

Apunts de programació matemàtica no lineal

Llorenç Cerdà-Alabern

llorencc@ac.upc.edu

Barcelona, juny de 2009.

Índex

6	Programació quadràtica (PQ)	16
	6.1 Condicions de KKT per un problema de PQ	16
	6.2 Mètode de Wolfe	17
7	Programació geomètrica (PG)	18
	7.1 Introducció	18
	7.2 PG sense restriccions	18
	7.3 PG amb restriccions	19
8	Mètodes de barreira	20
	8.1 Formulació	20
9	Programació dinàmica determinista	21
	9.1 Formulació	21
22	Apèndixs	22
	A. Mètode de la secció àurea	22
	B. Búsqueda de Fibonacci	22
	C. Mètode de Hooke i Jeeves	23
	D. Matrius definites positives	23
	E. Forma quadràtica	24
	F. Gradient	24
	G. Hipertípic i subconjunt de nivell	24
	H. Teorema de Taylor per funcions de variables variables	25
26	Bibliografia	26
<hr/>		
1	Conjunts convexes	2
	1.1 Elements	2
	1.2 Operacions amb conjunts convexes	3
	1.3 Teoremes sobre conjunts convexes	3
	1.4 Teoremes d'alternatives	4
2	Funcions convexes	4
	2.1 Funcions convexes	4
	2.2 Funcions còncaves	5
	2.3 Operacions que preserven la convexitat	5
	2.4 Continuitat i derivabilitat de funcions convexes	5
	2.5 Exemples de funcions convexes en \mathbb{R}^n	6
	2.6 Exemples de funcions convexes en \mathbb{R}^n	6
	2.7 Funcions quasiconvexes	6
	2.8 Funcions pseudocconvexes	7
3	Optimització sense restriccions en \mathbb{R}	7
	3.1 Condicions d'optimalitat	7
	3.2 Mètode de la secció àurea	8
	3.3 Búsqueda de Fibonacci	8
	3.4 Mètode de Newton	9
4	Optimització sense restriccions en \mathbb{R}^n	9
	4.1 Condicions d'optimalitat	10
	4.2 Mètodes de descens	10
	4.2.1 Càlcul de la mida del pas	10
	4.3 Mètodes de búsqueda directa	10
	4.3.1 Mètode de Hooke i Jeeves	10
	4.4 Mètodes diferencials	11
	4.4.1 Mètode del màxim descens	11
	4.4.2 Mètode de Newton	11
5	Optimització amb restriccions	12
	5.1 Plantejament del problema	12
	5.2 Problema d'optimització convexa	12
	5.3 Problemes equivalents	12
	5.4 Lagrangia i dualitat	13
	5.4.1 Funció dual Lagrangiana	13
	5.4.2 Problema dual de Lagrange	13
	5.5 Teorema de Karush-Kuhn-Tucker	14
	5.5.1 Interpretació geomètrica de les condicions de KKT	15

Vaig escriure aquests apunts mentre preparava l'assignatura *Programación Matemática* del curs 2008-09 de la carrera de matemàtiques de la UNED. Els apunts estan basats fonamentalment en el llibre de l'assignatura [5], Boyd [3], Winston [6], Luenberger [4] i wikipedia [2]. El contingut no és rigoros ni complet, i només hi ha demostracions senzilles orientades a entendre o ajudar a memoritzar les relacions que demostren. L'edició l'he fet amb \LaTeX .

Notació: Els vectors son vectors columna, i es representen amb majúscules en negreta (X). Les matrius es representen amb majúscules en negreta (A). x_{\top} vol dir transposada, de manera que $x_{\top}^T x_2$ és el producte escalar dels vectors x_1 i x_2 .

Capítol 1

Conjunts convexes

1.1 Elements

Recta

$$\{\mathbf{x} \mid \mathbf{x} = \lambda \mathbf{x}_1 + (1 - \lambda) \mathbf{x}_2; \lambda \in \mathbb{R}; \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in \mathbb{R}^n\} \quad (1.1)$$

Segment

$$\{\mathbf{x} \mid \mathbf{x} = \lambda \mathbf{x}_1 + (1 - \lambda) \mathbf{x}_2; 0 \leq \lambda \leq 1; \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in \mathbb{R}^n\} \quad (1.2)$$

Conjunt afí Γ és afí si:

$$\left. \begin{array}{l} \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in \Gamma \\ \lambda \in \mathbb{R} \end{array} \right\} \Rightarrow \lambda \mathbf{x}_1 + (1 - \lambda) \mathbf{x}_2 \in \Gamma \quad (1.3)$$

El conjunt de \mathbb{R}^n : $\Gamma = \{\mathbf{A}\mathbf{x} + \mathbf{b} \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^m\}$, on $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times m}$, $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$ és un conjunt afí. La funció $f: \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^n$, $f(\mathbf{x}) = \mathbf{A}\mathbf{x} + \mathbf{b}$ es diu funció afí.

Combinació afí Un punt $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ és una combinació afí dels punts $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_m \in \mathbb{R}^n$ si existeixen les constants $\lambda_1 + \dots + \lambda_m = 1$ tals que:

$$\mathbf{x} = \lambda_1 \mathbf{x}_1 + \dots + \lambda_m \mathbf{x}_m$$

Conjunt convex Γ és convex si:

$$\left. \begin{array}{l} \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in \Gamma \\ 0 \leq \lambda \leq 1 \end{array} \right\} \Rightarrow \lambda \mathbf{x}_1 + (1 - \lambda) \mathbf{x}_2 \in \Gamma \quad (1.4)$$

Combinació convexa Un punt $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ és una combinació convexa dels punts $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_m \in \mathbb{R}^n$ si existeixen les constants $\lambda_1, \dots, \lambda_m \geq 0$, $\lambda_1 + \dots + \lambda_m = 1$ tals que:

$$\mathbf{x} = \lambda_1 \mathbf{x}_1 + \dots + \lambda_m \mathbf{x}_m$$

Vèrtex o extrem Un punt $\mathbf{x} \in \Gamma$ és un vèrtex de Γ si no és possible trobar $\mathbf{x}_1 \neq \mathbf{x}$, $\mathbf{x}_2 \neq \mathbf{x}$; $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in \Gamma$, $0 \leq \lambda \leq 1$ tals que $\mathbf{x} = \lambda \mathbf{x}_1 + (1 - \lambda) \mathbf{x}_2$.

Envolupant convexa (convex hull) $\text{Conv } \Gamma$ d'un conjunt arbitrari Γ és el conjunt de totes les combinacions convexes de punts de Γ :

$$\text{Conv } \Gamma = \{\lambda_1 \mathbf{x}_1 + \dots + \lambda_m \mathbf{x}_m \mid \mathbf{x}_i \in \Gamma; \lambda_i \geq 0, \lambda_1 + \dots + \lambda_m = 1\}$$

Semiespai obert

$$\{\mathbf{x} \mid \mathbf{c}^T \mathbf{x} < \alpha; \mathbf{c}, \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n; \alpha \in \mathbb{R}\} \quad (1.5)$$

Es diu tancat si és \leq .

Subespai (anomenat també subespai lineal) Γ és un subespai si:

$$\left. \begin{array}{l} \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in \Gamma \\ a, b \in \mathbb{R} \end{array} \right\} \Rightarrow a \mathbf{x}_1 + b \mathbf{x}_2 \in \Gamma \quad (1.6)$$

Subespai afí (anomenat també variació lineal, *linear manifold*). Si Γ és un subespai, el subespai afí Λ és el subespai traslladat:

$$\Lambda = \mathbf{b} + \Gamma = \{\mathbf{x} + \mathbf{b} \mid \mathbf{x} \in \Gamma\} \quad (1.7)$$

Per exemple, en \mathbb{R}^3 l'origen, línies i plans que passen per l'origen i tot \mathbb{R}^3 són subespais. Mentre que punts, línies i plans en general i tot \mathbb{R}^3 són subespais afins.

Con \mathcal{C} és un con si:

$$\left. \begin{array}{l} \mathbf{x} \in \mathcal{C} \\ \lambda \geq 0 \end{array} \right\} \Rightarrow \lambda \mathbf{x} \in \mathcal{C} \quad (1.8)$$

Combinació cònica Un punt $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ és una combinació cònica dels punts $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_m \in \mathbb{R}^n$ si existeixen les constants $\lambda_1, \dots, \lambda_m \geq 0$, tals que:

$$\mathbf{x} = \lambda_1 \mathbf{x}_1 + \dots + \lambda_m \mathbf{x}_m$$

Con normat Per a qualsevol norma en \mathbb{R}^n , el con $\mathcal{C} \subset \mathbb{R}^{n+1}$ associat a la norma és:

$$\mathcal{C} = \{(\mathbf{x}, t) \mid \|\mathbf{x}\| \leq t\} \quad (1.9)$$

Con semidefinit positiu Farem servir la notació \mathbf{S}^n , \mathbf{S}_+^n i \mathbf{S}_{++}^n per referir-nos respectivament al conjunt de matrius simètriques, semidefinides positives i definides positives (veure l'apèndix D). El conjunt \mathbf{S}_+^n és un con convex de dimensió $n(n+1)/2$ anomenat "con semidefinit positiu".

Hiperplà És el conjunt:

$$\{\mathbf{x} \mid \mathbf{c}^T \mathbf{x} = \alpha; \mathbf{c}, \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n; \alpha \in \mathbb{R}\} \quad (1.10)$$

Si expressem l'equació (1.10) com:

$$\{\mathbf{x} \mid \mathbf{c}^T(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) = 0; \mathbf{c}, \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n; \mathbf{c}^T \mathbf{x}_0 = \alpha\}$$

l'hiperplà es pot interpretar geomètricament com el conjunt de vectors amb origen \mathbf{x}_0 normals al vector \mathbf{c} . Una definició equivalent és que un hiperplà en \mathbb{R}^n és un subespai afí de dimensió $n - 1$.

$f(x) - y$. Com que $\Delta F(x, y) = \begin{bmatrix} \Delta f(x) \\ -1 \end{bmatrix}$, apli-

cant (G.2) tenim que l'hiperpla tangent al gràfic (G.4)

(G.5)
$$\begin{bmatrix} \Delta f(x_0) \\ -1 \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} f(x_0) \\ 0 \end{bmatrix} = 0$$

Notar també que si $f(x)$ és una funció convexa, aleshores (G.5) serà l'hiperpla suport de l'epigràfic de $f(x)$ en el punt x_0 (veure la figura F.2).

H. Teorema de Taylor per funcions de variables

Si la funció $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ és diferenciable en una regió D que conté el segment $[x_1, x_2]$, aleshores existeix un $0 \leq \lambda \leq 1$ tal que:

(H.1)
$$f(x_2) = f(x_1) + \Delta f(\lambda x_1 + (1 - \lambda)x_2)^T(x_2 - x_1)$$

Aquesta relació s'anomena també teorema de Lagrange o del valor mig. A més, si existeixen les derivades parcials de segon ordre, aleshores:

(H.2)
$$f(x_2) = f(x_1) + \Delta f(x_1)^T(x_2 - x_1) + 1/2(x_2 - x_1)^T \Delta^2 f(\lambda x_1 + (1 - \lambda)x_2)(x_2 - x_1)$$

on $\Delta^2 f(x)$ és el Hessià: $[\Delta^2 f(x)]_{ij} = \left[\frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_i \partial x_j} \right]$

Bibliografia

[1] The R Project for Statistical Computing. <http://www.r-project.org>.
[2] Wikipedia, the free encyclopedia. <http://en.wikipedia.org>.
[3] Stephen Boyd i Lieven Vandenberghe. *Convex Optimization*. Cambridge University Press, 2004.

[4] David G. Luenberger. *Linear and Nonlinear Programming*. Springer, segona edició, 2005.

[5] Rafael Infante Macías. *Métodos de programación matemática, Tomo II*. Ediciones UNED, segona edició, 1997.

[6] Wayne L. Winston. *Operations Research Applications and Algorithms*. Wadsworth Publishing Company, tercera edició.

I.2. Operacions amb conjunts convexes

Polítops i poliedres Un polítop \mathcal{P} és un conjunt de \mathbb{R}^n intersecció d'un número finit de semiespais tancats i hiperplans:

$$\mathcal{P} = \{x \mid a_j^T x \leq b_j, j = 1, \dots, n; c_j^T x = d_j, j = 1, \dots, p; x, a_j, c_j, b_j, d_j \in \mathbb{R}^n\}$$

Si el polítop és acotat s'anomena poliedre. Ambdós són convexes. Per exemple, la figura I.1 mostra el poliedre:

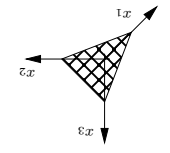


Figura I.1.: Poliedre $x_1 + x_2 + x_3 = 1, x_i \geq 0$

Simplex Siguen $m + 1$ punts diferents: $x_0, \dots, x_m \in \mathbb{R}^n$. El conjunt Γ de totes les combinacions convexes d'aquests punts s'anomena simplex amb vèrtexs x_i :

$$\Gamma = \{x \mid x = \sum_{i=0}^m \lambda_i x_i; 0 \leq \lambda_i \leq 1; \sum_{i=0}^m \lambda_i = 1\}$$

Bolla Euclídea Una bolla Euclídea, o simplement bola, de centre x_c i radi r en \mathbb{R}^n és:

(1.11)
$$B(x_c, r) = \{x \mid \|x - x_c\|_2 \leq r\} = \{x \mid (x - x_c)^T(x - x_c) \leq r^2\}$$

El·lipsoides Un el·lipsoides és: $E = \{x \mid (x - x_c)^T P (x - x_c) \leq 1\} = \{x \mid \|u\|_2 \leq 1, A^2 = P\}$ (1.12)

On les matrius P i A són simètriques i semidefínides positives. La mida dels semieixos és $\sqrt{\lambda_i}$, on λ_i són els autovalors de P .

Suma

$$\Gamma + \Delta = \{z \mid z = x + y, x \in \Gamma, y \in \Delta\}$$

Notar que:

$$\Gamma - \Delta = \{z \mid z = x - y, x \in \Gamma, y \in \Delta\}$$

Producte per un escalar

$$\lambda \Gamma = \{z \mid z = \lambda x, x \in \Gamma\}$$

I.3 Teoremes sobre conjunts convexes

Teorema I.1 Operacions amb conjunts convexes que preserven la convexitat

Δ , donen lloc a un conjunt convex:

- Intersecció $\Gamma \cap \Delta$.
- Suma $\Gamma + \Delta$.
- Diferència $\Gamma - \Delta$.
- Producte per un escalar $\lambda \Gamma$.
- Translació $x + \Gamma$.
- Combinació lineal $\lambda \Gamma + \mu \Delta$.

• Combinació afí. Donada la funció afí $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$, $f(x) = Ax + b$, la imatge del conjunt convex Γ al aplicar f : $f(\Gamma) = \{f(x) \mid x \in \Gamma\}$.

Teorema I.2 Separació de conjunts convexes Un hiperpla $\{x \mid c^T x = \alpha\}$ separa dos conjunts Γ, Δ si

$$x \in \Gamma \Rightarrow c^T x \leq \alpha$$

$$x \in \Delta \Rightarrow c^T x \geq \alpha$$

Es a dir:

$$c^T x_1 \leq c^T x_2 \quad \forall x_1 \in \Gamma, x_2 \in \Delta$$

Si Γ, Δ són dos conjunts convexes no buits, existeix un hiperpla que els separa. De fet, si $a \in \Gamma$ i $b \in \Delta$ són dos punts de distància mínima, aleshores l'hiperpla que passa pel seu punt mig és: $c^T x = \alpha, \text{ on } c = a - b$ i $\alpha = (\|a\|_2^2 - \|b\|_2^2)/2$

Teorema I.3 Hiperpla suport

Donat un conjunt convex Γ , es diu hiperpla suport de Γ a l'hiperpla que té intersecció no buida amb Γ tal que Γ està contingut en un dels semiespais determinats per l'hiperpla. Es a dir, si x és un vector que no pertany a l'interior de Γ , aleshores existeix un vector $c \neq 0$ tal que:

$$c^T x \geq c^T \tilde{x} \quad \forall x \in \Gamma$$

Si Γ és un conjunt convex compacte (tancat i acotat), aleshores qualssevol hiperpla suport de Γ té almenys un punt extrem de Γ .

Teorema 1.4 Intersecció de conjunts convexes

Si $\Gamma_i, i \in \mathcal{I}$ és una família de conjunts convexes en \mathbb{R}^n , $\bigcap_{i \in \mathcal{I}} \Gamma_i$ és un conjunt convex.

Teorema 1.5 Combinació convexa de punts

Si Γ és un conjunt convex, aleshores qualsevol combinació convexa de m punts de Γ pertany a Γ .

Teorema 1.6 Teorema de Caratheodory

Sigui un conjunt arbitrari $\Gamma \subset \mathbb{R}^n$, aleshores, qualsevol punt $x \in \Gamma$ es pot expressar com a la combinació convexa de $n + 1$ punts de Γ .

Alternativa 1	Alternativa 2	Nom
$\mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{b}$ $\mathbf{x} \geq \mathbf{0}$	$\mathbf{A}^T \mathbf{y} \geq \mathbf{0}$ $\mathbf{b}^T \mathbf{y} < 0$	Farkas
$\mathbf{A} \mathbf{x} \leq \mathbf{b}$ $\mathbf{x} \geq \mathbf{0}$	$\mathbf{A}^T \mathbf{y} \geq \mathbf{0}$ $\mathbf{b}^T \mathbf{y} < 0$ $\mathbf{y} \geq \mathbf{0}$	Gale
$\mathbf{A} \mathbf{x} < \mathbf{0}$	$\mathbf{A}^T \mathbf{y} = \mathbf{0}$ $\mathbf{y} \geq \mathbf{0}$ $\mathbf{y} \neq \mathbf{0}$	Gordan
$\mathbf{A}_1 \mathbf{x} < \mathbf{0}$ $\mathbf{A}_2 \mathbf{x} \leq \mathbf{0}$	$\mathbf{A}_1^T \mathbf{y}_1 + \mathbf{A}_2^T \mathbf{y}_2 = \mathbf{0}$ $\mathbf{y}_1 \geq \mathbf{0}, \mathbf{y}_1 \neq \mathbf{0}$ $\mathbf{y}_2 \geq \mathbf{0}$	Motzkin

Taula 1.1: Alguns teoremes d'alternatives.

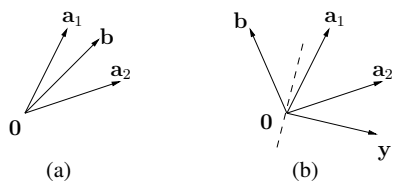


Figura 1.2: Interpretació geomètrica del teorema de Farkas.

1.4 Teoremes d'alternatives**Teorema 1.7 Lema de Farkas**

Sigui \mathbf{A} una matriu $m \times n$ i \mathbf{b} un vector, $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$. Aleshores es compleix exactament una de les dues alternatives següents:

1. Existeix un vector $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ tal que $\mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{b}$ i $\mathbf{x} \geq \mathbf{0}$.
2. Existeix un vector $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^m$ tal que $\mathbf{A}^T \mathbf{y} \geq \mathbf{0}$ i $\mathbf{b}^T \mathbf{y} < 0$.

Interpretació geomètrica: Siguin $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_n$ les columnes de \mathbf{A} . La condició 1 implica que el vector \mathbf{b} és

una combinació cònica dels vectors \mathbf{a}_i (veure la figura 1.2.(a)). La condició 1 vol dir que hi ha un vector \mathbf{y} que fa menys de 90° amb els vectors \mathbf{a}_i i més de 90° amb el vector \mathbf{b} . Per tant, existeix un hiperplà perpendicular al vector \mathbf{y} que separa el vector \mathbf{b} del con format pels vectors \mathbf{a}_i (veure la figura 1.2.(b)).

Existeixen nombroses variacions del teorema de Farkas. La taula 1.1 en mostra algunes.

Capítol 2**Funcions convexes****2.1 Funcions convexes**

Sigui Γ un conjunt convex de \mathbb{R}^n i f una funció definida sobre Γ . Es diu que f és convexa si:

$$\left. \begin{array}{l} \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in \Gamma \\ 0 \leq \lambda \leq 1 \end{array} \right\} \Rightarrow f(\lambda \mathbf{x}_1 + (1 - \lambda) \mathbf{x}_2) \leq \lambda f(\mathbf{x}_1) + (1 - \lambda) f(\mathbf{x}_2) \quad (2.1)$$

Si la desigualtat és $<$, es diu estrictament convexa.

Teorema 2.1 Desigualtat de Jensen

L'equació (2.1) es pot generalitzar fàcilment a qualsevol combinació convexa de punts de Γ . És a dir, si $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n \in \Gamma$ i $0 \leq \lambda_i \leq 1, \sum_i \lambda_i = 1, i = 1, \dots, n$, aleshores f és convexa si:

$$f(\lambda_1 \mathbf{x}_1 + \dots + \lambda_n \mathbf{x}_n) \leq \lambda_1 f(\mathbf{x}_1) + \dots + \lambda_n f(\mathbf{x}_n)$$

També podem agafar un conjunt infinit de punts de Γ , de manera que per qualsevol funció $p(\mathbf{x}) \geq 0, \mathcal{D} \subseteq \Gamma, \int_{\mathcal{D}} p(\mathbf{x}) = 1$, aleshores f és convexa si:

$$f\left(\int_{\mathcal{D}} p(\mathbf{x}) \mathbf{x} d\mathbf{x}\right) \leq \int_{\mathcal{D}} p(\mathbf{x}) f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad (2.2)$$

Podem interpretar $p(\mathbf{x})$ com una funció densitat de probabilitat. Per tant, la desigualtat (2.2) es pot enunciar de la següent manera: Si \mathbf{x} és una variable aleatòria i $\mathbf{x} \in \text{dom } f$ amb probabilitat 1, aleshores per a qualsevol funció convexa f :

$$f(E\mathbf{x}) \leq E f(\mathbf{x}) \quad (2.3)$$

La desigualtat (2.3) es coneix com a desigualtat de Jensen.

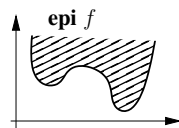
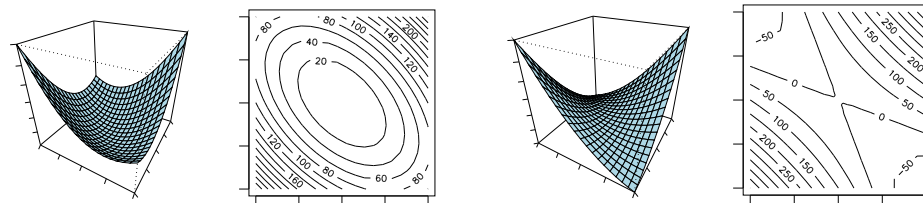
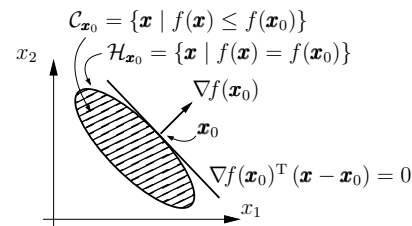
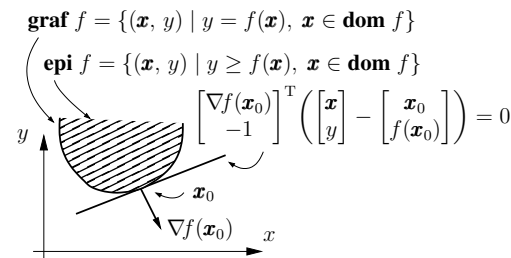


Figura 2.1: Epigràfic d'una funció.

(a) $a = b = c = 1, \lambda_1 = 3/2, \lambda_2 = 1/2$.(b) $a = c = 1, b = 3, \lambda_1 = 5/2, \lambda_2 = -1/2$.Figura E.1: Forma quadràtica en \mathbb{R}^2 (equacions (E.1) i (E.4)) i corbes de nivell per una matriu \mathbf{A} : (a) definida positiva, (b) indefinida.Figura F.1: Relació entre el gradient $\nabla f(\mathbf{x}_0)$, hiperfície de nivell $\mathcal{H}_{\mathbf{x}_0}$ i subconjunt de nivell $\mathcal{C}_{\mathbf{x}_0}$ d'una funció $f: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$.Figura F.2: Relació entre el gradient, gràfic i epigràfic d'una funció $f: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$.

$(\mathbf{x}^T \mathbf{A}_H \mathbf{x})^T = (\mathbf{A}_H \mathbf{x})^T \mathbf{x} = \mathbf{x}^T \mathbf{A}_H^T \mathbf{x} = \mathbf{x}^T \mathbf{A}_H \mathbf{x} = \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x}$. Per tant, aplicant la regla de la cadena i el resultat (F.4):

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \nabla(\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x}) = \mathbf{A} \mathbf{x} + \mathbf{A} \mathbf{x} = 2 \mathbf{A} \mathbf{x} \quad (F.5)$$

Observacions

- El transposat de (F.3) és el Jacobí de $\mathbf{g}(\mathbf{x})$.
- Alguns autors defineixen el gradient d'una funció $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ com un vector fila igual al transposat del vector (F.1). En aquest cas es defineix el gradient de la funció vectorial $\mathbf{g}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ com el transposat de la matriu (F.3), és a dir, coincideix amb el Jacobí.

G. Hiperfície i subconjunt de nivell

Es diu hiperfície de nivell (o conjunt de nivell, level set) $\mathcal{H}_{\mathbf{x}_0}$ d'una funció $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ que passa per un punt \mathbf{x}_0 al conjunt (veure la figura F.1):

$$\mathcal{H}_{\mathbf{x}_0} = \{\mathbf{x} \mid f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}_0)\} \quad (G.1)$$

Si $n = 2$ es diuen corbes de nivell, i si $n = 3$ superfícies de nivell.

Si el gradient en un punt \mathbf{x}_0 és $\nabla f(\mathbf{x}_0) \neq \mathbf{0}$, aleshores $\nabla f(\mathbf{x}_0)$ és un vector perpendicular a la hiperfície de nivell de la funció $f(\mathbf{x})$ en \mathbf{x}_0 . Per tant, l'hiperplà tangent a la hiperfície de nivell (G.1) en el punt \mathbf{x}_0 és:

$$\nabla f(\mathbf{x}_0)^T (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) = 0 \quad (G.2)$$

Es diu subconjunt de nivell (sublevel set) $\mathcal{C}_{\mathbf{x}_0}$ d'una funció $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ que passa per un punt \mathbf{x}_0 al conjunt (veure la figura F.1):

$$\mathcal{C}_{\mathbf{x}_0} = \{\mathbf{x} \mid f(\mathbf{x}) \leq f(\mathbf{x}_0)\} \quad (G.3)$$

És fàcil veure que si $f(\mathbf{x})$ és convexa, aleshores $\mathcal{C}_{\mathbf{x}_0}$ és un conjunt convex: Si $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in \mathcal{C}_{\mathbf{x}_0}$, aleshores $f(\alpha \mathbf{x}_1 + (1 - \alpha) \mathbf{x}_2) \leq \alpha f(\mathbf{x}_1) + (1 - \alpha) f(\mathbf{x}_2) \leq \alpha f(\mathbf{x}_0) + (1 - \alpha) f(\mathbf{x}_0) = f(\mathbf{x}_0) \Rightarrow f(\alpha \mathbf{x}_1 + (1 - \alpha) \mathbf{x}_2) \in \mathcal{C}_{\mathbf{x}_0}$. Així doncs, si $f(\mathbf{x})$ és convexa (G.2) és l'hiperplà suport de $\mathcal{C}_{\mathbf{x}_0}$ en \mathbf{x}_0 (veure la figura F.1).

Notar que el gràfic d'una funció $f(\mathbf{x})$:

$$\text{graf } f = \{(\mathbf{x}, y) \mid y = f(\mathbf{x}), \mathbf{x} \in \text{dom } f\} \quad (G.4)$$

el podem interpretar com la hiperfície de nivell $F(\mathbf{x}, y) = 0$ de la funció $F: \mathbb{R}^{n+1} \rightarrow \mathbb{R}, F(\mathbf{x}, y) =$

Anàlogament, una matriu que complex $\Re\{x^H \mathbf{A} x\} <$

0, respectivament $\Re\{x^H \mathbf{A} x\} \leq 0$, es diu definida nega- ra **E.1**):

• El·lipses si $b^2 < 4ac$ ($\lambda_1, \lambda_2 > 0, \lambda_1 \neq \lambda_2$).

• Cercles si $a = c, b = 0$ ($\lambda_1, \lambda_2 > 0, \lambda_1 = \lambda_2$).

• Paràbols si $b^2 = 4ac$ ($\lambda_1 > 0, \lambda_2 = 0$).

• Hipèrbols si $b^2 > 4ac$ ($\lambda_1 > 0, \lambda_2 < 0$).

menors principals d'ordre $k, k = 1, 2, \dots, n$ siguin

negatius si k és senar, i positius si k és parell.

Una matriu que no és ni (semi)definida positiva ni ne- gativa es diu que és indefinida.

Exemple D.1 Matriu definida positiva

La matriu $\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & & \\ & 1 & \\ & & 1 \end{bmatrix}$ és definida positiva perquè la

seva part Hermítica: $\mathbf{A}^H = 1/2(\mathbf{A} + \mathbf{A}^H) = \begin{bmatrix} 1 & & \\ & 1 & \\ & & 1 \end{bmatrix}$

I és definida positiva (té els autovalors $+1, +1$). Efec- tivamente: $x^H \mathbf{A} x = x_1^2 + x_2^2 > 0, \forall x \neq 0$.

E. Forma quadràtica

S'anomena forma quadràtica de n variables complexes x associada a una matriu \mathbf{A} $n \times n$ de nombres complexos a la funció $q: \mathbb{C}^n \rightarrow \mathbb{C}$:

$$q(x) = x^H \mathbf{A} x \quad (\text{E.1})$$

on x^H és el vector (o matriu) conjugat transposat. Si $x_{ij} = n + ia, x_{ij}^H = n - ia$. És fàcil comprovar que:

$$q(x) = \sum_{1 \leq i \leq n} \sum_{1 \leq j \leq n} x_i a_{ij} x_j^H \quad (\text{E.2})$$

$$q(x) = x^H \mathbf{A} x = x^H \mathbf{A}^H x \quad (\text{E.3})$$

on \mathbf{A}^H és la part Hermítica de la matriu \mathbf{A} : $\mathbf{A}^H = 1/2(\mathbf{A} + \mathbf{A}^H)$. \mathbf{A}^H és una matriu Hermítica, per tant, una forma quadràtica sempre es pot associar a una ma- triu Hermítica (que serà una matriu simètrica si és de

nombres reals).

En \mathbb{R}^2 , l'equació:

$$q(x) = ax^2 + bxy + cy^2 \quad (\text{E.4})$$

es pot expressar en la forma quadràtica **E.1** on:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a & b/2 \\ b/2 & c \end{bmatrix} \quad (\text{E.5})$$

La superfície i les corbes de nivell de **(E.5)** (veure l'a- pèndix **G**) depenen dels autovalors de la matriu \mathbf{A} :

$$\lambda_{1,2} = \frac{(a+c) \pm \sqrt{(a+c)^2 - 4ac}}{2} = \frac{(a+c) \pm \sqrt{(a-c)^2 + b^2}}{2} \quad (\text{E.6})$$

En particular, les corbes de nivell son (veure la figu- ra **E.1**):

• El·lipses si $b^2 < 4ac$ ($\lambda_1, \lambda_2 > 0, \lambda_1 \neq \lambda_2$).

• Cercles si $a = c, b = 0$ ($\lambda_1, \lambda_2 > 0, \lambda_1 = \lambda_2$).

• Paràbols si $b^2 = 4ac$ ($\lambda_1 > 0, \lambda_2 = 0$).

• Hipèrbols si $b^2 > 4ac$ ($\lambda_1 > 0, \lambda_2 < 0$).

Notar que si els dos autovalors són positius, la matriu \mathbf{A} és definida positiva (veure l'apèndix **D**) i la forma quadràtica és convexa. Per tant té un mínim (veure la figura **E.1**).

F. Gradient

Definim el vector columna gradient d'una funció $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ com:

$$\Delta f(x) = \begin{bmatrix} \partial f(x)/\partial x_1 \\ \partial f(x)/\partial x_2 \\ \dots \\ \partial f(x)/\partial x_n \end{bmatrix} \quad (\text{F.1})$$

La derivada d'una funció $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ en la direcció del vector $v \in \mathbb{R}^n$ es defineix com:

$$\Delta_v f(x) = \lim_{\lambda \rightarrow 0} \frac{f(x + \lambda v) - f(x)}{\lambda} = \Delta f(x)^T v \quad (\text{F.2})$$

La interpretació intuïtiva de la derivada direccional és la

ràtio de variació de la funció f en un punt x en la direcció del vector v . Per tant, la direcció del gradient és la de màxima variació de la funció $f(x)$.

En el cas d'una funció vectorial $g: \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$:

$$g(x) = \begin{bmatrix} g_1(x) \\ g_2(x) \\ \dots \\ g_m(x) \end{bmatrix}$$

Definim el gradient com la matriu $n \times m$ on la columna j és el gradient de la funció $g_j(x)$:

$$\nabla g(x) = [\nabla g_1(x) \quad \nabla g_2(x) \quad \dots \quad \nabla g_m(x)] \quad (\text{F.3})$$

Exemple F.1 Gradient

Si $f(x) = a^T x = \sum x_i a_i$, aleshores:

$$\Delta f(x) = \nabla(x^T a) = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \dots \\ a_n \end{bmatrix} = a \quad (\text{F.4})$$

Si tenim la forma quadràtica $f(x) = x^T \mathbf{A} x = x^T \mathbf{A}^H x$, on $\mathbf{A}^H = 1/2(\mathbf{A} + \mathbf{A}^T)$ és una matriu si- mètrica (veure l'apèndix **D**). Tenim que: $x^T \mathbf{A}^H x =$

2.2. Funcions còncaves

Teorema 2.2 Epigràfic d'una funció convexa

Perquè una funció f definida sobre un conjunt convex Γ de \mathbb{R}^n sigui convexa, és necessari i suficient que el seu epigràfic (veure la figura **2.1**):

$$\text{epi } f = \{(x, y) \mid x \in \Gamma, y \geq f(x)\} \subset \mathbb{R}^{n+1} \quad (\text{2.4})$$

sigui un conjunt convex de \mathbb{R}^{n+1} . Notar que $\{x, y\} \mid x \in \Gamma, y = f(x)\}$ és el gràfic de la funció $f(x)$. L'epigràfic és el conjunt de punts que queda per sobre del gràfic.

Una funció f definida sobre un conjunt convex Γ és còncava si $-f$ és convexa. En aquest cas, l'hipogràfic, definit com $\{x, y\} \mid x \in \Gamma, y \leq f(x)\}$ és un conjunt convex.

Podem considerar, doncs, l'epigràfic com el nexed'u- nió entre els conjunts convexes i les funcions convexes: Γ , és convexa si i només si $(\Delta f(x))$ és el gradient, veure l'apèndix **F**, pàg. **24**):

Una funció f diferenciable en un conjunt obert convex Γ , és convexa si i només si $(\Delta f(x))$ és el gradient, veure l'apèndix **F**, pàg. **24**):

$$f(y) \geq f(x) + \Delta f(x)^T (y - x), \quad \forall y, x \in \Gamma \quad (\text{2.6})$$

Demostració. Sigui $z = \alpha x + (1 - \alpha)y, x, y \in \Gamma$. De **(2.6)** tenim:

$$f(x) \geq f(z) + \Delta f(z)^T (x - z)$$

$$f(y) \geq f(z) + \Delta f(z)^T (y - z)$$

D'on:

$$\alpha f(x) + (1 - \alpha)f(y) \geq \alpha f(z) + \Delta f(z)^T (\alpha x + (1 - \alpha)y - z) = f(z)$$

Que demostra que si es compleix **(2.6)**, aleshores f és convexa. Demostració en sentit contrari: Per convexi- tat tenim que per $0 \leq \alpha \leq 1$: $f(\alpha y + (1 - \alpha)x) \leq \alpha f(y) + (1 - \alpha)f(x)$. Per tant, per $0 < \alpha \leq 1$:

$$\frac{\alpha}{f(\alpha y + (1 - \alpha)x) - f(x)} \leq \frac{\alpha}{f(y) - f(x)}$$

Donc, agafant $\alpha \rightarrow 0$ tenim **(2.6)** (veure **(F.2)**, pàg. **24**), que demostra que si f és convexa es compleix **(2.6)**. \square

Notar que la definició de convexitat es pot interpretar dient que la interpolació lineal entre dos punts de la fun- ció sobreestima el valor de la funció, mentre que **(2.6)**

es pot interpretar dient que l'aproximació amb el pla tangent subestima el valor de la funció.

Teorema 2.4 Condició de convexitat de segon ordre

Una funció f dues vegades diferenciable en un conjunt obert convex Γ , és convexa si i només si:

$$\Delta^2 f(x) \geq 0, \quad \forall x \in \Gamma \quad (\text{2.7})$$

Es a dir, si el Hessià de f és semidefinit positiu en Γ . Geomètricament, equival a dir que f té una corbatura "cap amunt" en Γ .

2.4 Continuitat i derivabilitat de funcions convexes

• Una funció convexa f és contínua en tots els punts interiors a l'interval on està definida.

• Perquè una funció derivable en un interval I sigui convexa, és necessari i suficient que la derivada f' sigui creixent en I .

• Si una funció f definida i dues vegades derivable en un interval I és positiva o nul·la en I , aleshores f és convexa.

Teorema 2.3 Condició de convexitat de primer orde

2.2 Funcions còncaves

Sigui Γ un conjunt convex de \mathbb{R}^n i f una funció definida sobre Γ . Es diu que f és còncava si:

$$x_1, x_2 \in \Gamma \quad \left\{ \begin{array}{l} 0 \leq \lambda \leq 1 \\ \lambda f(x_1) + (1 - \lambda)f(x_2) \geq f(\lambda x_1 + (1 - \lambda)x_2) \end{array} \right. \quad (\text{2.5})$$

Si la desigualtat és $>$, es diu estrictament còncava. Si f és convexa, $-f$ és còncava.

2.3 Operacions que preserven la convexi- tat

• Tota combinació lineal amb coeficients positius de funcions convexes és convexa.

• Si f_1 i f_2 son convexes i f_2 és no decreixent, aleshores $f_1 \cdot f_2$ és convexa.

• El superior d'una família finita de funcions convexes és una funció convexa.

• Si f_i és una successió de funcions convexes que convergeixen a una funció limit f , aleshores f és convexa.

• Composició afi: Signi $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$; $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times m}$, $b \in \mathbb{R}^n$ i $g: \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}$, $g(x) = f(\mathbf{A}x + b)$, $\text{dom } g = \{x \mid \mathbf{A}x + b \in \text{dom } f\}$. Aleshores si f és convexa/còncava, g també ho és.

Demostració. Desenvolupant per Taylor (veure l'apèndix H):

$$f(\mathbf{y}) = f(\mathbf{x}) + \nabla f(\mathbf{x})^T (\mathbf{y} - \mathbf{x}) + \frac{1}{2} (\mathbf{y} - \mathbf{x})^T \nabla^2 f(\mathbf{x} + \alpha (\mathbf{y} - \mathbf{x})) (\mathbf{y} - \mathbf{x})$$

per algun $0 \leq \alpha \leq 1$. D'aquí tenim que si el Hessià és una matriu semidefinida positiva en Γ , aleshores es complirà que $f(\mathbf{y}) \geq f(\mathbf{x}) + \nabla f(\mathbf{x})^T (\mathbf{y} - \mathbf{x})$, i per el teorema 2.3 podem afirmar que f és convexa. Per altra banda, si el Hessià no és una matriu semidefinida positiva, aleshores aquesta desigualtat no es complirà, i per el teorema 2.3 podem afirmar que f no és convexa. \square

2.5 Exemples de funcions convexes en \mathbb{R}

Funcions lineals i afins son convexes i còncaves alhora.

Exponencial e^{ax} és convexa en \mathbb{R} per qualsevol $a \in \mathbb{R}$.

Potències x^a és convexa en \mathbb{R}_{++} per $a \leq 0$ o $a \geq 1$ i còncava per $0 < a < 1$.

Potències del valor absolut $|x|^p$ és convexa en \mathbb{R} per $p \geq 1$.

Logaritme $\log x$ és còncava en \mathbb{R}_{++} i $-\log x$ és convexa en \mathbb{R}_{++} .

Entropia negativa $x \log x$ és convexa en \mathbb{R}_{++} , o en \mathbb{R}_+ si imposem el valor 0 per $x = 0$.

2.6 Exemples de funcions convexes en \mathbb{R}^n

Normes totes les normes son convexes.

Màxim $f(\mathbf{x}) = \max\{x_1, \dots, x_n\}$ és convexa.

Raó entre una funció quadràtica i una lineal $f(x, y) = x^2/y$, **dom** $f = \mathbb{R} \times \mathbb{R}_{++}$ és convexa.

Logaritme de la suma d'exponencials

$f(\mathbf{x}) = \log\{e^{x_1} + \dots + e^{x_n}\}$ és convexa.

Mitjana geomètrica

$f(\mathbf{x}) = (\prod_{i=1}^n x_i)^{1/n}$, **dom** $f = \mathbb{R}_{++}^n$ és còncava.

¹Exemple agafat de [3].

Logaritme del determinant

$f(\mathbf{X}) = \log \det \mathbf{X}$, **dom** $f = \{\mathbf{X} \mid \mathbf{X} > 0\}$ és còncava.

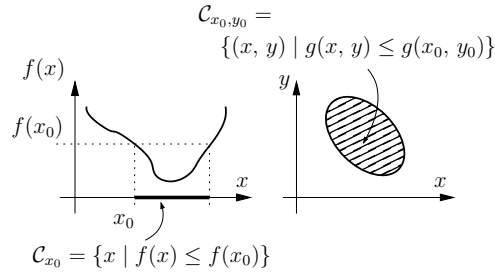


Figura 2.2: Exemple d'un conjunt de nivell C_{x_0} i C_{x_0, y_0} d'una funció quasiconvexa $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ i $g: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ respectivament.

2.7 Funcions quasiconvexes

Es diu subconjunt de nivell (*sublevel set*) C_{x_0} d'una funció $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ que passa per un punt x_0 al conjunt (veure la figura 2.2 i l'apèndix G):

$$C_{x_0} = \{x \mid f(x) \leq f(x_0)\} \quad (2.8)$$

Es diu que una funció f , **dom** $f = \mathcal{D}$ és quasiconvexa si \mathcal{D} i tots els seus subconjunts de nivell $C_{x_0}, x_0 \in \mathcal{D}$ son conjunts convexes. Una funció f es diu quasiconcava si $-f$ és quasiconvexa. En aquest cas, els seus "superconjunts de nivell", definits com $\{x \mid f(x) \geq f(x_0)\}$, són conjunts convexes. Evidentment, una funció convexa també és quasiconvexa.

Observacions

- La quasiconvexitat també es pot enunciar de la següent manera: Una funció f és quasiconvexa si i només si **dom** $f = \mathcal{D}$ és quasiconvex i:

$$f(\lambda x_1 + (1 - \lambda)x_2) \leq \max\{f(x_1), f(x_2)\} \quad (2.9)$$

Alguns autors anomenen (2.9) com desigualtat de Jensen per funcions quasiconvexes (comparar amb (2.3), pàg. 4).

Exemple 2.1 Funció quasiconvexa

La funció $f: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}, f(x, y) = xy$, **dom** $f = \mathbb{R}_+^2$ no és convexa ni còncava perquè el Hessià:

$$\nabla^2 f = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

és una matriu indefinida (donat que té els autovalors $+1, -1$, veure l'apèndix D). f però, és quasiconcava en \mathbb{R}_+^2 perquè els superconjunts de nivell:

$$\{(x, y) \mid xy \geq \alpha, \quad \alpha, x, y \in \mathbb{R}_+\}$$

```
(x-5) * (x-8) * exp(x/10.0) ;
}

x3 <- function(n) { # calcula x3
  x[1] + F[N-n]/F[N-n+2] * (x[2] - x[1]) ;
}

x4 <- function(n) { # calcula x4
  x[2] - F[N-n]/F[N-n+2] * (x[2] - x[1]) ;
}

F <- c(1, 1) ; # seq. de Fibonacci
for(n in 3:N) {
  F[n] <- F[n-1] + F[n-2] ;
}

x[c(3,4)] <- c(x3(2), x4(2)) ;
y <- f(x[1:4]) ;

for(n in 3:N) {
  if((y[4] < y[3]) && (y[4] < y[2])) {
    x[1] <- x[3] ; y[1] <- y[3] ;
    x[3] <- x3(n) ; y3 <- f(x[3]) ;
  } else {
    x[2] <- x[4] ; y[2] <- y[4] ;
    x[4] <- x4(n) ; y[4] <- f(x[4]) ;
  }
}

if(y[4] < y[3]) {
  x[3] <- x[4] ; y[3] <- y[4] ;
}

options(digits=10) ;
cat("x=", x[3], ", y=", y[3], "\n") ;

## busca el mínim de la funció f(x) en
## amb el mètode de Hook i Jeeves

b1 <- c(0.0, 0.0) ; # punt inicial
minf <- f(b1) ;
delta <- c(1.0, 1.0) ; # pas inicial
epsilon <- c(0.25, 0.25) ; # terminació

f <- function(x) { # funció objectiu
  3 * x[1] * x[1] - 2 * x[1] * x[2] +
  x[2] * x[2] + 4 * x[1] + 3 * x[2] ;
}

## Paràmetres d'entrada:
## minf (global): millor estimació,
## x (global): punt d'exploració.
## Sortida:
## Si es troba un punt millor
## s'actualitzen minf i b2 (globals)
## amb aquest punt i retorna TRUE.
exploracio <- function() {
  b2 <<- x ; # b2 és global.
  fexit = FALSE ;
  for(i in 1:length(x)) {
    b2[i] <<- x[i] + delta[i] ;
```

```
ftmp <- f(b2) ;
if(ftmp < minf) { # exit
  minf <<- ftmp ; fexit = TRUE ;
} else { # falla
  b2[i] <<- x[i] - delta[i] ;
  ftmp <- f(b2) ;
  if(ftmp < minf) { # exit
    minf <<- ftmp ; fexit = TRUE ;
  } else { # falla
    b2[i] <<- x[i] ;
  }
}
}
return(fexit) ;
}
```

```
while(all(delta >= epsilon)) {
  x <- b1 ;
  if(exploracio() == TRUE) {
    repeat {
      x <- 2.0 * b2 - b1 ;
      b1 <- b2 ;
      if(exploracio() == FALSE) {
        break ;
      }
    }
  } else {
    delta <- delta * 0.5 ;
  }
}
```

cat("x= ", b1, "f= ", minf, "\n") ;

D. Matrius definides positives

Una matriu $\mathbf{A} n \times n$ de números complexos és definida positiva si la part real de la forma quadràtica associada a \mathbf{A} (veure l'apèndix E) és sempre positiu. És a dir:

$$\Re[\mathbf{x}^H \mathbf{A} \mathbf{x}] > 0, \quad \forall \mathbf{x} \in \mathbb{C}^n, \mathbf{x} \neq 0 \quad (D.1)$$

on \Re és la part real i \mathbf{x}^H és el vector (o matriu) conjugat transposat: Si $x_{ij} = u + iv, x_{ji}^H = u - iv$.

Es diu que una matriu \mathbf{A} de números complexos és Hermítica si $\mathbf{A} = \mathbf{A}^H$. Notar que si tots els elements de \mathbf{A} son reals, aleshores $\mathbf{A}^H = \mathbf{A}^T$, i Hermítica és equivalent a simètrica: $\mathbf{A} = \mathbf{A}^T$.

Una condició necessària i suficient perquè una matriu \mathbf{A} sigui definida positiva és que la seva "part Hermítica": $\mathbf{A}_H = 1/2(\mathbf{A} + \mathbf{A}^H)$ sigui definida positiva. Notar que \mathbf{A}_H és una matriu Hermítica.

Una condició necessària i suficient perquè una matriu Hermítica sigui definida positiva és que tots els seus autovalors siguin > 0 . També és una condició necessària i suficient que tots els menors principals (menors superior-esquerra que es poden formar) tinguin determinant > 0 .

Indicarem que una matriu \mathbf{A} és definida positiva com $\mathbf{A} > 0$. Si la matriu compleix $\Re[\mathbf{x}^H \mathbf{A} \mathbf{x}] \geq 0$ es diu que és semidefinida positiva i ho indicarem com $\mathbf{A} \geq 0$.

Exemple 9.1 Programació dinàmica

Es fa un sondatge petrolier en tres regions A , B , C on hi poden treballar entre 1 i 3 equips de sondatge. La següent taula mostra les probabilitats de fracàs en trobar petroli en funció dels equips que treballen en cada regió. Es disposen de 5 equips de sondatge i es desitja calcular quants d'equips s'han de destinar a cada regió per minimitzar la probabilitat de fracàs.

Regió			
Nombre d'equips	A	B	C
1	0,50	0,70	0,75
2	0,30	0,40	0,30
3	0,15	0,20	0,10

Solució Definim com etapes r_k del problema les regions: $r_1 = A$, $r_2 = B$, $r_3 = C$. Definim l'estat x_k com el nombre d'equips que hi ha disponibles per a les etapes r_k, r_{k+1}, \dots, r_3 , i la funció objectiu:

$$f_k(x_k) = \min_{\mathcal{P}} \left\{ \text{fracàs en les etapes } r_k, r_{k+1}, \dots, r_3 \right\}$$

Com que la probabilitat de fracassar és el producte de fracassar en les tres etapes, podem formular l'equació recursiva:

$$f_k(x_k) = \min_{n \leq x_k} \{ \mathcal{P}^k \{n\} \times f_{k+1}(x_k - n) \}$$

on $\mathcal{P}^k \{n\}$ és la probabilitat de fracàs en l'etapa r_k si hi treballen n equips (és a dir, les probabilitats de la taula anterior). Tenim doncs:

• Per l'etapa $r_3 = C$:

$$\begin{aligned} f_3(1) &= \mathcal{P}_3 \{1\} = 0,75 \\ f_3(2) &= \mathcal{P}_3 \{2\} = 0,30 \\ f_3(3) &= \overline{\mathcal{P}_3 \{3\}} = 0,10 \end{aligned}$$

• Per l'etapa $r_2 = B$:

$$\begin{aligned} f_2(1) &= \mathcal{P}_2 \{1\} \\ f_2(2) &= \min \{ \mathcal{P}_2 \{1\} f_3(3) ; \mathcal{P}_2 \{2\} f_3(2) ; \mathcal{P}_2 \{3\} f_3(1) \} \\ f_2(3) &= \min \{ 0,21 ; 0,30 ; 0,30 \} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} f_2(4) &= \min \{ \overline{\mathcal{P}_2 \{1\}} f_3(3) ; \mathcal{P}_2 \{2\} f_3(2) ; \mathcal{P}_2 \{3\} f_3(1) \} \\ f_2(5) &= \min \{ \overline{\mathcal{P}_1 \{1\}} f_2(4) ; \mathcal{P}_1 \{2\} f_2(3) ; \mathcal{P}_1 \{3\} f_2(2) \} \\ &= \min \{ 0,035 ; 0,063 ; 0,07875 \} \end{aligned}$$

• Per l'etapa $r_1 = A$:

$$\begin{aligned} f_1(5) &= \min \{ \overline{\mathcal{P}_1 \{1\}} f_2(4) ; \mathcal{P}_1 \{2\} f_2(3) ; \mathcal{P}_1 \{3\} f_2(2) \} \\ &= 0,035 \end{aligned}$$

Apèndixs

On s'han subratllat les decisions òptimes. Es conclou doncs que la probabilitat de fallar és de 0,035, destinant l'equip en la regió A , l'equip en la regió B i 3 equips en la regió C .

• **A. Mètode de la secció àurea**

busca el mínim de la funció $f(x)$
en l'interval $[x1, x3, x4, x2]$
amb el mètode de la secció àurea.
x <- c(0, 10) ; # interval inicial
N <- 20 ; # nombre d'iteracions
f <- function(x) { # funció objectiu
(x-5) * (x-8) * exp(x/10.0) ;
a <- (sqrt(5.0) - 1.0) / 2.0 ;
al <- 1.0 / (a + 1.0) ;
x3 <- function () { # calcula x3
(a * x[1] + x[2]) * al ;
x4 <- function () { # calcula x4
(x[1] + a * x[2]) * al ;
}

x[c(3,4)] <- c(x3(), x4()) ;
for(n in 0:N) {
if(y[4] < y[1]) {
x[1] <- x[3] ; y[1] <- y[3] ;
x[3] <- x[3]() ; y[3] <- f(x[3]) ;
} else {
x[2] <- x[4] ; y[2] <- y[4] ;
x[4] <- x4() ; y[4] <- f(x[4]) ;
}

if(y[4] < y[3]) {
x[3] <- x[4] ; y[3] <- y[4] ;
}

options(digits=10) ;
cat("x=", x[3], ", y=", y[3], "\n") ;

B. Búsqueda de Fibonacci

busca el mínim de la funció $f(x)$
en l'interval $[x1], x[3], x[4], x[2]$
amb el mètode de fibonacci.

x <- c(0, 10) ; # interval inicial
N <- 20 ; # nombre d'iteracions
f <- function(x) { # funció objectiu

són conjunts convexes. Notar que en \mathbb{R}^2 f és quasiconvexa.¹

Exemple 2.2 Funció lineal fraccional

La funció:

$$f(x) = \frac{c^T x + b}{a^T x + d} \quad \text{dom } f = \{x \mid c^T x + d > 0\}$$

(2.10)

és quasiconvexa i quasiconcava (quan es compleixen aquestes dues condicions la funció es diu *quasilineal*), perquè els seus subconjunts de nivell: $\{x \mid a^T x + b \leq \alpha(c^T x + d), c^T x + d > 0\}$ són la intersecció d'un subespai obert i un subespai tancat, per tant, és un conjunt convex. Anàlogament es pot veure que els superconjunts de nivell també són conjunts convexes.¹

Teorema 2.5 Condició de quasiconvexitat de primer ordre

Si $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ és diferenciable i quasiconvexa en el ordre

conjunt convex $\text{dom } f = \mathcal{D}$, aleshores:

$$f(x) \leq f(x_0) \Rightarrow$$

$$\Delta f(x_0)^T (x - x_0) \leq 0, \forall x, x_0 \in \mathcal{D} \quad (2.11)$$

L'equació (2.11) té una interpretació geomètrica sense la qüestió $\Delta f(x_0) \neq 0$: Defineix l'hiperpla suport del subconjunt de nivell $\{x \mid f(x) \leq f(x_0)\}$ en el punt x_0 (veure la figura F.1, pàg. 25).

2.8 Funcions pseudoconvexes

Més endavant veurem que $\Delta f(x^*) = 0$ és una condició necessària i suficient perquè x^* sigui el mínim global d'una funció convexa. Això no és cert per una funció quasiconvexa. Per exemple, $f(x) = x^3$ és una funció flexió. Per evitar aquest problema es diu que una funció f definida en un domini obert \mathcal{D} és pseudoconvexa si és diferenciable en \mathcal{D} i compleix:

$$\Delta f(x_0)^T (x - x_0) \geq 0 \Rightarrow$$

$$f(x) \geq f(x_0) \forall x, x_0 \in \mathcal{D} \quad (2.12)$$

Per exemple, la funció $f(x) = x^3 + x$ és pseudoconvexa perquè $f'(x_0) = (2x_0^2 + 1)(x - x_0)$, que xa permet garantir la implicació (2.12). En canvi, la funció $f(x) = x^3$ no és pseudoconvexa perquè $x_0 = 0$ té-
màxim.

Si f és dues vegades diferenciable en un punt x^* d'un conjunt obert Γ i $f'(x^*) = 0$, aleshores x^* és un punt màxim local si $f''(x^*) > 0$ i és un mínim local si $f''(x^*) < 0$.

Teorema 3.2 Condicions suficients d'optimalitat

Si f és diferenciable en un conjunt obert Γ , aleshores perquè x^* sigui un valor extrem s'ha de complir que la derivada de f s'anul·li en x^* : $f'(x^*) = 0$.

Teorema 3.1 Condicions necessàries per un valor extrem

També hi pot haver punts extrems on la derivada de f no existeix (la derivada és discontinua). Els punts on la derivada de f s'anul·la o és discontinua s'anomenen punts crítics. Així doncs, un punt extrem de f és necessàriament un punt crític. El contrari no és cert.

Per buscar el mínim d'una funció a partir de la seva derivada, buscarem els punts crítics, i analitzarem la seva condició segons mostra la següent taula:

Signe de $f'(x)$		Tipus	
$x < x^*$	$x > x^*$	màxim	mínim
+	-	mínim	màxim
-	+	màxim	mínim

Taula 3.1: Tipus de punt crític x^* segons el signe de $f'(x)$ en l'entorn de x^* .

Teorema 3.2 Condicions suficients d'optimalitat

Si f és dues vegades diferenciable en un punt x^* d'un conjunt obert Γ i $f'(x^*) = 0$, aleshores x^* és un punt màxim local si $f''(x^*) > 0$ i és un mínim local si $f''(x^*) < 0$.

Demostració. (esb6s) Si $f''(x^*) > 0$ vol dir que $f'(x^*)$ és decreixent en x^* , i segons la taula 3.1 això és un punt

Notar que si $f'(x^*) = 0$ i $f''(x^*) = 0$ no podem determinar si el punt crític x^* és un punt extrem. En aquest cas, si la primera derivada no nul·la és d'ordre n ($f^{(i)}(x^*) = 0$, $i < n$, $f^{(n)}(x^*) \neq 0$), aleshores desenvolupant per Taylor en x^* tindrem:

$$f(x) = f(x^*) + \frac{(x - x^*)^n}{n!} f^{(n)}(\xi), \quad |\xi| \leq |x^* - x|$$

D'on:

$$f'(x) = \frac{(x - x^*)^{(n-1)}}{(n-1)!} f^{(n)}(\xi), \quad |\xi| \leq |x^* - x|$$

Tenint en compta la fórmula anterior i la taula 3.1, deduïm que: (i) Si n és parell: Si $f^{(n)}(x^*) < 0$, aleshores x^* és un punt màxim, si $f^{(n)}(x^*) > 0$, aleshores x^* és un punt mínim. (ii) Si n és senar en x^* no hi ha un punt extrem: $f(x^*)$ és decreixent si $f^{(n)}(x^*) < 0$ i creixent si $f^{(n)}(x^*) > 0$.

3.2 Mètode de la secció àurea

Golden section search, és un mètode iteratiu en el que l'única condició que imposem a f és que sigui unimodal en un punt mínim x^* (és a dir, f és monòtona decreixent per $x \leq x^*$ i monòtona creixent per $x \geq x^*$, per tant, hi ha un únic punt mínim en x^*). Suposem que avaluem la funció en 3 punts $x_1 < x_3 < x_2$, tals que $f(x_1) > f(x_3) < f(x_2)$. Per tant, $x^* \in [x_1, x_2]$ (figura 3.1). Per cada punt addicional on avaluem la funció podem reduir l'interval on es troba x^* . Per exemple, per un punt x_4 tal que: $x_3 < x_4 < x_2$, si $f(x_3) > f(x_4) < f(x_2)$ aleshores $x^* \in [x_3, x_2]$, altrament serà $f(x_1) > f(x_3) < f(x_4)$ i $x^* \in [x_1, x_4]$.

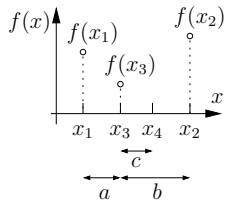


Figura 3.1: Mètode de la secció àurea.

El criteri de la secció àurea és que la proporció en que es reduirà l'interval en cada iteració sigui el mateix, és a dir:

$$\frac{a}{b} = \frac{c}{a} = \frac{c}{b-c}$$

Aïllant c en les igualtats anteriors tenim: $\frac{c/a}{b/a - c/a} = \frac{c/a}{b/a - c/a} = \frac{a/b}{b/a - c/a} = \frac{a}{b} \Rightarrow \left(\frac{a}{b}\right)^2 + \frac{a}{b} - 1 = 0$, d'on:

$$\alpha = \frac{a}{b} = \frac{-1 + \sqrt{5}}{2}$$

De les relacions: $\frac{x_2 - x_3}{x_3 - x_1} = \alpha$ i $\frac{x_4 - x_1}{x_2 - x_4} = \alpha$ tenim:

$$\begin{aligned} x_3 &= \frac{1}{1 + \alpha} (\alpha x_1 + x_2) \\ x_4 &= \frac{1}{1 + \alpha} (x_1 + \alpha x_2) \end{aligned} \quad (3.2)$$

En l'apèndix A hi ha una possible implemtació en R [1].

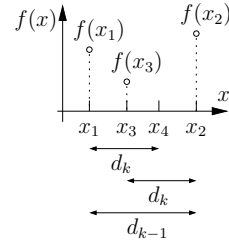


Figura 3.2: Búsqueda de Fibonacci.

3.3 Búsqueda de Fibonacci

De forma semblant al mètode anterior, en la iteració k es construeix un interval d_k que queda dintre de l'interval previ d_{k-1} , tal com mostra la figura 3.2. Es pot demostrar que l'estratègia que més redueix l'interval d'incertesa d'on es troba el mínim si en total es fan N iteracions és:

$$d_k = \frac{F_{N-k+1}}{F_N} d_1, \quad k = 2, \dots, N \quad (3.3)$$

on $d_1 = x_2 - x_1$ és l'interval inicial (notar que comptem l'interval inicial com la primera iteració) i F_i són els números de la seqüència de Fibonacci:

$$F_i = F_{i-1} + F_{i-2}, \quad i \geq 2, F_0 = F_1 = 1$$

De l'equació (3.3) tenim que l'interval on es troba el mínim en la iteració N serà: $d_N = F_1/F_N d_1 = d_1/F_N$. De manera que si desitgem determinar el mínim amb una incertesa inferior a δ , buscarem el primer terme de F_N de la seqüència de Fibonacci que compleix: $d_N \leq \delta < d_{N-1}$. És a dir:

$$F_N \geq \frac{d_1}{\delta} > F_{N-1} \quad (3.4)$$

Un cop determinat N , per calcular els punts en cada iteració, de (3.3) s'obté:

$$\begin{aligned} d_{k-1} - d_k &= \frac{F_{N-k+2} - F_{N-k+1}}{F_{N-k+2}} d_1 = \\ \frac{F_{N-k}}{F_N} d_1 &= \frac{F_{N-k}}{F_{N-k+2}} d_{k-1}, \quad k = 2, \dots, N \end{aligned} \quad (3.5)$$

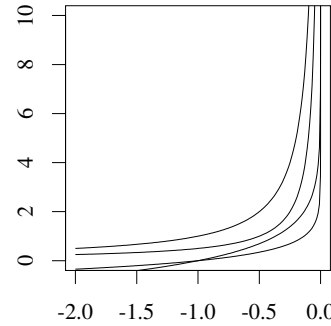


Figura 8.1: Aproximacions de la funció indicador $I_{x \leq 0}(x)$

Com que $I_{x \leq 0}(x)$ no és diferenciable, aproximarem $I_{x \leq 0}(x)$ per una funció $B(x)$ que ho sigui. Les dues funcions que més es fan servir en la pràctica són:

$$B(x) = \frac{-\rho}{x} \quad (8.4)$$

$$B(x) = -\rho \log(-x) \quad (8.5)$$

on $\rho > 0$ és un paràmetre que com més petit sigui, millor serà l'aproximació de $B(x)$ a $I_{x \leq 0}(x)$ (veure la figura (8.3)). El problema és que com més petit és ρ , més ràpidament variarà la inversa del Hessià de la funció a optimitzar, i més difícil serà la convergència del mètode de Newton. Per resoldre aquest problema el mètode de barrera consisteix en aplicar el mètode de Newton iterativament fent servir una funció $B_k(x) = \rho_k B(x)$, on $0 < \rho_{k+1} < \rho_k$ és una seqüència que aproxima progressivament $B_k(x)$ a $I_{x \leq 0}(x)$. En concret l'algorisme és el següent:

1. Triar un punt inicial \mathbf{x}_0 interior a la regió factible: $g_i(\mathbf{x}_0) \leq 0$.
2. Triar un valor inicial per ρ .
3. Fer servir el mètode de Newton amb el punt inicial \mathbf{x}_0 per resoldre el problema:

$$\min f(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^m \rho_k B(g_i(\mathbf{x})) \quad (8.6)$$

La solució \mathbf{x}_k obtinguda en cada iteració de (8.6) es fa servir com a punt inicial per a una pròxima iteració, conjuntament amb el pròxim valor de la seqüència ρ_k .

Observacions

- Els mètodes de barrera (o penalització) normalment s'inclouen dintre d'un conjunt més general anomenat "mètodes de punts interiors" (veure [3]).

- En el mètode SUMT (veure [5]) s'agafa $\rho_{k+1} = \rho_k/4$ i en el cas més senzill es comença amb $\rho_0 = 1$. Amb aquest mètode, si hi ha restriccions d'igualtat $h_i(\mathbf{x}) = 0$, s'agafa funció de penalització $\rho_k^{-1/2} h_i^2(\mathbf{x})$.

Capítol 9

Programació dinàmica determinista

9.1 Formulació

Considerarem un procés a temps discret que pren valors en els instants o etapes (*stages*) $k = 0, 1, \dots, N$ caracteritzat de la següent manera:

- L'estat del sistema x_k dona la informació rellevant del sistema en l'etapa k . Inicialment l'estat del sistema és x_0 .
- El nombre d'etapes N que considerarem s'anomena horitzó del procés.
- Per a cada etapa podem prendre un conjunt de decisions que determinen l'estat del sistema en la pròxima etapa.
- En cada etapa $k = 0, 1, \dots, N$ hi ha una funció de guany (o cost) $g_k(x_k)$.
- Hi ha una funció de objectiu $f_k(x_k)$ que es desitja optimitzar.
- Donat l'estat en l'etapa k , la decisió òptima per les pròximes etapes no ha de dependre dels estats assolits en les etapes anteriors. Aquesta condició s'anomena "principi d'optimalitat de Bellman".

Resolució del problema Hem de formular una equació recursiva que relaciona la funció objectiu en l'etapa k en funció dels valors assolits en $k+1$, $k+2, \dots, N$. Per exemple:

$$f_k(x_k) = \min_k \{\phi(g_k(x_k), f_{k+1}(x_{k+1}))\} \quad (9.1)$$

L'estratègia consisteix en escollir l'estat i les etapes de forma que sigui fàcil calcular $f_N(x_N)$. A continuació hem de formular l'equació recursiva (9.1) i buscar les decisions òptimes que permeten calcular $f_k(x_k)$, $k = N-1, N-2, \dots, 0$. És a dir, si l'índex k representa el temps, anirem "cap enrera" en el temps (*backward in time*). També és possible plantejar el problema "cap endavant" en el temps, però en general, és més difícil de formular.

$0, \dots, m_i, k = 1, \dots, M_i$ que han de complir les condicions de normalitat i ortogonalitat:

$$(7.21) \quad \sum_{k=1}^{M_0} \lambda_{0k} = 1$$

$$(7.22) \quad \sum_{k=1}^{M_i} \sum_{j=1}^{M_i} a_{kj} \lambda_{ik} = 0, \quad j = 1, \dots, n$$

Notar que el nombre de variables duales a determinar és igual al nombre total de monomis: $M = \sum_{i=0}^n M_i$.

Igual que en el cas sense restriccions, (7.21) i (7.22) formen un sistema de $n + 1$ equacions que tindran solució única si el gran de dificultat val zero: $M - (n + 1) = 0$.

La relació entre λ_{ik} i w_{ik} és:

$$(7.23) \quad w_{0k} = \lambda_{0k}, \quad k = 1, \dots, M_0$$

$$(7.24) \quad w_{ik} = \frac{\lambda_{ik}}{\sum_{k=1}^{M_i} \lambda_{ik}}, \quad i = 1, \dots, m$$

$$(7.25) \quad d(\lambda) = \prod_{k=1}^i \prod_{M_i} \binom{C_{ik}}{c_{ik}} w_{ik}^{\lambda_{ik}}$$

La funció dual és:

Un cop determinats λ_{ik} i w_{ik} , substituïm en (7.25) tindrem el valor òptim de la funció objectiu ($p^* = f(x^*)$), i substituïm en (7.19) i (7.20) obtindrem les equacions amb les que podem calcular el valor òptim de les variables d'optimització (x^*).

Exemple 7.2 PG amb restriccions

$$\begin{aligned} \min f(x) &= 40x_1x_2 + 20x_2x_3 \\ \text{s. a.} \quad & 1/\sqrt{2}x_1^{-1}x_2^{-1/2} + 3/5x_2^{-1}x_3^{-2/3} \leq 1 \\ & x_1 > 0, \quad i = 1, 2, 3 \end{aligned}$$

Com que tenim 4 posinomis, tindrem 4 variables duales λ_{ik} , $i = 0, 1, k = 1, \dots, M_i$. Per facilitar la resolució, a sota de cada monomi del problema s'ha posat la variable dual associada. El gran de dificultat és: $M - (n + 1) = 0$, per tant les condicions de normalitat i ortogonalitat ens donen la solució:

$$\begin{aligned} \lambda_{01} + \lambda_{02} &= 1 \\ x_1 &\rightarrow \lambda_{01} - \lambda_{11} = 0 \\ x_2 &\rightarrow \lambda_{01} + \lambda_{02} - 1/2\lambda_{11} - \lambda_{12} = 0 \\ x_3 &\rightarrow \lambda_{02} - 2/3\lambda_{12} = 0 \end{aligned}$$

d'on tenim la solució: $\lambda_{01} = 1/2$, $\lambda_{02} = 1/2$, $\lambda_{11} = 1/2$, $\lambda_{12} = 3/4$. Substituïm en (7.23) i (7.24):

$$(7.21) \quad \begin{aligned} w_{01} &= \lambda_{01} = 1/2 \\ w_{02} &= \lambda_{02} = 1/2 \\ w_{11} &= \frac{\lambda_{11} + \lambda_{12}}{\lambda_{11}} = 2/5 \\ w_{12} &= \frac{\lambda_{11} + \lambda_{12}}{\lambda_{12}} = 3/5 \end{aligned}$$

Substituïm en la funció dual (7.25) tenim:

$$\begin{aligned} \log d(\lambda) &= \frac{1}{2} \log \frac{1}{40} + \frac{1}{2} \log \frac{1}{20} + \frac{1}{2} \log \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \log \frac{2}{1/5} + \\ & \frac{3}{4} \log \frac{3/5}{1} + \frac{1}{2} \log 40^2 \rightarrow d(\lambda) = p^* = 40 \end{aligned}$$

Ara definim $u_i = \log x_i$, $x_i = e^{u_i}$. De (7.19) i (7.20)

$$(7.24) \quad \begin{aligned} \log_{10} p^* &= -\log 2 = u_1 + u_2 \\ \log_{10} p^* &= \log 2 = -u_1 - 1/2u_2 \end{aligned}$$

D'on tenim que: $u_1 = -\log 2$, $u_2 = 0$, $u_3 = 0$, per tant: $x_1 = 1/2$, $x_2 = 1$, $x_3 = 1$.

Capítol 8

Mètodes de barrera

8.1 Formulació

Considerarem el problema d'optimització que suposa

$$(8.1) \quad \begin{aligned} \min f(x) \\ \text{s. a.} \quad g_i(x) \leq 0, \quad i = 1, \dots, m \end{aligned}$$

L'objectiu és planificar un mètode iteratiu per resoldre el problema (8.1) amb el mètode de Newton explícit en la secció 4.4.2, pàg. 11. Per assolir aquest objectiu necessitem que el problema no tingui restriccions i sigui dues vegades diferenciable. Per eliminar les restriccions podem plantejar el problema equivalent:

$$(8.2) \quad \min f(x) + \sum_{i=1}^m I_{x \leq 0}(g_i(x))$$

$$(8.3) \quad I_{x \leq 0}(x) = \begin{cases} 0, & x \leq 0 \\ \infty, & x > 0 \end{cases}$$

on $I_{x \leq 0}(x)$ és la funció indicador (veure la figura (8.3)):

3.4. Mètode de Newton

d'on:

$$\begin{aligned} x_{k+1}^3 &= x_{(k-1)}^1 + (d_{k-1} - d_k) = x_{(k-1)}^1 + \frac{F_{N-k}^1}{F_{N-k}^1} d_{k-1} \\ x_{k+1}^4 &= x_{(k-1)}^2 - (d_{k-1} - d_k) = x_{(k-1)}^2 - \frac{F_{N-k}^2}{F_{N-k}^2} d_{k-1} \\ d_k &= x_{(k)}^2 - x_{(k)}^1, \quad k = 2, \dots, N \end{aligned}$$

En l'apèndix B hi ha una possible implementació en R [1].

3.4 Mètode de Newton

Suposem que f és diferenciable dues vegades. Aleshores podem aproximar f amb el polinomi de Taylor:

Derivant podem aproximar l'extrem de $f(x)$ per el de $q(x)$:

$$(3.6) \quad \begin{aligned} q(x) &= 0 \Leftrightarrow x = x_k - \frac{f'(x_k)}{f''(x_k)} \\ &= x_{k+1} - \frac{f''(x_k)}{f'''(x_k)} \end{aligned}$$

d'on arribem a la fórmula iterativa:

$$(3.7) \quad x_{k+1} = x_k - \frac{g(x_k)}{g'(x_k)}$$

on la funció on volem trobar el zero és: $g(x) = f'(x)$.

Optimització sense restriccions en \mathbb{R}^n

4.1 Condicions d'optimalitat

Problema: minimitzar una "funció objectiu" (anomenada da també "funció de cost") $f(x): \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ no subjecta a restriccions (*unconstrained*):

$$(4.1) \quad \min f(x)$$

Si f és diferenciable en un conjunt obert Γ , aleshores les següents condicions son necessàries perquè $x^* \in \Gamma$ sigui un mínim local:

$$(4.2) \quad \nabla f(x^*) = 0 \quad (\text{Condicció de primer ordre})$$

$$(4.3) \quad \nabla^2 f(x^*) \geq 0 \quad (\text{Condicció de segon ordre})$$

Demostració. La derivada direccional de $f(x^*)$ en el sentit del vector v és $v^T \nabla f(x^*)$. Si x^* és un mínim, aquesta derivada ha de ser ≥ 0 per qualsevol v . Per tant, haurà de ser $\nabla f(x) = 0$.

Desenvolupant per Taylor:

$$f(x^* + \alpha v) - f(x^*) =$$

$$\alpha v^T \nabla f(x^*) + \alpha^2/2 v^T \nabla^2 f(x^*) v + o(\alpha^2)$$

Si x^* és un mínim, i tenint en compte (4.2), haurà de ser:

$$\frac{f(x^* + \alpha v) - f(x^*)}{\alpha^2} = 1/2 v^T \nabla^2 f(x^*) v + o(\alpha^2) \geq 0$$

Agafant $\alpha \rightarrow 0$ resulta $v^T \nabla^2 f(x^*) v \geq 0$ per qualsevol v , és a dir, $\nabla^2 f(x^*)$ ha de ser semidefinida positiva. □

Teorema 4.2 **Condicions suficients d'optimalitat**

Si f és dues vegades diferenciable en un conjunt obert Γ , i $\nabla f(x^*) = 0$, aleshores x^* és un punt màxim local si $\nabla^2 f(x^*) < 0$ i és un mínim local si $\nabla^2 f(x^*) > 0$.

Teorema 4.3 **Condicions suficients per una funció convexa**

Si f és una funció convexa en un conjunt convex Γ , aleshores:

• Un mínim local de f en Γ també ho és global. A més, si f és estrictament convexa, el mínim és únic.

• $\nabla f(x^*) = 0$ és una condició necessària i suficient perquè $x^* \in \Gamma$ sigui un mínim global.

Exemple 4.1 **Minimització d'una funció convexa quadràtica**

El problema general de minimització d'una funció $f(x)$ convexa quadràtica és:

$$(4.4) \quad \min f(x) = 1/2 x^T A x - b^T x + c$$

on suposem $A \in S_n^{++}$, $b \in \mathbb{R}^n$, $c \in \mathbb{R}$. Aplicant el teorema 4.3 tenim que la solució x^* de (4.4) cant el teorema 4.3 tenim que la solució x^* de (4.4) és complet, l'exemple F.1, complex i veure l'exemple F.1, pàg. 24) s'obté que el mínim de (4.4) el podem calcular resolent el sistema d'equacions: $Ax^* - b = 0$, d'on:

$$x^* = A^{-1}b.$$

Un cas especial del problema de minimització quadràtica és el problema dels mínims quadrats: Desitgem trobar la funció lineal $f(x) = v^T x$ que millor s'aproxima al conjunt de mesures: $(f(x_i), x_i)$.

Si definim $A = \begin{bmatrix} x_1^T \\ \vdots \\ x_n^T \end{bmatrix}$, $b = \begin{bmatrix} f(x_1) \\ \vdots \\ f(x_n) \end{bmatrix}$, aleshores hem de resoldre el problema:

$$\min \|Av - b\|_2^2 =$$

$v^T A^T A v - 2(A^T b)^T v + b^T b$ (4.5) que té per solució el sistema d'equacions (anomenat "equacions normals del problema de mínims quadrats"): $A^T A v = A^T b$. ■

4.2 Mètodes de descens

Els mètodes que es descriuen en les pròximes seccions es basen en aplicar l'algorisme iteratiu:

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \Delta \mathbf{x}_k, \quad \alpha_k \in \mathbb{R}_+ \quad (4.6)$$

on $\Delta \mathbf{x}_k$ s'anomena "pas" o "direcció de búsqueda" (*search direction*) i ho calcularem segons els mètodes que veurem a continuació, i $\alpha_k \in \mathbb{R}_+$ s'anomena la "mida del pas" (*step size*). Notar que només serà $\alpha_k = 0$ si s'ha assolit el punt òptim: $\mathbf{x}_k = \mathbf{x}^*$. La idea del mètode és "descendir", en el sentit de que $f(\mathbf{x}_{k+1}) = f(\mathbf{x}_k + \alpha_k \Delta \mathbf{x}_k) < f(\mathbf{x}_k)$, en la direcció del vector $\Delta \mathbf{x}_k$.

Nota sobre la direcció $\Delta \mathbf{x}_k$: Desenvolupant f per Taylor en \mathbf{x}_k tenim:

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}_{k+1}) &= f(\mathbf{x}_k + \alpha_k \Delta \mathbf{x}_k) = \\ &= f(\mathbf{x}_k) + \nabla f(\mathbf{x}_k)^\top \alpha_k \Delta \mathbf{x}_k + o(\alpha_k) \end{aligned}$$

Per un valor suficientment petit de $\alpha_k > 0$, $o(\alpha_k)$ serà negligible i perquè $f(\mathbf{x}_{k+1}) < f(\mathbf{x}_k)$ haurà de ser:

$$\nabla f(\mathbf{x}_k)^\top \Delta \mathbf{x}_k < 0 \quad (4.7)$$

És a dir, per apropar-nos cap el mínim de f des de \mathbf{x}_k , hem d'agafar una direcció $\Delta \mathbf{x}_k$ que faci un angle major de 90° amb $\nabla f(\mathbf{x}_k)$ (veure la figura 4.1).

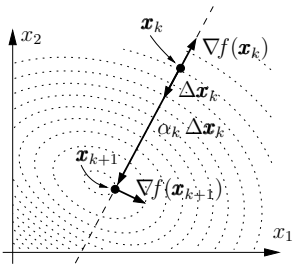


Figura 4.1: Mida del pas amb el mètode *exact line search*. La figura mostra les corbes de nivell d'una funció $f: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$. El punt de la línia $\Delta \mathbf{x}_k$ que més s'apropa al mínim de f és allà on $\Delta \mathbf{x}_k$ és ortogonal amb $\nabla f(\mathbf{x}_{k+1})$.

4.2.1 Càlcul de la mida del pas

Per a calcular la mida del pas (*line search*), α_k en (4.6) hi ha vàries tècniques. La tècnica anomenada *exact line search* consisteix en resoldre el problema:

$$\min_{\alpha_k} f(\mathbf{x}_k + \alpha_k \Delta \mathbf{x}_k) \quad (4.8)$$

És a dir, triada una direcció $\Delta \mathbf{x}_k$, calculem el valor del pas que més ens apropa al mínim de f . Notar que el problema (4.8) és un problema d'optimització sense restriccions en \mathbb{R} , per tant, el podem resoldre fent servir algun dels mètodes explicats en el capítol 3. En particular, si imposem $f'(\alpha_k) = 0$ i apliquem la regla de la cadena, tenint en compte (4.6), α_k vindrà donat per:

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\alpha_k} f(\mathbf{x}_{k+1}) &= \nabla f(\mathbf{x}_{k+1})^\top \frac{d}{d\alpha_k} \mathbf{x}_{k+1} = \\ \nabla f(\mathbf{x}_{k+1})^\top \Delta \mathbf{x}_k &= \nabla f(\mathbf{x}_k + \alpha_k \Delta \mathbf{x}_k)^\top \Delta \mathbf{x}_k = 0 \quad (4.9) \end{aligned}$$

És a dir, hem de triar α_k de forma que el gradient en \mathbf{x}_{k+1} sigui ortogonal amb $\Delta \mathbf{x}_k$. La figura 4.1 dóna una justificació visual d'aquesta condició.

4.3 Mètodes de búsqueda directa

Es caracteritzen per no utilitzar la derivada de la funció a minimitzar.

4.3.1 Mètode de Hooke i Jeeves

La idea és fer una búsqueda exploratòria en l'entorn de \mathbf{x}_k . Segons els resultats obtinguts es fa un desplaçament orientat o es redueix la mida del pas a la meitat i es continua l'exploració. Les direccions de búsqueda son vectors unitaris en les direccions dels eixos de coordenades. L'algorisme és el següent:

1. Inicialment es posa $\mathbf{b}_1 =$ punt inicial.
2. Es fa una búsqueda exploratòria en l'entorn del punt \mathbf{b}_1 : $\mathbf{b}_2 = \text{exploracio}(\mathbf{b}_1, f(\mathbf{b}_1))$, on el pseudocodi de la funció *exploracio* és:

```

exploracio ( $\mathbf{x}$ ,  $f_{\min}$ ) {
   $\mathbf{x}_{\text{test}} = \mathbf{x}$ 
  per (totes les components  $x[i]$  de  $\mathbf{x}$ ) {
     $x_{\text{test}}[i] = x[i] + \alpha[i]$  ;
    si ( $f(\mathbf{x}_{\text{test}}) < f_{\min}$ ) { % èxit
       $f_{\min} = f(\mathbf{x}_{\text{test}})$  ;
    } altrament { % falla
       $x_{\text{test}}[i] = x[i] - \alpha[i]$  ;
      si ( $f(\mathbf{x}_{\text{test}}) < f_{\min}$ ) { % èxit
         $f_{\min} = f(\mathbf{x}_{\text{test}})$  ;
      }
    }
  }
  retorna ( $\mathbf{x}_{\text{test}}$ ) ;
}

```

Si després de l'exploració hi ha hagut èxit ($f(\mathbf{b}_2) < f(\mathbf{b}_1)$) es passa al punt 3. Altrament es redueix el pas a la meitat ($\alpha = \alpha/2$). Si el pas és inferior a un valor prefixat ($\alpha < \epsilon$) l'algorisme acaba amb la solució \mathbf{b}_1 , altrament es passa al punt 2.

7.3. PG amb restriccions

Un cop calculades les variables duals w_k el problema està resolt i podem calcular $p^* = f(\mathbf{x}^*)$ de la següent manera: Tenint en compte que $\sum_k w_k = 1$:

$$\begin{aligned} p^* &= (p^*)^{\sum_k w_k} = \prod_{k=1}^M (p^*)^{w_k} = \prod_{k=1}^M \left(\frac{c_k p_k(\mathbf{x}^*)}{w_k} \right)^{w_k} = \\ &= \prod_{k=1}^M \left(\frac{c_k}{w_k} \right)^{w_k} \prod_{k=1}^M (p_k(\mathbf{x}^*))^{w_k} = \prod_{k=1}^M \left(\frac{c_k}{w_k} \right)^{w_k} \quad (7.11) \end{aligned}$$

donat que:

$$\begin{aligned} \prod_{k=1}^M (p_k(\mathbf{x}^*))^{w_k} &= \prod_{k=1}^M (x_1^{a_{k1}} \dots x_n^{a_{kn}})^{w_k} = \\ &= x_1^{\sum_k a_{k1} w_k} \dots x_n^{\sum_k a_{kn} w_k} = 1 \end{aligned}$$

Per calcular el valor òptim de les variables d'optimització \mathbf{x}^* podem fer servir (7.8):

$$c_k x_1^{a_{k1}} \dots x_n^{a_{kn}} = w_k p^*, \quad k = 1, \dots, M \quad (7.12)$$

L'equació (7.11) que permet calcular p^* dóna lloc a la definició de la funció dual $d(\mathbf{w}) : \mathbb{R}^M \rightarrow \mathbb{R}$,

$$d(\mathbf{w}) = \prod_{k=1}^M \left(\frac{c_k}{w_k} \right)^{w_k} \quad (7.13)$$

Es compleix què: $f(\mathbf{x}) \geq d(\mathbf{w})$. A més, si el problema de PG (7.3) té solució es compleix que:

$$p^* = f(\mathbf{x}^*) = \min_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) = \max_{\mathbf{w}} d(\mathbf{w}) = d(\mathbf{w}^*) \quad (7.14)$$

Per tant, el problema (7.3) també es pot resoldre amb el problema dual:

$$\begin{aligned} \max \quad & d(\mathbf{w}) = \prod_{k=1}^M \left(\frac{c_k}{w_k} \right)^{w_k} \\ \text{s. a} \quad & \sum_{k=1}^M a_{ki} w_k = 0, \quad i = 1, \dots, n \\ & \sum_{k=1}^M w_k = 1 \\ & w_k > 0 \end{aligned} \quad (7.15)$$

Exemple 7.1 PG sense restriccions

$$\begin{aligned} \min \quad & f(\mathbf{x}) = \underbrace{4x_1^4}_{w_1} + \underbrace{4x_1^{-2}x_2^2}_{w_2} + \underbrace{5x_2^{-4}x_3^2}_{w_3} + \underbrace{x_3^{-2}}_{w_4} \\ \text{s. a} \quad & x_i > 0, \quad i = 1, 2, 3 \end{aligned}$$

Com que tenim 4 posinomis, tindrem 4 variables duals w_i , $i = 1, \dots, 4$. Per facilitar la resolució, a sota de cada

monomi del problema s'ha posat la variable dual associada. El grau de dificultat és: $M - (n + 1) = 0$, per tant les condicions de normalitat i ortogonalitat ens donen la solució:

$$\begin{aligned} w_1 + w_2 + w_3 + w_4 &= 1 \\ x_1 &\rightarrow 4w_1 - 2w_2 = 0 \\ x_2 &\rightarrow 2w_2 - 4w_3 = 0 \\ x_3 &\rightarrow 2w_3 - 2w_4 = 0 \end{aligned}$$

d'on tenim la solució: $w_1 = 1/5$, $w_2 = 2/5$, $w_3 = 1/5$, $w_4 = 1/5$. Substituint en la funció dual tenim:

$$\log d(\mathbf{w}) = \sum_{k=1}^4 w_i \log(c_k/w_k) = 1,079 \Rightarrow p^* = 12,011$$

Ara definim $u_i = \log x_i$, $x_i = e^{u_i}$. De (7.12) tenim:

$$\log \left(\frac{w_k p^*}{c_k} \right) = \sum_{i=1}^n a_{ki} u_i, \quad k = 1, \dots, 3 \quad (7.16)$$

Substituint en (7.16) calculem: $u_1 = -0,055$, $u_2 = -0,015$, $u_3 = -0,19$, d'on: $x_1 = 0,88$, $x_2 = 0,96$, $x_3 = 0,645$. ■

7.3 PG amb restriccions

Es tracta de resoldre el problema posinomial:

$$\begin{aligned} \min \quad & f(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^{M_0} c_{0k} x_1^{a_{0k1}} \dots x_n^{a_{0kn}} \\ \text{s. a} \quad & g_i(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^{M_i} c_{ik} x_1^{a_{ik1}} \dots x_n^{a_{ikn}} \leq 1 \quad (7.17) \\ & i = 1, \dots, m \\ & \mathbf{x} > 0 \end{aligned}$$

Per simplificar la notació definim:

$$p_{ik}(\mathbf{x}) = x_1^{a_{ik1}} \dots x_n^{a_{ikn}}, \quad i = 0, \dots, m \quad (7.18)$$

de manera que podem escriure la funció objectiu i les restriccions com: $f(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^{M_0} c_{0k} p_{0k}(\mathbf{x})$, $g_i(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^{M_i} c_{ik} p_{ik}(\mathbf{x})$.

El problema es pot resoldre de forma semblant al cas sense restriccions. Ara definim les variables:

$$w_{0k} = \frac{c_{0k} p_{0k}(\mathbf{x}^*)}{f(\mathbf{x}^*)}, \quad k = 1, \dots, M_0 \quad (7.19)$$

$$\begin{aligned} w_{ik} &= c_{ik} p_{ik}(\mathbf{x}^*), \quad i = 1, \dots, m \\ & k = 1, \dots, M_i \end{aligned} \quad (7.20)$$

En funció d'aquestes variables i fent servir el Lagrangia (veure [5]), s'obtenen les variables duals λ_{ik} , $i =$

x_1	x_2	x_1	x_2	v_1	v_2	y_1	y_2	z_1	z_2	b	
-1	1	1	-1	0	0	1	4	0	0	5	
-2	-1	1	0	0	0	-1	2	1	0	2	
1	2	0	-1	0	0	2	2	0	0	1	3
1	2	0	0	1	0	0	0	0	0	0	6
-2	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	4

Per facilitar els càlculs comencem pivotant en v_1 :

x_1	x_2	x_1	x_2	v_1	v_2	y_1	y_2	z_1	z_2	b	
-1	1	2	0	-1	0	2	2	-1	0	3	
-2	-1	1	0	0	0	-1	2	1	0	2	
1	2	0	-1	0	0	2	2	0	0	1	3
1	2	0	0	1	0	0	0	0	0	0	6
-2	2	0	0	0	0	1	0	0	0	0	4

x_1 no pot entrar en la base perquè ja hi està v_1 , per tant pivotem en x_2 :

x_1	x_2	x_1	x_2	v_1	v_2	y_1	y_2	z_1	z_2	b
-2	0	0	0	1	0	0	-2	-1	-2	-3
-2	$\frac{2}{3}$	0	1	$\frac{2}{3}$	0	0	3	1	$\frac{5}{3}$	$\frac{2}{3}$
1	2	0	-1	1	0	2	2	0	1	3
-1	0	0	0	1	0	-2	-2	0	-1	3
-1	-3	0	0	1	0	1	-2	0	-1	-1

Com que v_2 no pot entrar en la base (perquè x_2 ja hi està), la solució és òptima: $x_1 = 0$, $x_2 = 3/2$, que substituint dona $f(\mathbf{x}) = -9/4$.

Capítol 7 Programació geomètrica (PG)

7.1 Introducció

Hi ha un important nombre d'aplicacions que donen lloc a problemes de tipus PG. Aquí només es fa una breu introducció i es presenten mètodes que permeten la solució en alguns casos senzills. En PG es defineixen un monomi $m^k(\mathbf{x}) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ com:

$$(7.1) \quad m^k(\mathbf{x}) = c^k x_1^{\alpha_{k1}} x_2^{\alpha_{k2}} \cdots x_n^{\alpha_{kn}} \quad a_{ki} \in \mathbb{R}$$

com:

$$(7.2) \quad f(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^M m^k(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^K c^k x_1^{\alpha_{k1}} x_2^{\alpha_{k2}} \cdots x_n^{\alpha_{kn}}$$

7.2 PG sense restriccions

Es tracta de resoldre el problema posinomial:

$$(7.3) \quad \min_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^K c^k x_1^{\alpha_{k1}} \cdots x_n^{\alpha_{kn}} \quad \text{s. a } \mathbf{x} > 0$$

Per simplificar la notació definim:

$$(7.4) \quad p^k(\mathbf{x}) = x_1^{\alpha_{k1}} \cdots x_n^{\alpha_{kn}}$$

de manera que escrivem la funció objectiu de (7.3) com:

$$(7.5) \quad f(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^K c^k x_1^{\alpha_{k1}} \cdots x_n^{\alpha_{kn}} = \sum_{k=1}^K c^k p^k(\mathbf{x})$$

El problema (7.3) no és convex, però si fem el canvi $x_i = e^{y_i}$, el problema equivalent següent, si que ho és:

$$(7.6) \quad \min_{\mathbf{y}} f(\mathbf{y}) = \log \sum_{k=1}^K c^k e^{y_1 \alpha_{k1}} \cdots e^{y_n \alpha_{kn}} = \log \sum_{k=1}^K c^k p^k(\mathbf{y})$$

Stigui \mathbf{x}_i^* = $e^{y_i^*}$ la solució òptima de (7.6). Com que (7.6) és convex, $\Delta^c f^c(\mathbf{y}^*) = 0$ és una condició necessària i suficient. Per tant:

$$\frac{\partial f^c(\mathbf{y}^*)}{\partial y_i} = 0 \Leftrightarrow$$

$$(7.7) \quad \frac{1}{\sum_{k=1}^K c^k a_{ki} p^k(\mathbf{x}_i^*)} = 0, \quad i = 1, \dots, n$$

Ara definim les "variables duals" w_k :

$$(7.8) \quad w_k = \frac{c^k p^k(\mathbf{x}_i^*)}{\sum_{k=1}^K c^k p^k(\mathbf{x}_i^*)}, \quad k = 1, \dots, M$$

De (7.7) tenim que:

$$(7.9) \quad \sum_{k=1}^K a_{ki} w_k = 0, \quad i = 1, \dots, n$$

$$(7.10) \quad \sum_{k=1}^M w_k = \frac{f(\mathbf{x}_i^*)}{\sum_{k=1}^M c^k p^k(\mathbf{x}_i^*)} = \frac{f(\mathbf{x}_i^*)}{f(\mathbf{x}_i^*)} = 1$$

Les equacions (7.9) i (7.10) s'anomenen respectiva-ment condicions de normalitat i ortogonalitat de les variables w_k . Notar que tenim M variables w_k (tantes com monomis té $f(\mathbf{x})$), mentre que tenim $n + 1$ equacions lineals per determinar-les. El número $M - (n + 1)$ es coneix com el grau de llibertat o dificultat del problema. Si $M - (n + 1) = 0$ les equacions anteriors permeten calcular els valors de w_k .

4.4. Mètodes diferenciais

3. Es fa un desplaçament orientat $\mathbf{p}_1 = 2\mathbf{b}_2 - \mathbf{b}_1$ i Per calcular el pas α_k aplicarem (4.9). Ara $\Delta \mathbf{x}_k = -\Delta^c f(\mathbf{x}_k) = \mathbf{r}_k$, per tant:

$$\Delta^c f(\mathbf{x}_{k+1})^T \Delta \mathbf{x}_k = 0 \Leftrightarrow$$

$$(\mathbf{A} \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{r}_k) - (\mathbf{b})^T \mathbf{r}_k = 0 \Leftrightarrow$$

$$(\mathbf{A} \mathbf{x}_k - \mathbf{b} + \alpha_k \mathbf{A} \mathbf{r}_k)^T \mathbf{r}_k = 0 \Leftrightarrow$$

$$(4.16) \quad \alpha_k = \frac{\mathbf{r}_k^T \mathbf{A} \mathbf{r}_k}{\mathbf{r}_k^T \mathbf{r}_k}$$

Una manera senzilla de que es compleixi (4.7) és agafar:

$$(4.10) \quad \Delta \mathbf{x}_k = -\mathbf{D}^k \Delta^c f(\mathbf{x}_k)$$

on \mathbf{D}^k és una matriu simètrica definida positiva, per tant: $-\Delta^c f(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{D}^k \Delta^c f(\mathbf{x}_k) > 0$. L'equació (4.6) seria doncs:

$$(4.11) \quad \mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \alpha_k \mathbf{D}^k \Delta^c f(\mathbf{x}_k), \quad \alpha_k \in \mathbb{R}_+$$

4.4.1 Mètode del màxim descens

(*steepest descent*) Consisteix en agafar $\mathbf{D}^k = \mathbf{I}$ en (4.11). En aquest cas, $\Delta \mathbf{x}_k = -\Delta^c f(\mathbf{x}_k)$, que és la direcció de màxim decreixement de f (veure l'apèndix F). L'equació iterativa (4.11) serà doncs:

$$(4.12) \quad \mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \alpha_k \Delta^c f(\mathbf{x}_k), \quad \alpha_k \in \mathbb{R}_+$$

Alguns cops aquest mètode pot ser poc eficient perquè les direccions $-\Delta^c f(\mathbf{x}_k)$ poden generar un "zig-zag" de convergència molt lenta cap a la solució.

Exemple 4.2 Mètode del màxim descens

En aquest exemple aplicarem el mètode del màxim descens per a la minimització d'una funció convexa quadràtica. El problema general de minimització d'una funció $f(\mathbf{x})$ convexa quadràtica és:

$$(4.13) \quad \min_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) = 1/2 \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} - \mathbf{b}^T \mathbf{x} + c$$

on suposem $\mathbf{A} \in \mathbb{S}_n^+$, $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$, $c \in \mathbb{R}$. De l'exemple 4.1 sabem que el mínim \mathbf{x}^* d'aquesta funció s'assoleix en:

$$(4.14) \quad \mathbf{A} \mathbf{x}^* = \mathbf{b}$$

Això motiva la definició del vector residual $\mathbf{r}_k = \mathbf{b} - \mathbf{A} \mathbf{x}_k$, que ens diu quan allunyats de la solució estem en la iteració \mathbf{x}_k . Tenim que: $\Delta^c f(\mathbf{x}) = \mathbf{A} \mathbf{x} - \mathbf{b}$. Per tant, $\Delta^c f(\mathbf{x}_k) = -\mathbf{r}_k$. Aplicant (4.12):

$$(4.15) \quad \mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \alpha_k \Delta^c f(\mathbf{x}_k) = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{r}_k$$

Resumint els resultats obtinguts, el mínim de l'equació quadràtica (4.13) el podem obtenir resolent el sistema de equacions (4.14), o aplicant el mètode iteratiu donat per les equacions (4.15) i (4.16). El mètode iteratiu es fa servir per a resoldre sistemes amb matrius \mathbf{A} disperses i de mida molt gran.

4.4.2 Mètode de Newton

Consisteix en agafar $\mathbf{D}^k = \Delta^2 f(\mathbf{x}_k)^{-1}$ (la matriu inversa del Hessià en \mathbf{x}_k) i $\alpha_k = 1$ en (4.11). L'equació iterativa (4.11) serà doncs:

$$(4.17) \quad \mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \Delta^2 f(\mathbf{x}_k)^{-1} \Delta^c f(\mathbf{x}_k)$$

Igual que en el cas unidimensional (veure la secció 3.4), l'entorn de \mathbf{x}_k per el polinomi de Taylor de segon ordre en \mathbf{x}_k : les direccions $-\Delta^c f(\mathbf{x}_k)$ poden generar un "zig-zag" de convergència molt lenta cap a la solució.

$$f(\mathbf{x}) \approx f(\mathbf{x}_k) + \Delta^c f(\mathbf{x}_k)^T (\mathbf{x} - \mathbf{x}_k) +$$

$$(4.18) \quad 1/2 (\mathbf{x} - \mathbf{x}_k)^T \Delta^2 f(\mathbf{x}_k) (\mathbf{x} - \mathbf{x}_k)$$

$\Delta^c f(\mathbf{x}^*) = 0$ és una condició suficient d'optimalitat per cens per a la minimització d'una funció convexa quadràtica. En aquest exemple aplicarem el mètode de Newton per a la minimització d'una funció convexa quadràtica. El problema general de minimització d'una funció $f(\mathbf{x})$ convexa quadràtica és:

$$(4.19) \quad \min_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) = 1/2 \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} - \mathbf{b}^T \mathbf{x} + c$$

on suposem $\mathbf{A} \in \mathbb{S}_n^+$, $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$, $c \in \mathbb{R}$. El gradient i el Hessià de (4.19) son: $\Delta^c f(\mathbf{x}) = \mathbf{A} \mathbf{x} - \mathbf{b}$, $\Delta^2 f(\mathbf{x}) = \mathbf{A}$

(veure l'exemple F.1, pàg. 24). Substituint en (4.17) tenim que:

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \nabla^2 f(\mathbf{x}_k)^{-1} \nabla f(\mathbf{x}_k) = \mathbf{x}_k - \mathbf{A}^{-1} (\mathbf{A} \mathbf{x}_k - \mathbf{b}) = \mathbf{A}^{-1} \mathbf{b}$$

i obtenim la solució en una sola iteració, que ja havíem deduït en l'exemple 4.1. ■

Capítol 5

Optimització amb restriccions

5.1 Plantejament del problema

Considerarem el problema d'optimització en la "forma estàndard":

$$\begin{aligned} \min \quad & f(\mathbf{x}) \\ \text{s. a} \quad & g_i(\mathbf{x}) \leq 0, \quad i = 1, \dots, m \\ & h_j(\mathbf{x}) = 0, \quad j = 1, \dots, p \end{aligned} \quad (5.1)$$

Per compactar la notació definim les "restriccions funcionals": $\mathbf{g} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$, $\mathbf{h} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^p$:

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} g_1(\mathbf{x}) \\ g_2(\mathbf{x}) \\ \dots \\ g_m(\mathbf{x}) \end{bmatrix}, \quad \mathbf{h}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} h_1(\mathbf{x}) \\ h_2(\mathbf{x}) \\ \dots \\ h_p(\mathbf{x}) \end{bmatrix} \quad (5.2)$$

de manera que podem reescriure (5.1) com:

$$\begin{aligned} \min \quad & f(\mathbf{x}) \\ \text{s. a} \quad & \mathbf{g}(\mathbf{x}) \leq 0 \\ & \mathbf{h}(\mathbf{x}) = 0 \end{aligned} \quad (5.3)$$

- $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$: Variable d'optimització.
- $f(\mathbf{x})$: "funció objectiu" o "funció de cost".
- $\mathbf{g}(\mathbf{x}) \leq 0$: Restriccions de desigualtat (*inequality constrains*).
- $\mathbf{h}(\mathbf{x}) = 0$: Restriccions d'igualtat (*equality constrains*).
- Regió factible \mathcal{D} :

$$\mathcal{D} = \text{dom } f \cap \text{dom } \mathbf{g} \cap \text{dom } \mathbf{h} = \text{dom } f \cap \bigcap_{i=1}^m \text{dom } g_i \cap \bigcap_{j=1}^p \text{dom } h_j \quad (5.4)$$

- La solució òptima p^* és:

$$p^* = \min \{f(\mathbf{x}) \mid \mathbf{g}(\mathbf{x}) \leq 0, \mathbf{h}(\mathbf{x}) = 0\} \quad (5.5)$$

- Si el problema no té solucions factibles posarem $p^* = \infty$.
- Si el problema no està acotat, aleshores $p^* = -\infty$.
- Un punt \mathbf{x}^* és òptim si $\mathbf{x}^* \in \mathcal{D}$ i $f(\mathbf{x}^*) = p^*$. El conjunt de tots els punts òptims l'anomenarem X_{opt} .
- Direm que \mathbf{x}_1 és un òptim local si és òptim en un entorn r : $\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_1\|_2 < r$.
- Direm que una restricció de desigualtat g_i és activa en un punt $\mathbf{x} \in \mathcal{D}$ si $g_i(\mathbf{x}) = 0$, i inactiva altrament. Notar que les restriccions d'igualtat $h_j(\mathbf{x})$ son sempre actives.

5.2 Problema d'optimització convexa

Un problema d'optimització convexa en la "forma estàndard" és:

$$\begin{aligned} \min \quad & f(\mathbf{x}) \\ \text{s. a} \quad & \mathbf{g}(\mathbf{x}) \leq 0 \\ & \mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{b} \end{aligned} \quad (5.6)$$

on la funció objectiu f i funcions de \mathbf{g} són funcions convexes. Si ho comparem amb el problema general (5.4) hi ha tres condicions addicionals: (i) La funció objectiu ha de ser convexa, (ii) les restriccions de desigualtat han de ser convexes, i (iii) les restriccions d'igualtat han de ser funcions afins.

5.3 Problemes equivalents

Direm que dos problemes son equivalents si la solució d'un d'ells es pot obtenir directament de la solució de l'altra.

Canvi de variables Si $\phi(\mathbf{x})$ és una bijecció en \mathcal{D} i definim $\hat{f}(\mathbf{x}) = f(\phi(\mathbf{x}))$, $\hat{g}_i(\mathbf{x}) = g_i(\phi(\mathbf{x}))$, $\hat{h}_j(\mathbf{x}) = h_j(\phi(\mathbf{x}))$, aleshores el problema:

$$\begin{aligned} \min \quad & \hat{f}(\mathbf{x}) \\ \text{s. a} \quad & \hat{g}_i(\mathbf{x}) \leq 0, \quad i = 1, \dots, m \\ & \hat{h}_j(\mathbf{x}) = 0, \quad j = 1, \dots, p \end{aligned} \quad (5.7)$$

és equivalent a (5.1) perquè si \mathbf{x}_1^* és un punt òptim de (5.7), aleshores $\mathbf{x}_2^* = \phi(\mathbf{x}_1^*)$ serà un punt òptim de (5.1).

següent condicions d'optimalitat:

$$\begin{aligned} -\mathbf{A} \mathbf{x} + \mathbf{v} - \mathbf{B}^T \mathbf{u} &= \mathbf{a} \\ \mathbf{B} \mathbf{x} + \mathbf{y} &= \mathbf{b} \\ \mathbf{u}^T \mathbf{y} &= 0 \\ \mathbf{v}^T \mathbf{x} &= 0 \\ \mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{u}, \mathbf{v} &\geq 0 \end{aligned} \quad (6.3)$$

Observacions

- El sistema (6.3) té en total $2n + 2m$ variables (els vectors \mathbf{x} i \mathbf{v} tenen n components i els vectors \mathbf{y} i \mathbf{u} tenen m components).
- Les condicions de folgança complementària de (6.3) impliquen que només hi haurà $n + m$ variables ≥ 0 : n dels vectors \mathbf{x} , \mathbf{v} i m dels vectors \mathbf{y} , \mathbf{u} .
- El sistema (6.3) és un polítop (intersecció d'un número finit de semiespais tancats i hiperplans), per tant, si té solució, és un dels seus punts extrems.
- Les dues primeres equacions de (6.3) es poden escriure en forma matricial com:

$$\begin{bmatrix} -\mathbf{A} & \mathbf{I} & \mathbf{0} & -\mathbf{B}^T \\ \mathbf{B} & \mathbf{0} & \mathbf{I} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{x} \\ \mathbf{v} \\ \mathbf{y} \\ \mathbf{u} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{a} \\ \mathbf{b} \end{bmatrix} \quad (6.4)$$

6.2 Mètode de Wolfe

Consisteix en resoldre el sistema (6.3) amb el mètode símplex de la següent manera:

- Triem una solució bàsica factible per les variables \mathbf{x} , \mathbf{y} . Per exemple, si $\mathbf{b} \geq 0$, podem agafar $\mathbf{x} = \mathbf{0}$, $\mathbf{y} = \mathbf{b}$.
- Afegim m variables artificials (z) a la primera equació de (6.3) per aconseguir una solució bàsica factible inicial per a tot el sistema.
- Apliquem el mètode símplex per minimitzar la suma de les variables artificials que hem afegit, tenint en compte les condicions de folgança complementària. Al final obtindrem $\mathbf{z} = \mathbf{0}$ i el valor obtingut per \mathbf{x} serà la solució òptima perquè satisfaran les condicions de KKT.

En forma matricial, el sistema que resoldrem amb el mètode de Wolfe és:

$$\begin{aligned} \min \quad & \sum_i z_i \\ \text{s. a} \quad & \begin{bmatrix} -\mathbf{A} & \mathbf{I} & \mathbf{0} & -\mathbf{B}^T & \mathbf{F} \\ \mathbf{B} & \mathbf{0} & \mathbf{I} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{x} \\ \mathbf{v} \\ \mathbf{y} \\ \mathbf{u} \\ \mathbf{z} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{a} \\ \mathbf{b} \end{bmatrix} \\ & \mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{z} \geq 0 \end{aligned} \quad (6.5)$$

on la matriu \mathbf{F} és una matriu arbitrària que fa que \mathbf{z} siguin variables bàsiques en la solució factible inicial.

Exemple 6.1 Mètode de Wolfe

$$\begin{aligned} \min \quad & f(\mathbf{x}) = x_1^2 + x_1 x_2 + x_2^2 + 2x_1 - 3x_2 \\ \text{s. a} \quad & x_1 + 2x_2 \leq 6 \\ & -2x_1 + 2x_2 \leq 4 \\ & x_1, x_2 \geq 0 \end{aligned}$$

Deduïm primer les matrius \mathbf{A} , \mathbf{a} , \mathbf{B} , \mathbf{b} (veure l'equació (6.1)). Donat que: $1/2 \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} = 1/2(a_{11} x_1^2 + 2a_{12} x_1 x_2 + a_{22} x_2^2)$, deduïm que:

$$1/2 \mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 1/2 \\ 1/2 & 1 \end{bmatrix} \Rightarrow \mathbf{A} = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{a} = \begin{bmatrix} 2 \\ -3 \end{bmatrix}$$

A més:

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ -2 & 2 \end{bmatrix}, \quad -\mathbf{B}^T = \begin{bmatrix} -1 & 2 \\ -2 & -2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 6 \\ 4 \end{bmatrix}$$

La taula símplex que correspon al sistema (6.5) és doncs:

x_1	x_2	v_1	v_2	y_1	y_2	u_1	u_2	z_1	z_2	b
0	0	0	0	0	0	0	0	-1	-1	0
-2	-1	1	0	0	0	-1	2	1	0	2
-1	-2	0	1	0	0	-2	-2	0	-1	-3
1	2	0	0	1	0	0	0	0	0	6
-2	2	0	0	0	1	0	0	0	0	4

On s'ha triat la matriu $\mathbf{F} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$ perquè z_1 i z_2 siguin variables bàsiques en la solució factible inicial (les variables bàsiques inicials son y_1, y_2, z_1, z_2). Abans de començar amb el mètode símplex fem que z_1, z_2 siguin variables bàsiques introduint 0 en la fila 0, i canviem el signe de la fila 2:

d'on tenim que:

$$\Delta^2 f(-\sqrt{10/3}, -2/3) = \begin{bmatrix} 6\sqrt{10/3} & 0 & 4 \\ 0 & -6\sqrt{10/3} & 0 \\ -4 & 0 & 0 \end{bmatrix} > 0$$

$$\Delta^2 f(\sqrt{10/3}, 0) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -4 \\ -6\sqrt{10/3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} > 0$$

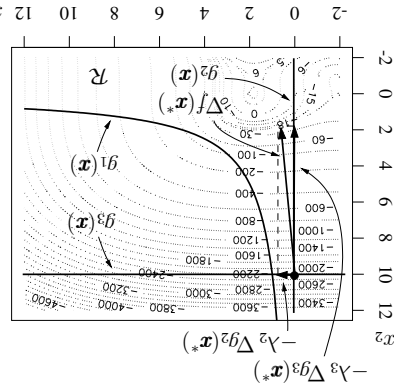


Figura 5.2: Corbes de nivell de la funció objectiu $f(x)$ i regió factible \mathcal{R} compresa entre les restriccions de desigualtat $g_1(x)$, $g_2(x)$ i $g_3(x)$ de l'exemple 5.20.

Per tant, $(-\sqrt{10/3}, -2/3)$ és un punt mínim local i $(\sqrt{10/3}, 0)$ és un punt màxim local (veure la figura 5.2). Podem comprovar també que $(-\sqrt{10/3}, -2/3)$ no és un mínim global perquè $\lim_{x \rightarrow -\infty} f = -\infty$. El punt $(\sqrt{10/3}, 0)$, en canvi, sí que és un màxim global. Deduïm doncs que l'òptim que busquem es troba en la frontera de la regió factible \mathcal{R} compresa entre les restriccions de desigualtat (veure la figura 5.2).

Per calcular el punt òptim hem d'aplicar les condicions de KKT. El Lagrangia és: $L = f + \lambda_1 g_1 + \lambda_2 g_2 + \lambda_3 g_3$, d'on resulten les condicions de KKT:

$$\frac{\partial L}{\partial x_1} = 0 \Rightarrow -3x_2^2 + 10 + \lambda_1 x_2 - \lambda_2 = 0$$

$$\frac{\partial L}{\partial x_2} = 0 \Rightarrow -6x_2 - 4x_2 + \lambda_1 x_1 + \lambda_3 = 0$$

$$\lambda_i g_i = 0 \Rightarrow -6x_2^2 - 4x_2 + \lambda_1 x_1 + \lambda_3 = 0$$

De la situació del mínim global deduïm que possiblement les restriccions g_2 i g_3 són actives en el punt òptim (veure la figura 5.2). Provem doncs:

$$\lambda_1 = 0$$

$$g_2 = 0 \Rightarrow x_1 = 0$$

$$g_3 = 0 \Rightarrow x_2 = 10$$

Substituint en les dues primeres condicions de KKT obtenim: $\lambda_2 = 10$, $\lambda_3 = 640$. Com que es complixen totes les condicions de KKT hi ha tanques restriccions actives com variables d'optimització, deduïm que el punt és la solució del problema. Per tant: $x^* = (0, 10)$, $f(x^*) = -2206$.

Capítol 6 Programació quadràtica (PQ)

6.1 Condicions de KKT per un problema de PQ

Considerarem el problema d'optimització de $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$:

$$\min f(x) = 1/2 x^T A_{n \times n} x + a_{n \times 1}^T x \quad \text{s.a.} \quad B_{m \times n} x \leq b_{m \times 1} \quad x \geq 0 \quad (6.1)$$

On suposarem que la matriu A és semidefinida positiva. Per tant, el problema (6.1) és convex i les condicions de KKT són condicions d'optimalitat necessàries i suficients.

Si escrivim el problema (6.1) en la forma estàndard tenim (veure l'equació (5.1), pàg. 12):

$$\min f(x) \quad \text{s.a.} \quad g_1(x) \leq 0$$

$$g_2(x) \leq 0 \quad (6.2)$$

On $f(x) = 1/2 x^T A x + a^T x$, $g_1(x) = B x - b$, $g_2(x) = -x$. El Lagrangia de (6.2) és doncs: $L(x, \mu, \nu) = f(x) + \mu^T g_1(x) + \nu^T g_2(x)$, on μ i ν són respectivament vectors de m i n multiplicadors de Lagrange.

Donat que:

$$\nabla f(x) = A x + a$$

$$\nabla(\mu^T g_1(x)) = B^T \mu$$

$$\nabla(\nu^T g_2(x)) = -\nu$$

tenim que $\nabla_x L(x, \mu, \nu) = A x + a + B^T \mu - \nu$. Per tant les condicions KKT (5.18) són:

$$A x + a + B^T \mu - \nu = 0$$

$$\mu^T g_1(x) = 0$$

$$\nu^T g_2(x) = 0$$

$$\mu, \nu \geq 0$$

Si atorgem les restriccions de (6.1) i definim les variables de folgança y perquè $g_1(x) + y = 0$, arribem a les

5.4 Lagrangia i dualitat

Definim el Lagrangia del problema (5.1) com la funció $L: \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^p \rightarrow \mathbb{R}$:

$$L(x, \lambda, \mu) = f(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i g_i(x) + \sum_{j=1}^p \mu_j h_j(x) = (5.8)$$

amb $\text{dom } L = \mathcal{D} \cap \mathbb{R}^m \cap \mathbb{R}^p$. Els coeficients dels vectors λ i μ s'anomenen respectivament variables duals o multiplicadors de Lagrange associats a les restriccions de desigualtat i restriccions d'igualtat.

$$L(x, \lambda, \mu) = \max_{\lambda \geq 0, \mu} \min_{x \in \mathcal{D}} L(x, \lambda, \mu) \quad (5.9)$$

Notar que:

$$\min_{x \in \mathcal{D}} L(x, \lambda, \mu) \leq L(x, \lambda, \mu) \leq \max_{\lambda \geq 0, \mu} L(x, \lambda, \mu) \quad (5.10)$$

d'on es pot deduir que si el punt de sella (x, λ, μ) existeix, aleshores és una solució del problema (5.1). Notar també que $x = x(\lambda, \mu)$. És a dir, el valor x que minimitza $\min_{x \in \mathcal{D}} L(x, \lambda, \mu)$ en general dependrà dels valors de λ, μ . Igualment, $(\lambda, \mu) = (\lambda(x), \mu(x))$.

5.4.1 Funció dual Lagrangiana

Definim la funció dual Lagrangiana (o simplement funció dual) del problema de minimització (5.3) a la funció $\phi: \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^p \rightarrow \mathbb{R}$ igual al mínim del Lagrangia en $x \in \mathcal{D}$:

$$\phi(\lambda, \mu) = \min_{x \in \mathcal{D}} L(x, \lambda, \mu) = L(x, \lambda, \mu) = \min_{x \in \mathcal{D}} \{f(x) + \lambda^T g(x) + \mu^T h(x)\} \quad (5.11)$$

i:

$$L(x, \lambda, \mu) = f(x) + \lambda^T g(x) + \mu^T h(x) \leq f(x)$$

$$\phi(\lambda, \mu) = \min_{x \in \mathcal{D}} L(x, \lambda, \mu) \leq L(x, \lambda, \mu) \leq f(x) \quad \square$$

d'on:

$$\lambda^T g(x) + \mu^T h(x) \leq 0$$

factible, aleshores: $\lambda \geq 0$. Per tant:

Demostració. Si x és un vector primal factible, aleshores $\phi(x) \leq 0$ i $h(x) \leq 0$. Si (λ, μ) és una tupla dual

$$\phi(\lambda, \mu) \leq f(x) \quad (5.13)$$

de λ, μ . Igualment, $(\lambda, \mu) = (\lambda(x), \mu(x))$. (Weak Duality Theorem) Sigui x un vector primal factible, i (λ, μ) una tupla dual factible, aleshores:

Teorema 5.2 Teorema de la dualitat

Notar que el problema (5.12) és un problema d'optimització convex, perquè $\phi(\lambda, \mu)$ és una funció còncava (veure el teorema 5.1) i les restriccions són un conjunt convex.

ma (5.12) s'anomena solució òptima dual. La solució (λ^*, μ^*) del problema (5.11) és la funció dual Lagrangiana (5.11). S'a-

$$\max \phi(\lambda, \mu) \quad \text{s.a.} \quad \lambda \geq 0 \quad (5.12)$$

blema d'optimització:

S'anomena Problema dual de Lagrange (Lagrange dual problem) del problema de minimització (5.3), que en aquest context s'anomena "problema primal", al problema d'optimització:

5.4.2 Problema dual de Lagrange

$$\min_{x \in \mathcal{D}} \{ (1 - \alpha) (f(x) + \lambda_2^T g(x) + \mu_2^T h(x)) \} = \alpha \phi(\lambda_1, \mu_1) + (1 - \alpha) \phi(\lambda_2, \mu_2) \quad \square$$

$$\min_{x \in \mathcal{D}} \{ \alpha (f(x) + \lambda_1^T g(x) + \mu_1^T h(x)) \} + (1 - \alpha) (f(x) + \lambda_2^T g(x) + \mu_2^T h(x)) \geq \min_{x \in \mathcal{D}} \{ \alpha (f(x) + \lambda_1^T g(x) + \mu_1^T h(x)) + (1 - \alpha) (\mu_2^T h(x)) \} =$$

Demostració.

$$\phi(\alpha \lambda_1 + (1 - \alpha) \lambda_2, \alpha \mu_1 + (1 - \alpha) \mu_2) = \min_{x \in \mathcal{D}} \{ \alpha (f(x) + \lambda_1^T g(x) + \mu_1^T h(x)) + (1 - \alpha) (\mu_2^T h(x)) \}$$

Corol·lari 5.1

$$\max_{\lambda \geq 0} \phi(\lambda, \mu) \leq \min_{x \in \mathcal{D}} f(x)$$

Teorema 5.3 Teorema fort de la dualitat

(*Strong Duality Theorem*) Si \mathbf{x}^* i $(\boldsymbol{\lambda}^*, \boldsymbol{\mu}^*)$ son respectivament solucions del problema primal (5.3), i dual (5.11), i:

$$\phi(\boldsymbol{\lambda}^*, \boldsymbol{\mu}^*) = f(\mathbf{x}^*) \quad (5.14)$$

aleshores es diu que es compleix la condició forta de la dualitat.

Si es compleix l'equació (5.14), aleshores basta resoldre el problema dual per resoldre el problema primal. L'equació (5.14) no sempre es compleix. A les condicions que permeten garantir que la condició forta de la dualitat es compleix s'anomenen "qualificació de les restriccions" (*constraint qualifications*).

Teorema 5.4 Qualificació de les restriccions de Slater

Un problema de programació convexa (veure la secció 5.2) compleix la condició forta de la dualitat (5.14) si existeix algun punt $\hat{\mathbf{x}} \in \text{int } \mathcal{D}$ on $\mathbf{g}(\hat{\mathbf{x}}) < \mathbf{0}$ ($\text{int } \mathcal{D}$ vol dir interior a \mathcal{D}). És a dir, es compleix:

$$g_i(\hat{\mathbf{x}}) < 0, \quad i = 1, \dots, m; \quad \mathbf{A}\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{b} \quad (5.15)$$

Teorema 5.5 Qualificació de les restriccions de Karlin

Un problema de programació convexa compleix la condició forta de la dualitat (5.14) si no existeix un vector $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^m$, $\mathbf{p} \geq \mathbf{0}$, $\mathbf{p} \neq \mathbf{0}$ tal que $\mathbf{p}^T \mathbf{g}(\mathbf{x}) \geq 0$, $\forall \mathbf{x} \in \mathcal{D}$.

Exemple 5.1 Qualificació de les restriccions de Slater

Considerem el següent problema:

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) = x^3 \\ \text{s. a.} \quad & g_1(x) = -x + 1 \leq 0 \end{aligned}$$

La regió factible és $\mathcal{D} = \text{dom } f \cap \text{dom } g_1 = \{x \mid x \geq 1\}$. La funció f és convexa en \mathcal{D} i existeix algun punt $\hat{x} \in \text{int } \mathcal{D}$ on $g_1(\hat{x}) < 0$ (p.e. $\hat{x} = 2$). Per tant, es compleix la qualificació de les restriccions de Slater. Podem comprovar que tampoc existeix un $p > 0$ tal que $p g_1(x) = p(1 - x) \geq 0$, $\forall x \geq 1$. Per tant, també es compleix la qualificació de les restriccions de Karlin.

El Lagrangiana del problema d'optimització és: $L(x, \lambda_1) = x^3 + \lambda_1(-x + 1)$. La funció dual Lagrangiana és doncs: $\phi(\lambda_1) = \min_{x \in \mathcal{D}} L(x, \lambda_1) = 1$, i el problema dual de Lagrange:

$$\begin{aligned} \max \quad & \phi(\lambda_1) = 1 \\ \text{s. a.} \quad & \lambda_1 \geq 0 \end{aligned}$$

que té per solució $d^* = \phi(\lambda_1^*) = 1$. La solució òptima del problema d'optimització és $p^* = 1$ que s'assoleix per $x^* = 1$. Per tant, es compleix la condició forta de la dualitat: $p^* = d^*$. ■

Teorema 5.6 Folgança complementaria

Si es compleix la condició forta de la dualitat (5.14), i les solucions primal i dual òptimes son respectivament \mathbf{x}^* i $\boldsymbol{\lambda}^*$, aleshores:

$$\boldsymbol{\lambda}^{*\top} \mathbf{g}(\mathbf{x}^*) = 0 \quad (5.16)$$

és a dir: $\lambda_i^* > 0 \Rightarrow g_i(\mathbf{x}^*) = 0$, $g_i(\mathbf{x}^*) > 0 \Rightarrow \lambda_i^* = 0$. El teorema també es pot anunciar així: si $A(\mathbf{x}^*)$ és el conjunt de desigualtats actives en \mathbf{x}^* : $A(\mathbf{x}^*) = \{i \mid g_i(\mathbf{x}^*) = 0\}$, aleshores $\lambda_i^* = 0$, $\forall i \notin A(\mathbf{x}^*)$.

Demostració.

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}^*) &= \phi(\boldsymbol{\lambda}^*, \boldsymbol{\mu}^*) \\ &= \min_{\mathbf{x} \in \mathcal{D}} \{f(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\lambda}^* \mathbf{g}(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\mu}^* \mathbf{h}(\mathbf{x})\} \\ &\leq f(\mathbf{x}^*) + \boldsymbol{\lambda}^{*\top} \mathbf{g}(\mathbf{x}^*) + \boldsymbol{\mu}^{*\top} \mathbf{h}(\mathbf{x}^*) \\ &\leq f(\mathbf{x}^*) \end{aligned}$$

on la primera igualtat es conseqüència de la condició forta de la dualitat, la segona és la definició de la funció dual, la tercera per la definició del mínim, i la quarta perquè $\boldsymbol{\lambda}^{*\top} \mathbf{g}(\mathbf{x}^*) \leq 0$ i $\boldsymbol{\mu}^{*\top} \mathbf{h}(\mathbf{x}^*) = 0$. Deduïm doncs que haurà de ser $\boldsymbol{\lambda}^{*\top} \mathbf{g}(\mathbf{x}^*) = 0$. □

5.5 Teorema de Karush-Kuhn-Tucker**Teorema 5.7 Karush-Kuhn-Tucker (KKT)**

Suposem el problema de minimització (5.3):

$$\begin{aligned} \min \quad & f(\mathbf{x}) \\ \text{s. a.} \quad & \mathbf{g}(\mathbf{x}) \leq \mathbf{0} \\ & \mathbf{h}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \end{aligned} \quad (5.17)$$

amb funció objectiu i restriccions diferenciables i Lagrangiana $L(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}) = f(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{g}(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\mu}^T \mathbf{h}(\mathbf{x})$. Perquè la tupla $(\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*, \boldsymbol{\mu}^*)$ compleixi la condició forta de la dualitat (5.14), s'ha de complir (a més de les restriccions de (5.17)):

$$\begin{aligned} \nabla_{\mathbf{x}} L(\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*, \boldsymbol{\mu}^*) &= \mathbf{0} \\ \boldsymbol{\lambda}^{*\top} \mathbf{g}(\mathbf{x}^*) &= 0 \\ \boldsymbol{\lambda}^* &\geq \mathbf{0} \end{aligned} \quad (5.18)$$

On s'ha fet servir la notació compacta (veure l'apèndix F per la definició del gradient):

$$\begin{aligned} \nabla_{\mathbf{x}} L(\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*, \boldsymbol{\mu}^*) &= \\ \nabla f(\mathbf{x}^*) + \nabla \mathbf{g}(\mathbf{x}^*) \boldsymbol{\lambda}^* + \nabla \mathbf{h}(\mathbf{x}^*) \boldsymbol{\mu}^* &= \\ \nabla f(\mathbf{x}^*) + \sum_{i=1}^m \lambda_i^* \nabla g_i(\mathbf{x}^*) + \sum_{j=1}^p \mu_j^* \nabla h_j(\mathbf{x}^*) &= \end{aligned} \quad (5.19)$$

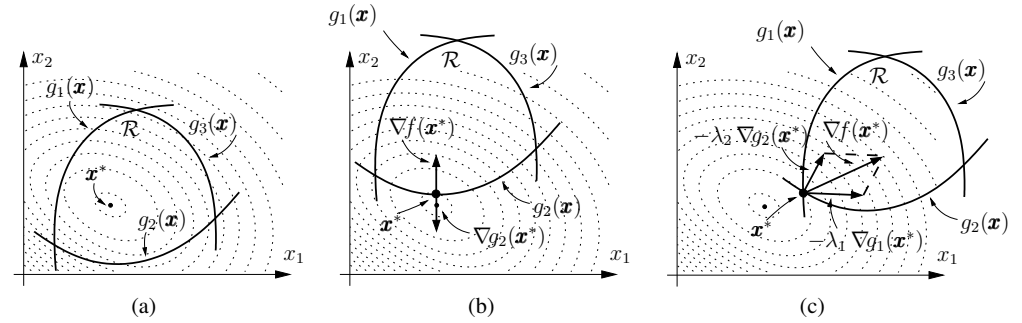


Figura 5.1: Interpretació geomètrica de les condicions de KKT. (a) No hi ha restriccions actives, (b) la restricció $g_2(\mathbf{x})$ és activa, (c) les restriccions $g_1(\mathbf{x})$ i $g_2(\mathbf{x})$ són actives.

Observacions

- Notar que les dues últimes condicions de (5.18) equivalen a dir que els multiplicadors de Lagrange de les restriccions de desigualtat són ≥ 0 per les restriccions de desigualtat actives, o zero per les restriccions de desigualtat no actives.
- El teorema 5.7 es pot trobar enunciat en la literatura d'altres maneres: (i) Els punts de sella del problema d'optimització (veure (5.9)) han de complir les condicions (5.18). (ii) Es diu que un punt factible \mathbf{x}^* és regular si en ell els gradients de les restriccions d'igualtat i de desigualtat actives son vectors linealment independents. Si \mathbf{x}^* és un punt regular i una solució del problema d'optimització (5.17), aleshores existeixen els multiplicadors de Lagrange únics $\boldsymbol{\lambda}^*$ i $\boldsymbol{\mu}^*$ tals que es compleixen les condicions (5.18).
- Si \mathbf{x}^* és un punt regular, les condicions de KKT son necessàries però no suficients perquè \mathbf{x}^* sigui la solució òptima.

- Les condicions de KKT son necessàries i suficients quan el nombre de restriccions actives és igual al número de variables d'optimització (n). També ho són si es compleix la qualificació de les restriccions de Slater (veure el teorema (5.4)).

- Si el problema d'optimització és convex, les condicions de KKT son necessàries i suficients.

5.5.1 Interpretació geomètrica de les condicions de KKT

Suposem un problema amb restriccions de desigualtat. La condició $\nabla_{\mathbf{x}} L(\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*) = \mathbf{0}$ la podem escriure en la

forma:

$$\begin{aligned} \nabla f(\mathbf{x}^*) &= \sum_{i \in A(\mathbf{x}^*)} \lambda_i^* (-\nabla g_i(\mathbf{x}^*)) \\ \lambda_i^* &\geq 0; \quad i \in A(\mathbf{x}^*) \end{aligned}$$

és a dir, $\nabla f(\mathbf{x}^*)$ és la combinació cònica dels vectors $-\nabla g_i(\mathbf{x}^*)$ de les restriccions actives.

La figura 5.1 mostra la interpretació geomètrica de les condicions de KKT en un problema de minimització d'una funció $f: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ amb tres restriccions $g_i(\mathbf{x}) \leq 0$, $i = 1, 2, 3$. La figura mostra les corbes de nivell de la funció f . La regió factible \mathcal{R} és la zona tancada per les tres restriccions. En el cas 5.1.(a) el mínim de f s'assoleix en un punt interior a \mathcal{R} (no hi ha restriccions actives). En 5.1.(b) hi ha una restricció activa ($g_2(\mathbf{x})$), i es compleix $\nabla f(\mathbf{x}^*) = -\nabla g_2(\mathbf{x}^*)$. En 5.1.(c) hi ha dues restriccions actives ($g_1(\mathbf{x})$ i $g_2(\mathbf{x})$), i es compleix $\nabla f(\mathbf{x}^*) = -\nabla g_1(\mathbf{x}^*) - \nabla g_2(\mathbf{x}^*)$.

Exemple 5.2 Condicions de KKT

Considerem el següent problema:

$$\begin{aligned} \min \quad & f(\mathbf{x}) = -x_1^3 - 2x_2^2 - 2x_2 + 10x_1 - 6 \\ \text{s. a.} \quad & g_1(\mathbf{x}) = x_1 x_2 - 10 \leq 0 \\ & g_2(\mathbf{x}) = -x_1 \leq 0 \\ & g_3(\mathbf{x}) = x_2 - 10 \leq 0 \end{aligned} \quad (5.20)$$

Si calculem els punts crítics on $\nabla f = \mathbf{0}$ tenim:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_1} = 0 &\Rightarrow -3x_1^2 + 10 = 0 \Rightarrow x_1 = \pm \sqrt{10/3} \\ \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_2} = 0 &\Rightarrow -6x_2^2 - 4x_2 = 0 \Rightarrow x_2 = \{0, -2/3\} \end{aligned}$$

Per determinar el tipus de punts obtinguts calculem el Hessià de f :

$$\nabla^2 f(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} -6x_1 & 0 \\ 0 & -4 - 12x_2 \end{bmatrix}$$