má v \mathbf{x} **vázaný extrém** na X .

$$\forall \mathbf{v} \in T_{\mathbf{x}} : \mathbf{v} \perp f'(\mathbf{x})^T = \nabla f(\mathbf{x}),$$

jinak by ze směrů $\pm \mathbf{v}$ byl jeden vzestupný a jeden sestupný.

Stručněji $T_{\mathbf{x}} \perp f'(\mathbf{x})^T$, též

$$T_{\mathbf{x}} \subseteq \text{null } f'(\mathbf{x}),$$

což spolu s předchozím

$$T_{\mathbf{x}} \subseteq \text{null } \mathbf{g}'(\mathbf{x}),$$

dává

$$T_{\mathbf{x}} \subseteq \text{null}(f'(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{g}'(\mathbf{x})) = \text{null } \boldsymbol{\lambda}^T L'(\mathbf{x})$$

pro všechna $\boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}^m$.

Lagrangeova funkce na prostoru generovaném gradienty omezení

$$G_{\mathbf{x}} := \text{span}\{\mathbf{g}'_1(\mathbf{x})^T, \dots, \mathbf{g}'_m(\mathbf{x})^T\} = \{\mathbf{g}'(\mathbf{x})^T \boldsymbol{\lambda} \mid \boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}^m\} \subseteq T_{\mathbf{x}}^{\perp},$$
$$\forall \mathbf{v} \in G_{\mathbf{x}} \exists \boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}^m : \mathbf{v} = \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{g}'(\mathbf{x}).$$

Jestliže $f'(\mathbf{x})^T \in G_{\mathbf{x}}$, pak pro $\mathbf{v} = -f'(\mathbf{x})^T \in G_{\mathbf{x}}$

$$\boldsymbol{\lambda}^T L'(\mathbf{x}) = f'(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{g}'(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$$

pro nějaké $\boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}^m$; $\boldsymbol{\lambda}^T L$ má nulovou derivaci ve všech směrech

$$\mathbf{t} \in T_{\mathbf{x}},$$

$$\mathbf{v} \in G_{\mathbf{x}},$$

a tedy i

$$\uparrow \quad c_1 \mathbf{t} + c_2 \mathbf{v} \in T_{\mathbf{x}} + G_{\mathbf{x}}.$$

Jestliže $T_{\mathbf{x}} + G_{\mathbf{x}} = \mathbb{R}^n$, pak řešení \mathbf{x} můžeme najít jako stacionární bod funkce $\boldsymbol{\lambda}^T L$.

Regulární body

Odvodili jsme postup pro hledání vázaných extrémů v bodech $\mathbf{x} \in X = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}\}$, splňujících $T_{\mathbf{x}} + G_{\mathbf{x}} = \mathbb{R}^n$, kde

$T_{\mathbf{x}}$ = lineární prostor vektorů tečných k X v bodě \mathbf{x} ,

$G_{\mathbf{x}} = \text{span}\{g'_1(\mathbf{x})^T, \dots, g'_m(\mathbf{x})^T\}$.

Potřebnou podmínku zformulujeme pro obecné body:

Definice

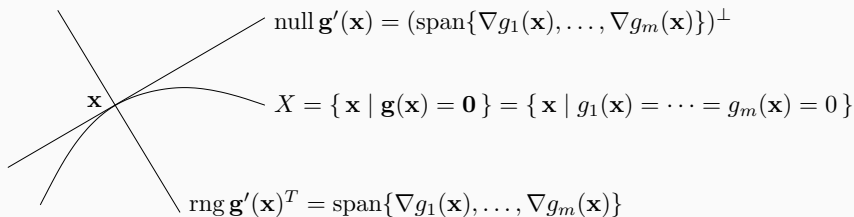
Bod $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ je **regulární bod zobrazení $\mathbf{g}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$** , jestliže zobrazení \mathbf{g} je v bodě \mathbf{x} spojitě diferencovatelné a Jacobiho matice $\mathbf{g}'(\mathbf{x})$ má lineárně nezávislé řádky.

- Stačí pouze \mathbf{x} , \mathbf{g} .
- Nepotřebujeme f .
- Nestačí \mathbf{x} , X .

Tečný a ortogonální prostor **v regulárních bodech**

V **regulárním** bodě $\mathbf{x} \in X$ zobrazení \mathbf{g} je:

- **tečný prostor** $T_{\mathbf{x}} = \text{null } \mathbf{g}'(\mathbf{x})$
- **ortogonální prostor** $T_{\mathbf{x}}^{\perp} = (\text{null } \mathbf{g}'(\mathbf{x}))^{\perp} = \text{rng } \mathbf{g}'(\mathbf{x})^T$



Podmínky prvního řádu pro vázané extrémny

$$\begin{aligned}\lambda L(\mathbf{x}) &= f(\mathbf{x}) + \lambda^T \mathbf{g}(\mathbf{x}), \\ L(\mathbf{x}, \lambda) &= (f(\mathbf{x}) + \lambda^T \mathbf{g}(\mathbf{x}), \mathbf{g}(\mathbf{x})^T).\end{aligned}$$

Věta

Nechť funkce $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, $\mathbf{g}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ jsou spojitě diferencovatelné v regulárním bodě \mathbf{x} zobrazení \mathbf{g} . Jestliže \mathbf{x} je lokální extrém funkce f za podmínky $\mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}_m$, pak existuje $\lambda \in \mathbb{R}^m$, splňující

$$\lambda L'(\mathbf{x}) = f'(\mathbf{x}) + \lambda^T \mathbf{g}'(\mathbf{x}) = \mathbf{0}_n,$$

neboli

$$L'(\mathbf{x}, \lambda) = (f'(\mathbf{x}) + \lambda^T \mathbf{g}'(\mathbf{x}), \mathbf{g}(\mathbf{x})) = \mathbf{0}_{n+m}.$$

Podmínky **druhého** řádu pro **vázané** extrém

Předpokládáme navíc f, \mathbf{g} dvakrát diferencovatelné.

$\lambda L''(\mathbf{x})$ je pozitivně definitní

↓ ✗

\mathbf{x} je **vázané** minimum f (a **volné** minimum λL)

↓ ✗

$\lambda L''(\mathbf{x})$ je pozitivně semidefinitní

kde $\lambda L''(\mathbf{x}) = L_{\mathbf{x},\mathbf{x}}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) = \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{x}^2} L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) = f''(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^m \lambda_i g_i''(\mathbf{x})$.

Na $L_{\boldsymbol{\lambda},\boldsymbol{\lambda}}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) = \frac{\partial^2}{\partial \boldsymbol{\lambda}^2} L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda})$, $L_{\mathbf{x},\boldsymbol{\lambda}}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) = \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{x} \partial \boldsymbol{\lambda}} L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda})$ nezáleží.

Možný postup: sekvenční kvadratické programování (SQP)

Newtonova metoda **minimalizace funkce** (opakování)

Řešíme rovnici $f'(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ iterací $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - f''(\mathbf{x}_k)^{-1} f'(\mathbf{x}_k)^\top$.

Použijeme pro $f(\mathbf{x}) := L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda})$:

$$L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) = f(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\lambda}^\top \mathbf{g}(\mathbf{x}),$$

$$L'(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) = \left(f'(\mathbf{x}) + \underbrace{\boldsymbol{\lambda}^\top \mathbf{g}'(\mathbf{x})}_{\sum_{i=1}^m \lambda_i \mathbf{g}'_i(\mathbf{x})}, \mathbf{g}(\mathbf{x})^\top \right),$$

$$L''(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) = \begin{bmatrix} f''(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^m \lambda_i \mathbf{g}''_i(\mathbf{x}) & \mathbf{g}'(\mathbf{x})^\top \\ \mathbf{g}'(\mathbf{x}) & \mathbf{0} \end{bmatrix},$$

$$\begin{bmatrix} \mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k \\ \boldsymbol{\lambda}_{k+1} - \boldsymbol{\lambda}_k \end{bmatrix} = -L''(\mathbf{x}_k, \boldsymbol{\lambda}_k)^{-1} L'(\mathbf{x}_k, \boldsymbol{\lambda}_k)^\top =$$

$$= - \begin{bmatrix} f''(\mathbf{x}_k) + \sum_{i=1}^m \lambda_i \mathbf{g}''_i(\mathbf{x}_k) & \mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)^\top \\ \mathbf{g}'(\mathbf{x}_k) & \mathbf{0} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} f'(\mathbf{x}_k)^\top + \mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)^\top \boldsymbol{\lambda}_k \\ \mathbf{g}(\mathbf{x}_k) \end{bmatrix}.$$

Co s body, které nejsou regulární?

- Pokud je jich málo, vyzkoušíme je všechny.
- Pokud je některé $g'_i(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$, zkusme ho rozložit na součin a vyšetřit každý činitel zvlášť.
- Chybějící tečné vektory můžeme najít sami a zpracovat stejně jako gradienty omezujících funkcí.
- Místo toho můžeme odvodit jiné omezující funkce, určující stejný obor X .

Speciální případ: **afinní** omezení (opak.)

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{C}\mathbf{x} - \mathbf{d}, \quad \mathbf{g}'(\mathbf{x}) = \mathbf{C}, \quad \nabla \mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{C}^T.$$

1. Jsou-li řádky matice \mathbf{C} (neboli $\nabla g_1(\mathbf{x}), \dots, \nabla g_m(\mathbf{x})$) **lineárně nezávislé**, pak jsou všechny body regulární.
2. Jsou-li řádky matice \mathbf{C} (neboli $\nabla g_1(\mathbf{x}), \dots, \nabla g_m(\mathbf{x})$) **lineárně závislé**, pak není žádný bod regulární a záleží na \mathbf{d} :
 - $X = \emptyset$: není co řešit.
 - $X \neq \emptyset$: můžeme z $[\mathbf{C} \ \mathbf{d}]$ vynechat LZ řádky a pokračovat dle bodu 1, nebo na to nedbat a řešit původní soustavu

$$\begin{aligned} f'(\mathbf{x}) &= \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{C}, \text{ neboli } \nabla f(\mathbf{x}) = \mathbf{C}^T \boldsymbol{\lambda}, \\ \mathbf{C}\mathbf{x} &= \mathbf{d}. \end{aligned}$$

(To **pro nelineární podmínky nelze.**)

Pro velký počet omezujících funkcí je těžké zajistit nebo ověřit regularitu.

Můžeme doufat, že množina bodů, v nichž je regularita porušena, je „řídka“, takže i když přes ni projdeme, nezůstaneme v ní.

Alternativa: Metoda projektovaných gradientů

Někdy dovedeme k libovolnému bodu z \mathbb{R}^n *snadno* najít „nejbližší“ přípustný z X („projekci“ na X), např. pro

$$X_1 = \{\mathbf{x} \mid \mathbf{a} \leq \mathbf{x} \leq \mathbf{b}\},$$

$$X_2 = \{\mathbf{x} \mid \|\mathbf{x}\| \leq r\},$$





$$X_3 = \{\mathbf{x} \mid \|\mathbf{x}\| = r\}.$$

Pak můžeme střídat kroky:

1. Postup ve směru $\nabla f(\mathbf{x})$ bez respektování omezujících podmínek.
2. Projekce na X .

Problém: V blízkosti extrému nás 1. krok zavádí dál od cíle.

Reference

-  T. Werner. *Optimalizace* (kapitola 8). Elektronická skripta. FEL ČVUT, 17. 10. 2022. https://cw.fel.cvut.cz/wiki/_media/courses/b0b33opt/opt.pdf
-  S. Boyd, L. Vandenberghe. *Introduction to Applied Linear Algebra: Vectors, Matrices, and Least Squares*. Cambridge University Press, 2018.
-  J. Hamhalter a J. Tišer. *Diferenciální počet funkcí více proměnných*. FEL ČVUT, 2005.
<https://math.fel.cvut.cz/en/people/tiser/dipocet.pdf>
-  M. Navara. *Matematika spojitého světa*. Elektronická skripta. FEL ČVUT, 2011.
https://cmp.felk.cvut.cz/~navara/MSS/MSS_print.pdf