Apunts de programació matemàtica no lineal

Llorenç Cerdà-Alabern
llorenc@ac.upc.edu
Barcelona, juny de 2009.

Índex

Prefaci

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 rigorós ni complert, 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 minúscules en negreta ($\boldsymbol{x}$). Les matrius es representen amb majúscules en negreta ($\mathbf{A}$). $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}$ vol dir transposada, de manera que $\boldsymbol{x}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_2$ és el producte escalar dels vectors $\boldsymbol{x}_1\,\boldsymbol{x}_2$.

Capítol 1
Conjunts convexes

1.1 Elements

Recta

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

Segment

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

Conjunt afí Γ és afí si:

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

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

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

$$\boldsymbol{x} = \lambda_1\,\boldsymbol{x}_1 + \cdots \lambda_m\,\boldsymbol{x}_m$$

Conjunt convex Γ és convex si:

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

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

$$\boldsymbol{x} = \lambda_1\,\boldsymbol{x}_1 + \cdots \lambda_m\,\boldsymbol{x}_m$$

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

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

$$\operatorname{Conv}\Gamma = \{\lambda_1\,\boldsymbol{x}_1 + \cdots \lambda_m\,\boldsymbol{x}_m \mid \boldsymbol{x}_i, \in \Gamma\,; \quad \lambda_i \ge 0, \lambda_1 + \cdots \lambda_m = 1\}$$

Semiespai obert

$$\{\boldsymbol{x} \mid \mathbf{c}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} < \alpha; \mathbf{c}, \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n; \alpha \in \mathbb{R}\} \tag{1.5}$$

Es diu tancat si és $\le$.

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

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

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

$$\Lambda = \mathbf{b} + \Gamma = \{\boldsymbol{x} + \mathbf{b} \mid \boldsymbol{x} \in \Gamma\} \tag{1.7}$$

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:

$$\left.\begin{array}{l} \boldsymbol{x} \in \mathcal{C} \\ \lambda \ge 0 \end{array}\right\} \Rightarrow \lambda\,\boldsymbol{x} \in \mathcal{C} \tag{1.8}$$

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

$$\boldsymbol{x} = \lambda_1\,\boldsymbol{x}_1 + \cdots \lambda_m\,\boldsymbol{x}_m$$

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

$$\mathcal{C} = \{(\boldsymbol{x}, t) \mid \|x\| \le t\} \tag{1.9}$$

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:

$$\{\boldsymbol{x} \mid \mathbf{c}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} = \alpha;\ \mathbf{c}, \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n; \alpha \in \mathbb{R}\} \tag{1.10}$$

Si expressem l'equació (1.10) com:

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

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

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

$$\begin{aligned}\mathcal{P} = \{\boldsymbol{x} \mid \mathbf{a}_j^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} \le b_j,\, j = 1, \cdots n;\\ \mathbf{c}_j^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} = d_j, j = 1, \cdots p;\, \boldsymbol{x},\, \mathbf{a}_j,\, \mathbf{c}_j, \in \mathbb{R}^n\}\end{aligned}$$

Si el polítop és acotat s'anomena políedre. Ambdós son convexes. Per exemple, la figura 1.1 mostra el políedre:

$$\begin{aligned}x_1 + x_2 + x_3 = 1\\ x_1,\, x_2,\, x_3 \ge 0\end{aligned}$$

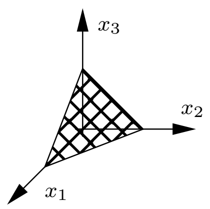


Figura 1.1: Políedre $x_1 + x_2 + x_3 = 1,\; x_i \ge 0$

Símplex Siguin $m + 1$ punts diferents: $\boldsymbol{x}_0, \cdots \boldsymbol{x}_m \in \mathbb{R}^n$. El conjunt Γ de totes les combinacions convexes d'aquests punts s'anomena símplex amb vèrtexs $\boldsymbol{x}_i$:

$$\Gamma = \{\boldsymbol{x} \mid \boldsymbol{x} = \sum_{i=0}^{m} \lambda_i\,\boldsymbol{x}_i;\; 0 \le \lambda_i \le 1;\; \sum_{i=0}^{m} \lambda_i = 1\}$$

Bolla Euclídea Una bolla Euclídea, o simplement bolla, de centre $\boldsymbol{x}_c$ i radi r en $\mathbb{R}^n$ és:

$$\begin{aligned}B(\boldsymbol{x}_c, r) = \{\boldsymbol{x} \mid \|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_c\|_2 \le r\} =\\ \{\boldsymbol{x} \mid (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_c)^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_c) \le r^2\} =\\ \{\boldsymbol{x}_c + r\,\boldsymbol{u} \mid \|\boldsymbol{u}\|_2 \le 1\}\end{aligned} \quad (1.11)$$

El·lipsoide Un el·lipsoide és:

$$\begin{aligned}E = \{\boldsymbol{x} \mid (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_c)^{\mathrm{T}}\,\mathbf{P}\,(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_c) \le 1\} =\\ \{\boldsymbol{x}_c + \mathbf{A}\,\boldsymbol{u} \mid \|\boldsymbol{u}\|_2 \le 1,\; \mathbf{A}^2 = \mathbf{P}\}\end{aligned} \quad (1.12)$$

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

1.2 Operacions amb conjunts convexes

Suma

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

Notar que:

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

Producte per un escalar

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

1.3 Teoremes sobre conjunts convexes

Teorema 1.1 Operacions amb conjunts convexes que preserven la convexitat
Les següents operacions amb els conjunts convexes Γ i Λ , donen lloc a un conjunt convex:

- Intersecció $\Gamma \cap \Lambda$.
- Suma $\Gamma + \Lambda$.
- Diferència $\Gamma - \Lambda$.
- Producte per un escalar $\lambda\,\Gamma$.
- Translació $\boldsymbol{x} + \Gamma$.
- Combinació lineal $\lambda\,\Gamma + \mu\,\Lambda$.
- Combinació afí. Donada la funció afí $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$, $f(\boldsymbol{x}) = \mathbf{A}\,\boldsymbol{x} + \mathbf{b}$, la imatge del conjunt convex Γ al aplicar f: $f(\Gamma) = \{f(\boldsymbol{x}) \mid \boldsymbol{x} \in \Gamma\}$.

Teorema 1.2 Separació de conjunts convexes
Un hiperplà $\{\boldsymbol{x} \mid \mathbf{c}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} = \alpha\}$ separa dos conjunts Γ, Λ si

$$\begin{aligned}\boldsymbol{x} \in \Gamma \Rightarrow \mathbf{c}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} \le \alpha\\ \boldsymbol{x} \in \Lambda \Rightarrow \mathbf{c}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} \ge \alpha\end{aligned}$$

És a dir:

$$\mathbf{c}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_1 \le \mathbf{c}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_2 \quad \forall\boldsymbol{x}_1 \in \Gamma,\; \boldsymbol{x}_2 \in \Lambda$$

Si les desigualtats son $<$, $>$, es diu que l'hiperplà separa estrictament els conjunts.

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

Teorema 1.3 Hiperplà suport
Donat un conjunt convex Γ, es diu hiperplà suport de Γ a l'hiperplà que té intersecció no buida amb Γ tal que Γ està contingut en un dels semiespais determinats per l'hiperplà. És a dir, si $\hat{\boldsymbol{x}}$ és un vector que no pertany a l'interior de Γ, aleshores existeix un vector $\mathbf{c} \ne 0$ tal que:

$$\mathbf{c}^{\mathrm{T}}\,\boldsymbol{x} \ge \mathbf{c}^{\mathrm{T}}\,\hat{\boldsymbol{x}} \quad \forall\boldsymbol{x} \in \Gamma$$

Si Γ és un conjunt convex compacte (tancat i acotat), aleshores qualsevol hiperplà 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
$\mathbf{A}\,\boldsymbol{x} = \mathbf{b}$ $\boldsymbol{x} \geq \mathbf{0}$	$\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \geq \mathbf{0}$ $\mathbf{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} < 0$	Farkas
$\mathbf{A}\,\boldsymbol{x} \leq \mathbf{b}$ $\boldsymbol{x} \geq \mathbf{0}$	$\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} \geq \mathbf{0}$ $\mathbf{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} < 0$ $\boldsymbol{y} \geq \mathbf{0}$	Gale
$\mathbf{A}\,\boldsymbol{x} < \mathbf{0}$	$\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} = \mathbf{0}$ $\boldsymbol{y} \geq \mathbf{0}$ $\boldsymbol{y} \neq \mathbf{0}$	Gordan
$\mathbf{A}_1\boldsymbol{x} < \mathbf{0}$ $\mathbf{A}_2\boldsymbol{x} \leq \mathbf{0}$	$\mathbf{A}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_1 + \mathbf{A}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_2 = \mathbf{0}$ $\boldsymbol{y}_1 \geq \mathbf{0}, \boldsymbol{y}_1 \neq \mathbf{0}$ $\boldsymbol{y}_2 \geq \mathbf{0}$	Motzkin

Taula 1.1: **Alguns teoremes d'alternatives.**

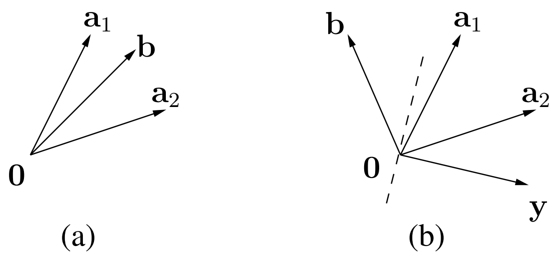


Figura 1.2: Interpretació geomètrica del teorema de Farkas.

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 $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ tal que $\mathbf{A}\,\boldsymbol{x} = \mathbf{b}$ i $\boldsymbol{x} \geq \mathbf{0}$.

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

Interpretació geomètrica: Siguin $\mathbf{a}_1, \cdots \mathbf{a}_n$ 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 $\boldsymbol{y}$ que fa menys de 90^o amb els vectors $\mathbf{a}_i$ i més de 90^o amb el vector $\mathbf{b}$. Per tant, existeix un hiperplà perpendicular al vector $\boldsymbol{y}$ 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:

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

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 $\boldsymbol{x}_1, \cdots \boldsymbol{x}_n \in \Gamma$ i $0 \leq \lambda_i \leq 1$, $\sum_i \lambda_i = 1$, $i = 1, \cdots n$, aleshores f és convexa si:

$$f(\lambda_1\,\boldsymbol{x}_1 + \cdots \lambda_n\,\boldsymbol{x}_2) \leq \lambda_1\, f(\boldsymbol{x}_1) + \cdots \lambda_n\, f(\boldsymbol{x}_n)$$

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

$$f\left(\int_{\mathcal{D}} p(\boldsymbol{x})\,\boldsymbol{x}\, d\boldsymbol{x}\right) \leq \int_{\mathcal{D}} p(\boldsymbol{x})\, f(\boldsymbol{x})\, d\boldsymbol{x} \tag{2.2}$$

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

$$f(\mathrm{E}\boldsymbol{x}) \leq \mathrm{E}f(\boldsymbol{x}) \tag{2.3}$$

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

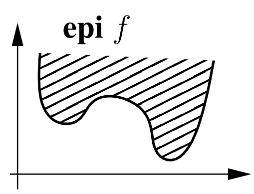


Figura 2.1: Epigràfic d'una funció.

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):

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

sigui un conjunt convex de $\mathbb{R}^{n+1}$. Notar que $\{(\boldsymbol{x}, y) \mid \boldsymbol{x} \in \Gamma, y = f(x)\}$ 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 es còncava si $-f$ és convexa. En aquest cas, l'hipogràfic, definit com $\{(\boldsymbol{x}, y) \mid \boldsymbol{x} \in \Gamma, y \leq f(x)\}$ és un conjunt convex.

Podem considerar, doncs, l'epigràfic com el nexe d'unió entre els conjunts convexes i les funcions convexes: Les funcions convexes son aquelles en les que el seu epigràfic és un conjunt convex. En l'apèndix G s'explica com calcular l'hiperplà suport de l'epigràfic d'una funció convexa.

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:

$$\left.\begin{array}{l} \boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2 \in \Gamma \\ 0 \leq \lambda \leq 1 \end{array}\right\} \Rightarrow \begin{array}{c} f(\lambda \boldsymbol{x}_1 + (1-\lambda)\boldsymbol{x}_2) \geq \\ \lambda f(\boldsymbol{x}_1) + (1-\lambda) f(\boldsymbol{x}_2) \end{array} \tag{2.5}$$

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

2.3 Operacions que preserven la convexitat

- 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 límit f, aleshores f és convexa.
- Composició afí: Sigui $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$; $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n\times m}$, $\mathrm{b} \in \mathbb{R}^n$ i $g : \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}$, $g(\boldsymbol{x}) = f(\mathbf{A}\,\boldsymbol{x} + \mathrm{b})$, $\textbf{dom } g = \{\boldsymbol{x} \mid \mathbf{A}\,\boldsymbol{x} + \mathrm{b} \in \textbf{dom } f\}$. Aleshores si f és convexa/còncava, g també ho és.

2.4 Continuïtat 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 ordre
Una funció f diferenciable en un conjunt obert convex Γ, és convexa si i només si ($\nabla f(\boldsymbol{x})$ és el gradient, veure l'apèndix F, pàg. 24):

$$f(\boldsymbol{y}) \geq f(\boldsymbol{x}) + \nabla f(\boldsymbol{x})^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{x}), \quad \forall \boldsymbol{y}, \boldsymbol{x} \in \Gamma \tag{2.6}$$

Demostració. Sigui $\mathbf{z} = \alpha\boldsymbol{x} + (1-\alpha)\boldsymbol{y}$; $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \Gamma$. De (2.6) tenim:

$$f(\boldsymbol{x}) \geq f(\mathbf{z}) + \nabla f(\mathbf{z})^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x} - \mathbf{z})$$
$$f(\boldsymbol{y}) \geq f(\mathbf{z}) + \nabla f(\mathbf{z})^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{y} - \mathbf{z})$$

D'on:

$$\alpha f(\boldsymbol{x}) + (1-\alpha) f(\boldsymbol{y}) \geq$$
$$f(\mathbf{z}) + \nabla f(\mathbf{z})^{\mathrm{T}}(\alpha\boldsymbol{x} + (1-\alpha)\boldsymbol{y} - \mathbf{z}) = f(\mathbf{z})$$

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

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

d'on, agafant $\alpha \to 0$ tenim (2.6) (veure (F.2), pàg. 24), que demostra que si f és convexa es compleix (2.6). □

Notar que la definició de convexitat es pot interpretar dient que la interpolació lineal entre dos punts de la funció 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:

$$\nabla^2 f(\boldsymbol{x}) \geq \mathbf{0}, \quad \forall \boldsymbol{x} \in \Gamma \tag{2.7}$$

És 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.

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

$$f(\boldsymbol{y}) = f(\boldsymbol{x}) + \nabla f(\boldsymbol{x})^{\mathrm{T}} (\boldsymbol{y} - \boldsymbol{x}) + \\ 1/2\,(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{x})^{\mathrm{T}} \nabla^2 f(\boldsymbol{x} + \alpha\,(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{x}))\,(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{x})$$

per algun $0 \le \alpha \le 1$. D'aquí tenim que si el Hessià és una matriu semidefinida positiva en Γ, aleshores es complirà que $f(\boldsymbol{y}) \ge f(\boldsymbol{x}) + \nabla f(\boldsymbol{x})^{\mathrm{T}} (\boldsymbol{y} - \boldsymbol{x})$, 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 podrem afirmar que f no és convexa. □

2.5 Exemples de funcions convexes en $\mathbb{R}$

Funcions lineals i afins son convexes i còncaves alhora.

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

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

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

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 $f(\boldsymbol{x}) = \max\{x_1, \cdots x_n\}$ 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 $f(\boldsymbol{x}) = \log\{\mathrm{e}^{x_1} + \cdots \mathrm{e}^{x_n}\}$ és convexa.

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

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

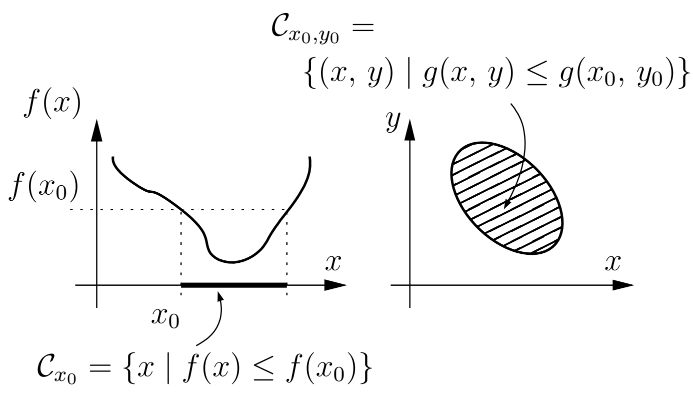


Figura 2.2: Exemple d'un conjunt de nivell $\mathcal{C}_{x_0}$ i $\mathcal{C}_{x_0,y_0}$ d'una funció quasiconvexa $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ i $g : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ respectivament.

2.7 Funcions quasiconvexes

Es diu subconjunt de nivell (*sublevel set*) $\mathcal{C}_{\boldsymbol{x}_0}$ d'una funció $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ que passa per un punt $\boldsymbol{x}_0$ al conjunt (veure la figura 2.2 i l'apèndix G):

$$\mathcal{C}_{\boldsymbol{x}_0} = \{\boldsymbol{x} \mid f(\boldsymbol{x}) \le f(\boldsymbol{x}_0)\} \tag{2.8}$$

Es diu que una funció f, **dom** $f = \mathcal{D}$ és quasiconvexa si $\mathcal{D}$ i tots els seus subconjunts de nivell $\mathcal{C}_{\boldsymbol{x}_0}, \boldsymbol{x}_0 \in \mathcal{D}$ son conjunts convexes. Una funció f es diu quasicòncava si $-f$ és quasiconvexa. En aquest cas, els seus "superconjunts de nivell", definits com $\{\boldsymbol{x} \mid f(\boldsymbol{x}) \ge f(\boldsymbol{x}_0)\}$, 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:

$$f(\lambda\,\boldsymbol{x}_1 + (1-\lambda)\,\boldsymbol{x}_2) \le \max\{f(\boldsymbol{x}_1),\ f(\boldsymbol{x}_2)\} \tag{2.9}$$

  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 $f : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$, $f(x, y) = x\,y$, **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 quasicòncava en $\mathbb{R}^2_+$ perquè els superconjuts de nivell:

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

[1] Exemple agafat de [3].

són conjunts convexos. Notar que en $\mathbb{R}^2_-$ f és quasiconvexa[1]. ■

Exemple 2.2 Funció lineal fraccional
La funció:

$$f(x) = \frac{\mathbf{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}+b}{\mathbf{c}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}+d}, \quad \mathbf{dom}\ f = \{\boldsymbol{x} \mid \mathbf{c}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}+d>0\} \tag{2.10}$$

és quasiconvexa i quasicòncava (quan es compleixen aquestes dues condicions la funció es diu quasilineal), perquè els seus subconjunts de nivell: $\{\boldsymbol{x} \mid \mathbf{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}+b \leq \alpha(\mathbf{c}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}+d),\ \mathbf{c}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}+d>0\}$ son 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 $f:\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ és diferenciable i quasiconvexa en el conjunt convex **dom** $f = \mathcal{D}$, aleshores:

$$f(\boldsymbol{x}) \leq f(\boldsymbol{x}_0) \Rightarrow \nabla f(\boldsymbol{x}_0)^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_0) \leq 0,\ \forall \boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}_0 \in \mathcal{D} \tag{2.11}$$

L'equació (2.11) té una interpretació geomètrica senzilla quan $\nabla f(\boldsymbol{x}_0) \neq 0$: Defineix l'hiperplà suport del subconjunt de nivell $\{\boldsymbol{x} \mid f(\boldsymbol{x}) \leq f(\boldsymbol{x}_0)\}$ en el punt $\boldsymbol{x}_0$ (veure la figura F.1, pàg. 25).

2.8 Funcions pseudoconvexes

Més endavant veurem que $\nabla f(\boldsymbol{x}^*) = 0$ és una condició necessària i suficient perquè $\boldsymbol{x}^*$ 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 quasiconvexa, però $f'(0)=0$, i $x_0=0$ és un punt d'inflexió. 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:

$$\nabla f(\boldsymbol{x}_0)^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_0) \geq 0 \ \Rightarrow f(\boldsymbol{x}) \geq f(\boldsymbol{x}_0)\ \forall \boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}_0 \in \mathcal{D} \tag{2.12}$$

Per exemple, la funció $f(x) = x^3 + x$ és pseudoconvexa perquè $f'(x_0)\,(x-x_0) = (2\,x_0^2+1)\,(x-x_0)$, que permet garantir la implicació (2.12). En canvi, la funció $f(x) = x^3$ no és pseudoconvexa perquè per $x_0 = 0$ tenim que $f'(0)\,(x-0) = 0$. Per tant, de $f'(0)\,(x-0) \geq 0$ no podem deduir que $f(x) \geq f(0)$.

Capítol 3
Optimització sense restriccions en $\mathbb{R}$

3.1 Condicions d'optimalitat

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

$$\min \quad f(\boldsymbol{x}) \tag{3.1}$$

Els màxims i mínims de f s'anomenen valors extrems.

Teorema 3.1 Condicions necessàries per un valor extrem
Si f és diferenciable en un conjunt obert Γ, aleshores perquè $x^* \in \Gamma$ sigui un valor extrem s'ha de complir que la derivada de f s'anul·li en x^*: $f'(x^*) = 0$.

Demostració. (esbós) Si x^* és un valor extrem, aleshores $f(x^*+\Delta x)/\Delta x$ ha de canviar de signe quan es passa de $\Delta x < 0$ a $\Delta x > 0$. □

També hi pot haver punts extrems on la derivada de f no existeix (la derivada és discontínua). Els punts on la derivada de f s'anul·la o és discontínua 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 $f'(x)$		
$x < x^*$	$x > x^*$	Tipus
$+$	$-$	màxim
$-$	$+$	mínim
$+$	$+$	f creix
$-$	$-$	f decreix

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. (esbós) Si $f''(x^*) < 0$ vol dir que $f'(x^*)$ és decreixent en x^*, i segons la taula 3.1 això és un punt màxim. □

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 podrem 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 $x^* \in [x_1, x_4]$.

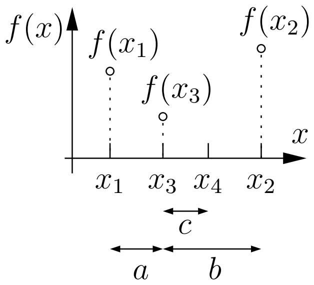


Figura 3.1: Mètode de la secció àurea.

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: $\frac{c/a}{b/a - c/a} = \frac{a/b}{b/a - a/b} = \frac{a}{b} \Rightarrow \left(\frac{a}{b}\right)^2 + \frac{a}{b} - 1 = 0$, 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:

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

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

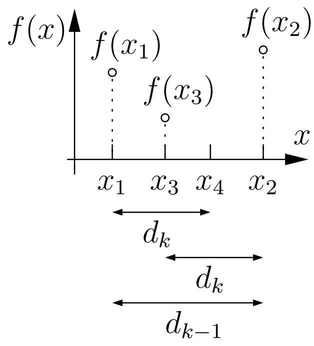


Figura 3.2: Búsqueda de Fibonacci.

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:

$$d_k = \frac{F_{N-k+1}}{F_N} d_1, \quad k = 2, \cdots N \tag{3.3}$$

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:

$$F_N \geq \frac{d_1}{\delta} > F_{N-1} \tag{3.4}$$

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

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

d'on:

$$x_3^{(k)} = x_1^{(k-1)} + (d_{k-1} - d_k) = x_1^{(k-1)} + \frac{F_{N-k}}{F_{N-k+2}}\, d_{k-1}$$
$$x_4^{(k)} = x_2^{(k-1)} - (d_{k-1} - d_k) = x_2^{(k-1)} - \frac{F_{N-k}}{F_{N-k+2}}\, d_{k-1}$$
$$d_k = x_2^{(k)} - x_1^{(k)}, \quad k = 2, \cdots N$$

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

3.4 Mètode de Newton

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

$$q(x) = f(x_k) + f'(x_k)\,(x - x_k) + 1/2\, f''(x_k)\,(x - x_k)^2$$

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

$$q'(x) = 0 \quad \Rightarrow \quad x = x_k - \frac{f'(x_k)}{f''(x_k)}$$

d'on arribem a la fórmula iterativa:

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f'(x_k)}{f''(x_k)} \tag{3.6}$$

Notar que també podem arribar a l'equació (3.6) a partir de la fórmula iterativa de Newton per trobar el zero d'una funció $g(x) = 0$:

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

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

Capítol 4
Optimització sense restriccions en $\mathbb{R}^n$

4.1 Condicions d'optimalitat

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

$$\min \quad f(\boldsymbol{x}) \tag{4.1}$$

Teorema 4.1 Condicions necessàries d'optimalitat
Si f és diferenciable en un conjunt obert Γ, aleshores les següents condicions son necessàries perquè $\boldsymbol{x}^* \in \Gamma$ sigui un mínim local:

$$\nabla f(\boldsymbol{x}^*) = \mathbf{0} \quad \text{(Condició de primer ordre)} \tag{4.2}$$
$$\nabla^2 f(\boldsymbol{x}^*) \geq \mathbf{0} \quad \text{(Condició de segon ordre)} \tag{4.3}$$

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

Desenvolupant per Taylor:

$$f(\boldsymbol{x}^* + \alpha \mathbf{v}) - f(\boldsymbol{x}^*) = \alpha\, \mathbf{v}^{\mathrm{T}} \nabla f(\boldsymbol{x}^*) + \alpha^2/2\, \mathbf{v}^{\mathrm{T}} \nabla^2 f(\boldsymbol{x}^*) \mathbf{v} + o(\alpha^2)$$

Si $\boldsymbol{x}^*$ és un mínim, i tenint en compte (4.2), haurà de ser:

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

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

Teorema 4.2 Condicions suficients d'optimalitat
Si f és dues vegades diferenciable en un conjunt obert Γ, i $\nabla f(\boldsymbol{x}^*) = \mathbf{0}$, aleshores $\boldsymbol{x}^*$ és un punt màxim local si $\nabla^2 f(\boldsymbol{x}^*) < \mathbf{0}$ i és un mínim local si $\nabla^2 f(\boldsymbol{x}^*) > \mathbf{0}$.

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

Exemple 4.1 Minimització d'una funció convexa quadràtica
El problema general de minimització d'una funció $f(\boldsymbol{x})$ convexa quadràtica és:

$$\min \quad f(\boldsymbol{x}) = 1/2\, \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\, \mathbf{A}\, \boldsymbol{x} - \mathbf{b}^{\mathrm{T}}\, \boldsymbol{x} + c \tag{4.4}$$

on suposarem $\mathbf{A} \in \mathbf{S}^n_{++}$, $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$, $c \in \mathbb{R}$. Aplicant el teorema 4.3 tenim que la solució $\boldsymbol{x}^*$ de (4.4) compleix $\nabla f(\boldsymbol{x}^*) = \mathbf{0}$. Operant (veure l'exemple F.1, pàg. 24) s'obté que el mínim de (4.4) el podem calcular resolent el sistema d'equacions: $\mathbf{A}\, \boldsymbol{x}^* - \mathbf{b} = \mathbf{0}$, d'on: $\boldsymbol{x}^* = \mathbf{A}^{-1}\, \mathbf{b}$.

Un cas especial del problema de minimització quadràtica és el problema dels mínims quadrats: Desitgem trobar la funció lineal $f(x) = \mathbf{v}^{\mathrm{T}}\, \boldsymbol{x}$ que millor s'aproxima amb error quadràtic al conjunt de mesures: $(f(\boldsymbol{x}_i), \boldsymbol{x}_i)$. Si definim $\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_1^{\mathrm{T}} \\ \cdots \end{bmatrix}$, $\mathbf{b} = \begin{bmatrix} f(\boldsymbol{x}_1) \\ \cdots \end{bmatrix}$, aleshores hem de resoldre el problema:

$$\min \|\mathbf{A}\, \mathbf{v} - \mathbf{b}\|_2^2 = \mathbf{v}^{\mathrm{T}}\, \mathbf{A}^{\mathrm{T}}\, \mathbf{A}\, \mathbf{v} - 2\,(\mathbf{A}^{\mathrm{T}} \mathbf{b})^{\mathrm{T}}\, \mathbf{v} + \mathbf{b}^{\mathrm{T}}\, \mathbf{b} \tag{4.5}$$

que té per solució el sistema d'equacions (anomenat "equacions normals del problema de mínims quadrats"): $\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\, \mathbf{A}\, \mathbf{v} = \mathbf{A}^{\mathrm{T}}\, \mathbf{b}$. ■

4.2 Mètodes de descens

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

$$\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{x}_k + \alpha_k\, \Delta\boldsymbol{x}_k, \quad \alpha_k \in \mathbb{R}_+ \tag{4.6}$$

on $\Delta\boldsymbol{x}_k$ 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: $\boldsymbol{x}_k = \boldsymbol{x}^*$. La idea del mètode és "descendir", en el sentit de que $f(\boldsymbol{x}_{k+1}) = f(\boldsymbol{x}_k + \alpha_k\, \Delta\boldsymbol{x}_k) < f(\boldsymbol{x}_k)$, en la direcció del vector $\Delta\boldsymbol{x}_k$.

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

$$f(\boldsymbol{x}_{k+1}) = f(\boldsymbol{x}_k + \alpha_k\, \Delta\boldsymbol{x}_k) = f(\boldsymbol{x}_k) + \nabla f(\boldsymbol{x}_k)^{\mathrm{T}}\, \alpha_k\, \Delta\boldsymbol{x}_k + o(\alpha_k)$$

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

$$\nabla f(\boldsymbol{x}_k)^{\mathrm{T}}\, \Delta\boldsymbol{x}_k < 0 \tag{4.7}$$

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

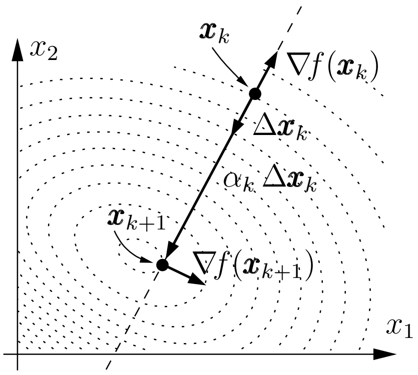


Figura 4.1: Mida del pas amb el mètode *exact line search*. La figura mostra les corbes de nivell d'una funció $f : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$. El punt de la línia $\Delta\boldsymbol{x}_k$ que més s'apropa al mínim de f és allà on $\Delta\boldsymbol{x}_k$ és ortogonal amb $\nabla f(\boldsymbol{x}_{k+1})$.

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:

$$\min_{\alpha_k} \quad f(\boldsymbol{x}_k + \alpha_k\, \Delta\boldsymbol{x}_k) \tag{4.8}$$

És a dir, triada una direcció $\Delta\boldsymbol{x}_k$, 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 $\mathbb{R}$ i, 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:

$$\frac{d}{d\alpha_k} f(\boldsymbol{x}_{k+1}) = \nabla f(\boldsymbol{x}_{k+1})^{\mathrm{T}}\, \frac{d}{d\alpha_k}\boldsymbol{x}_{k+1} = \nabla f(\boldsymbol{x}_{k+1})^{\mathrm{T}}\, \Delta\boldsymbol{x}_k = \nabla f(\boldsymbol{x}_k + \alpha_k\, \Delta\boldsymbol{x}_k)^{\mathrm{T}}\, \Delta\boldsymbol{x}_k = 0 \tag{4.9}$$

És a dir, hem de triar α_k de forma que el gradient en $\boldsymbol{x}_{k+1}$ sigui ortogonal amb $\Delta\boldsymbol{x}_k$. 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 $\boldsymbol{x}_k$. 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 són vectors unitaris en les direccions dels eixos de coordenades. L'algorisme és el següent:

1. Inicialment es posa $\boldsymbol{b}_1 =$ punt inicial.

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

```
exploracio(x, f_min) {
  x_test = x
  per(totes les components x[i] de x) {
    x_test[i] = x[i] + α[i] ;
    si(f(x_test) < f_min) { %èxit
      f_min = f(x_test) ;
    } altrament { %falla
      x_test[i] = x[i] − α[i] ;
      si(f(x_test) < f_min) { %èxit
        f_min = f(x_test) ;
      }
    }
  }
  retorna(x_test) ;
}
```

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

3. Es fa un desplaçament orientat $\boldsymbol{p}_1 = 2\,\boldsymbol{b}_2 - \boldsymbol{b}_1$ i una búsqueda exploratòria en l'entorn d'aquest punt: $\boldsymbol{b}_{test}$ **= exploracio(**$\boldsymbol{p}_1$**,** $f(\boldsymbol{b}_2)$**)**. Si l'exploració té èxit ($f(\boldsymbol{b}_{test}) < f(\boldsymbol{b}_2)$), aleshores es posa $\boldsymbol{b}_1 = \boldsymbol{b}_2$, $\boldsymbol{b}_2 = \boldsymbol{b}_{test}$ i es repeteix el punt 3. Altrament es posa $\boldsymbol{b}_1 = \boldsymbol{b}_2$ i es torna al punt 2.

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

4.4 Mètodes diferencials

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

$$\Delta\boldsymbol{x}_k = -\mathbf{D}_k\,\nabla f(\boldsymbol{x}_k) \tag{4.10}$$

on $\mathbf{D}_k$ és una matriu simètrica definida positiva, per tant: $-\nabla f(\boldsymbol{x}_k)^{\mathrm{T}}\,\mathbf{D}_k\,\nabla f(\boldsymbol{x}_k) < 0$. L'equació (4.6) serà doncs:

$$\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{x}_k - \alpha_k\,\mathbf{D}_k\,\nabla f(\boldsymbol{x}_k), \qquad \alpha_k \in \mathbb{R}_+ \tag{4.11}$$

4.4.1 Mètode del màxim descens

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

$$\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{x}_k - \alpha_k\,\nabla f(\boldsymbol{x}_k), \qquad \alpha_k \in \mathbb{R}_+ \tag{4.12}$$

Alguns cops aquest mètode pot ser poc eficient perquè les direccions $-\nabla f(\boldsymbol{x}_k)$ 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 $f(\boldsymbol{x})$ convexa quadràtica és:

$$\min \quad f(\boldsymbol{x}) = 1/2\,\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\,\mathbf{A}\,\boldsymbol{x} - \mathbf{b}^{\mathrm{T}}\,\boldsymbol{x} + c \tag{4.13}$$

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

$$\mathbf{A}\,\boldsymbol{x}^* = \mathbf{b} \tag{4.14}$$

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

$$\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{x}_k - \alpha_k\,\nabla f(\boldsymbol{x}_k) = \boldsymbol{x}_k + \alpha_k\,\boldsymbol{r}_k \tag{4.15}$$

Per calcular el pas α_k aplicarem (4.9). Ara $\Delta\boldsymbol{x}_k = -\nabla f(\boldsymbol{x}_k) = \boldsymbol{r}_k$, per tant:

$$\begin{aligned}
\nabla f(\boldsymbol{x}_{k+1})^{\mathrm{T}}\,\Delta\boldsymbol{x}_k = 0 \Rightarrow& \\
(\mathbf{A}\,(\boldsymbol{x}_k + \alpha_k\,\boldsymbol{r}_k) - \mathbf{b})^{\mathrm{T}}\,\boldsymbol{r}_k &= 0 \Rightarrow \\
(\mathbf{A}\,\boldsymbol{x}_k - \mathbf{b} + \alpha_k\,\mathbf{A}\,\boldsymbol{r}_k)^{\mathrm{T}}\,\boldsymbol{r}_k &= 0 \Rightarrow \\
(-\boldsymbol{r}_k + \alpha_k\,\mathbf{A}\,\boldsymbol{r}_k)^{\mathrm{T}}\,\boldsymbol{r}_k &= 0 \Rightarrow \\
-\boldsymbol{r}_k^{\mathrm{T}}\,\boldsymbol{r}_k + \alpha_k\,\boldsymbol{r}_k^{\mathrm{T}}\,\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\,\boldsymbol{r}_k &= 0 \Rightarrow \\
\alpha_k &= \frac{\boldsymbol{r}_k^{\mathrm{T}}\,\boldsymbol{r}_k}{\boldsymbol{r}_k^{\mathrm{T}}\,\mathbf{A}\,\boldsymbol{r}_k}
\end{aligned} \tag{4.16}$$

Resumint els resultats obtinguts, el mínim de l'equació quadràtica (4.13) el podem obtenir resolent el sistema d'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 $\mathbf{D}_k = \nabla^2 f(\boldsymbol{x}_k)^{-1}$ (la matriu inversa del Hessià en $\boldsymbol{x}_k$) i $\alpha_k = 1$ en (4.11). L'equació iterativa (4.11) serà doncs:

$$\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{x}_k - \nabla^2 f(\boldsymbol{x}_k)^{-1}\,\nabla f(\boldsymbol{x}_k) \tag{4.17}$$

Igual que en el cas unidemensional (veure la secció 3.4), el mètode de newton es dedueix aproximant $f(\boldsymbol{x})$ en l'entorn de $\boldsymbol{x}_k$ per el polinomi de Taylor de segon ordre en $\boldsymbol{x}_k$:

$$\begin{aligned}
f(\boldsymbol{x}) \approx f(\boldsymbol{x}_k) &+ \nabla f(\boldsymbol{x}_k)^{\mathrm{T}}\,(\boldsymbol{x}_k - \boldsymbol{x}) + \\
&1/2\,(\boldsymbol{x}_k - \boldsymbol{x})^{\mathrm{T}}\,\nabla^2 f(\boldsymbol{x}_k)\,(\boldsymbol{x}_k - \boldsymbol{x})
\end{aligned} \tag{4.18}$$

$\nabla f(\boldsymbol{x}^*) = \mathbf{0}$ és una condició suficient d'optimalitat per el mínim del polinomi (4.18). Imposant aquesta condició tenim que:

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}_k - \nabla^2 f(\boldsymbol{x}_k)^{-1}\,\nabla f(\boldsymbol{x}_k)$$

d'on arribem a la fórmula iterativa (4.17).

Exemple 4.3 Mètode de Newton
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 $f(\boldsymbol{x})$ convexa quadràtica és:

$$\min \quad f(\boldsymbol{x}) = 1/2\,\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\,\mathbf{A}\,\boldsymbol{x} - \mathbf{b}^{\mathrm{T}}\,\boldsymbol{x} + c \tag{4.19}$$

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

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

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

i obtenim la solució en uns 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":

$$\begin{array}{ll} \min & f(\boldsymbol{x}) \\ \text{s. a} & g_i(\boldsymbol{x}) \le 0, \quad i = 1, \cdots m \\ & h_j(\boldsymbol{x}) = 0, \quad j = 1, \cdots p \end{array} \tag{5.1}$$

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

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

de manera que podem reescriure (5.1) com:

$$\begin{array}{ll} \min & f(\boldsymbol{x}) \\ \text{s. a} & \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) \le 0 \\ & \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}) = 0 \end{array} \tag{5.3}$$

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

$$\mathcal{D} = \mathbf{dom}\ f \cap \mathbf{dom}\ \boldsymbol{g} \cap \mathbf{dom}\ \boldsymbol{h} = \mathbf{dom}\ f \cap \bigcap_{i=1}^{m} \mathbf{dom}\ g_i \cap \bigcap_{j=1}^{p} \mathbf{dom}\ h_j \tag{5.4}$$

- La solució òptima p^* és:

$$p^* = \min \left\{ f(\boldsymbol{x}) \mid \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) \le 0,\ \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}) = 0 \right\} \tag{5.5}$$

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

5.2 Problema d'optimització convexa

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

$$\begin{array}{ll} \min & f(\boldsymbol{x}) \\ \text{s. a} & \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) \le 0 \\ & \mathbf{A}\,\boldsymbol{x} = \mathbf{b} \end{array} \tag{5.6}$$

on la funció objectiu f i funcions de $\boldsymbol{g}$ 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 $\phi(\boldsymbol{x})$ és una bijecció en $\mathcal{D}$ i definim $\hat{f}(\boldsymbol{x}) = f(\phi(\boldsymbol{x}))$, $\hat{g}_i(\boldsymbol{x}) = g_i(\phi(\boldsymbol{x}))$, $\hat{h}_j(\boldsymbol{x}) = h_j(\phi(\boldsymbol{x}))$, aleshores el problema:

$$\begin{array}{ll} \min & \hat{f}(\boldsymbol{x}) \\ \text{s. a} & \hat{g}_i(\boldsymbol{x}) \le 0, \quad i = 1, \cdots n \\ & \hat{h}_j(\boldsymbol{x}) = 0, \quad j = 1, \cdots p \end{array} \tag{5.7}$$

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

5.4 Lagrangià i dualitat

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

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

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

Definim un punt de sella (*saddle point*) del Lagrangià del problema (5.3) com una tupla $(\hat{\boldsymbol{x}},\, \hat{\boldsymbol{\lambda}},\, \hat{\boldsymbol{\mu}})$ donada per:

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

Notar que:

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

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

5.4.1 Funció dual Lagrangiana

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

$$\phi(\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}) = \min_{\boldsymbol{x} \in \mathcal{D}} L(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}) = L(\hat{\boldsymbol{x}}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}) = \min_{\boldsymbol{x} \in \mathcal{D}} \left\{ f(\boldsymbol{x}) + \boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) + \boldsymbol{\mu}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}) \right\} \tag{5.11}$$

Si L no està acotat en $\boldsymbol{x}$, aleshores $\phi(\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}) = -\infty$.

Teorema 5.1 La funció dual Lagrangiana és còncava

Demostració.

$$\begin{aligned}
&\phi(\alpha\, \boldsymbol{\lambda}_1 + (1-\alpha)\, \boldsymbol{\lambda}_2, \alpha\, \boldsymbol{\mu}_1 + (1-\alpha)\, \boldsymbol{\mu}_2) = \\
&\quad \min_{\boldsymbol{x} \in \mathcal{D}} \left\{ f(\boldsymbol{x}) + (\alpha\, \boldsymbol{\lambda}_1 + (1-\alpha)\, \boldsymbol{\lambda}_2)^{\mathrm{T}} \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) + (\alpha\, \boldsymbol{\mu}_1 + (1-\alpha)\, \boldsymbol{\mu}_2)^{\mathrm{T}} \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}) \right\} = \\
&\quad \min_{\boldsymbol{x} \in \mathcal{D}} \left\{ \alpha\, (f(\boldsymbol{x}) + \boldsymbol{\lambda}_1^{\mathrm{T}} \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) + \boldsymbol{\mu}_1^{\mathrm{T}} \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x})) + (1-\alpha)\, (f(\boldsymbol{x}) + \boldsymbol{\lambda}_2^{\mathrm{T}} \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) + \boldsymbol{\mu}_2^{\mathrm{T}} \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x})) \right\} \geq \\
&\quad \min_{\boldsymbol{x} \in \mathcal{D}} \left\{ \alpha\, (f(\boldsymbol{x}) + \boldsymbol{\lambda}_1^{\mathrm{T}} \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) + \boldsymbol{\mu}_1^{\mathrm{T}} \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x})) \right\} + \min_{\boldsymbol{x} \in \mathcal{D}} \left\{ (1-\alpha)\, (f(\boldsymbol{x}) + \boldsymbol{\lambda}_2^{\mathrm{T}} \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) + \boldsymbol{\mu}_2^{\mathrm{T}} \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x})) \right\} = \\
&\quad \alpha\, \phi(\boldsymbol{\lambda}_1,\, \boldsymbol{\mu}_1) + (1-\alpha)\, \phi(\boldsymbol{\lambda}_2,\, \boldsymbol{\mu}_2) \qquad \square
\end{aligned}$$

5.4.2 Problema dual de Lagrange

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:

$$\begin{array}{ll} \max & \phi(\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}) \\ \text{s. a} & \boldsymbol{\lambda} \geq 0 \end{array} \tag{5.12}$$

on $\phi(\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu})$ és la funció dual Lagrangiana (5.11). S'anomena solució dual factible als vectors $(\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu})$ tals que $\lambda \geq 0$ i $\phi(\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}) > -\infty$. La solució $(\boldsymbol{\lambda}^*, \boldsymbol{\mu}^*)$ del problema (5.12) s'anomena solució òptima dual.

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

Teorema 5.2 Teorema dèbil de la dualitat
(*Weak Duality Theorem*) Sigui $\hat{\boldsymbol{x}}$ un vector primal factible, i $(\hat{\boldsymbol{\lambda}},\, \hat{\boldsymbol{\mu}})$ una tupla dual factible, aleshores:

$$\phi(\hat{\boldsymbol{\lambda}},\, \hat{\boldsymbol{\mu}}) \leq f(\hat{\boldsymbol{x}}) \tag{5.13}$$

Demostració. Si $\hat{\boldsymbol{x}}$ és un vector primal factible, aleshores: $\boldsymbol{g}(\hat{\boldsymbol{x}}) \leq 0$ i $\boldsymbol{h}(\hat{\boldsymbol{x}}) = 0$. Si $(\hat{\boldsymbol{\lambda}},\, \hat{\boldsymbol{\mu}})$ és una tupla dual factible, aleshores: $\hat{\boldsymbol{\lambda}} \geq 0$. Per tant:

$$\hat{\boldsymbol{\lambda}}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{g}(\hat{\boldsymbol{x}}) + \hat{\boldsymbol{\mu}}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{h}(\hat{\boldsymbol{x}}) \leq 0$$

d'on:

$$L(\hat{\boldsymbol{x}}, \hat{\boldsymbol{\lambda}}, \hat{\boldsymbol{\mu}}) = f(\hat{\boldsymbol{x}}) + \hat{\boldsymbol{\lambda}}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{g}(\hat{\boldsymbol{x}}) + \hat{\boldsymbol{\mu}}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{h}(\hat{\boldsymbol{x}}) \leq f(\hat{\boldsymbol{x}})$$

i:

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

Corol·lari 5.1

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

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

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

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 $\hat{\boldsymbol{x}} \in \textbf{int}\,\mathcal{D}$ on $\boldsymbol{g}(\hat{\boldsymbol{x}}) < 0$ (**int** $\mathcal{D}$ vol dir interior a $\mathcal{D}$). És a dir, es compleix:

$$g_i(\hat{\boldsymbol{x}}) < 0,\ i = 1, \cdots m; \qquad \mathbf{A}\,\hat{\boldsymbol{x}} = \mathbf{b} \tag{5.15}$$

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 $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^m$, $\mathbf{p} \geq 0$, $\mathbf{p} \neq 0$ tal que $\mathbf{p}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) \geq 0,\ \forall \boldsymbol{x} \in \mathcal{D}$.

Exemple 5.1 Qualificació de les restriccions de Slater
Considerem el següent problema:

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

La regió factible és $\mathcal{D} = \textbf{dom}\ f \cap \textbf{dom}\ g_1 = \{x \mid x \geq 1\}$. La funció f és convexa en $\mathcal{D}$ i existeix algun punt $\hat{x} \in \textbf{int}\,\mathcal{D}$ 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 Lagrangià 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:

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

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 $\boldsymbol{x}^*$ i $\boldsymbol{\lambda}^*$, aleshores:

$$\boldsymbol{\lambda}^{*\mathrm{T}}\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}^*) = 0 \tag{5.16}$$

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

Demostració.

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

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

5.5 Teorema de Karush-Kuhn-Tucker

Teorema 5.7 Karush-Kuhn-Tucker (KKT)
Sigui el problema de minimització (5.3):

$$\begin{array}{ll} \min & f(\boldsymbol{x}) \\ \text{s. a} & \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) \leq 0 \\ & \boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}) = 0 \end{array} \tag{5.17}$$

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

$$\begin{array}{rcl} \nabla_x L(\boldsymbol{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*, \boldsymbol{\mu}^*) & = & \mathbf{0} \\ \boldsymbol{\lambda}^{*\mathrm{T}}\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}^*) & = & 0 \\ \boldsymbol{\lambda}^* & \geq & \mathbf{0} \end{array} \tag{5.18}$$

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

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

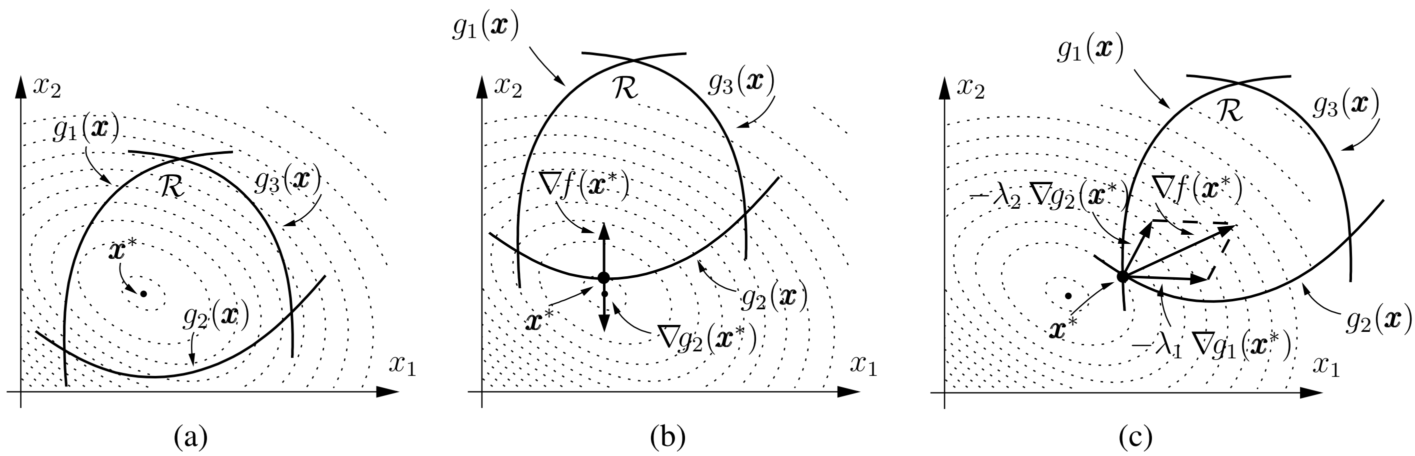


Figura 5.1: Interpretació geomètrica de les condicions de KKT. (a) No hi ha restriccions actives, (b) la restricció $g_2(\boldsymbol{x})$ és activa, (c) les restriccions $g_1(\boldsymbol{x})$ i $g_2(\boldsymbol{x})$ són actives.

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 $\boldsymbol{x}^*$ és regular si en ell els gradients de les restriccions d'igualtat i de desigualtat actives son vectors linealment independents. Si $\boldsymbol{x}^*$ 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 $\boldsymbol{x}^*$ és un punt regular, les condicions de KKT son necessàries però no suficients perquè $\boldsymbol{x}^*$ 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 $\nabla_x L(\boldsymbol{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*) = 0$ la podem escriure en la forma:

$$\nabla f(\boldsymbol{x}^*) = \sum_{i \in A(\boldsymbol{x}^*)} \lambda_i^* \left(-\nabla g_i(\boldsymbol{x}^*)\right)$$
$$\lambda_i^* \geq 0; \quad i \in A(\boldsymbol{x}^*)$$

és a dir, $\nabla f(\boldsymbol{x}^*)$ és la combinació cònica dels vectors $-\nabla g_i(\boldsymbol{x}^*)$ 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 $f : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ amb tres restriccions $g_i(\boldsymbol{x}) \leq 0$, $i = 1, 2, 3$. 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 ($g_2(\boldsymbol{x})$), i es compleix $\nabla f(\boldsymbol{x}^*) = -\nabla g_2(\boldsymbol{x}^*)$. En 5.1.(c) hi ha dues restriccions actives ($g_1(\boldsymbol{x})$ i $g_2(\boldsymbol{x})$), i es compleix $\nabla f(\boldsymbol{x}^*) = -\nabla g_1(\boldsymbol{x}^*) - \nabla g_2(\boldsymbol{x}^*)$.

Exemple 5.2 Condicions de KKT

Considerem el següent problema:

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

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

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

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

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

d'on tenim que:

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

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

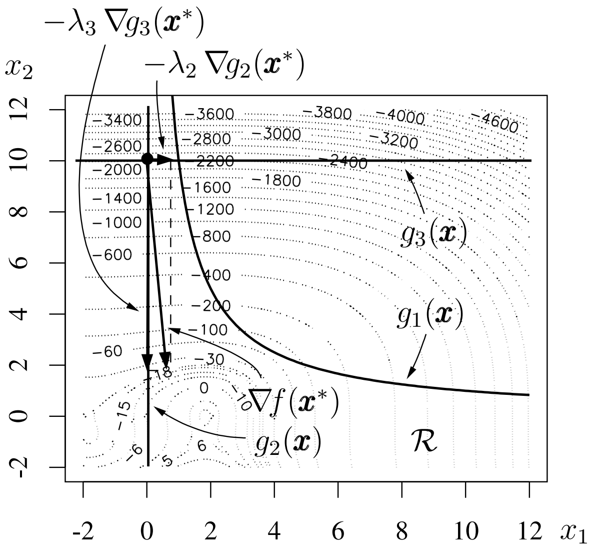


Figura 5.2: Corbes de nivell de la funció objectiu $f(\boldsymbol{x})$ i regió factible $\mathcal{R}$ compresa entre les restriccions de desigualtat $g_1(\boldsymbol{x})$, $g_2(\boldsymbol{x})$ i $g_3(\boldsymbol{x})$ de l'exemple 5.20.

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 $\lim_{x_2\to\infty} f = -\infty$. 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 Lagrangià és: $L = f + \lambda_1\, g_1 + \lambda_2\, g_2 + \lambda_3\, g_3$, d'on resulten les condicions de KKT:

$$\frac{\partial L}{\partial x_1} = 0 \Rightarrow -3\,x_1^2 + 10 + \lambda_1\, x_2 - \lambda_2 = 0$$
$$\frac{\partial L}{\partial x_2} = 0 \Rightarrow -6\,x_2^2 - 4\,x_2 + \lambda_1\, x_1 + \lambda_3 = 0$$
$$\lambda_i\, g_i = 0,\ \lambda_i \geq 0,\ i = 1,\,2,\,3$$

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 compleixen totes les condicions de KKT i hi ha tantes restriccions actives com variables d'optimització, deduïm que el punt és la solució del problema. Per tant: $\boldsymbol{x}^* = (0,\ 10),\ f(\boldsymbol{x}^*) = -2206$. ■

Capítol 6
Programació quadràtica (PQ)

6.1 Condicions de KKT per un problema de PQ

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

$$\begin{array}{lrcl} \min & f(\boldsymbol{x}) = 1/2\, \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\, \mathbf{A}_{n\times n}\, \boldsymbol{x} + \mathbf{a}_{n\times 1}^{\mathrm{T}}\, \boldsymbol{x} \\ \text{s. a} & \mathbf{B}_{m\times n}\, \boldsymbol{x} & \leq & \mathbf{b}_{m\times 1} \\ & \boldsymbol{x} & \geq & 0 \end{array} \tag{6.1}$$

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

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

$$\begin{array}{ll} \min & f(\boldsymbol{x}) \\ \text{s. a} & \boldsymbol{g}_1(\boldsymbol{x}) \leq 0 \\ & \boldsymbol{g}_2(\boldsymbol{x}) \leq 0 \end{array} \tag{6.2}$$

On $f(\boldsymbol{x}) = 1/2\ \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\,\mathbf{A}\,\boldsymbol{x} + \mathbf{a}^{\mathrm{T}}\,\boldsymbol{x}$, $\boldsymbol{g}_1(\boldsymbol{x}) = \mathbf{B}\,\boldsymbol{x} - \mathbf{b}$, $\boldsymbol{g}_2(\boldsymbol{x}) = -\boldsymbol{x}$. El Lagrangià de (6.2) és doncs: $L(\boldsymbol{x},\boldsymbol{u},\boldsymbol{v}) = f(\boldsymbol{x}) + \boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\,\boldsymbol{g}_1(\boldsymbol{x}) + \boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\,\boldsymbol{g}_2(\boldsymbol{x})$, on $\boldsymbol{u}$ i $\boldsymbol{v}$ son respectivament vectors de m i n multiplicadors de Lagrange.

Donat que:

$$\nabla f(\boldsymbol{x}) = \mathbf{A}\,\boldsymbol{x} + \mathbf{a}$$
$$\nabla(\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\,\boldsymbol{g}_1(\boldsymbol{x})) = \mathbf{B}^{\mathrm{T}}\,\boldsymbol{u}$$
$$\nabla(\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\,\boldsymbol{g}_2(\boldsymbol{x})) = -\boldsymbol{v}$$

tenim que $\nabla_x L(\boldsymbol{x},\boldsymbol{u},\boldsymbol{v}) = \mathbf{A}\,\boldsymbol{x} + \mathbf{a} + \mathbf{B}^{\mathrm{T}}\,\boldsymbol{u} - \boldsymbol{v}$. Per tant les condicions KKT (5.18) son:

$$\mathbf{A}\,\boldsymbol{x} + \mathbf{a} + \mathbf{B}^{\mathrm{T}}\,\boldsymbol{u} - \boldsymbol{v} = \mathbf{0}$$
$$\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\,\boldsymbol{g}_1(\boldsymbol{x}) = 0$$
$$\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\,\boldsymbol{g}_2(\boldsymbol{x}) = 0$$
$$\boldsymbol{u},\,\boldsymbol{v} \geq \mathbf{0}$$

Si afegim les restriccions de (6.1) i definim les variables de folgança $\boldsymbol{y}$ perquè $\boldsymbol{g}_1(\boldsymbol{x}) + \boldsymbol{y} = 0$, arribem a les següent condicions d'optimalitat:

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

Observacions

- El sistema (6.3) té en total $2\,n+2\,m$ variables (els vectors $\boldsymbol{x}$ i $\boldsymbol{v}$ tenen n components i els vectors $\boldsymbol{y}$ i $\boldsymbol{u}$ tenen m components.

- Les condicions de folgança complementària de (6.3) impliquen que només hi haurà $n+m$ variables ≥ 0: n dels vectors $\boldsymbol{x}$, $\boldsymbol{v}$ i m dels vectors $\boldsymbol{y}$, $\boldsymbol{u}$.

- 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:

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

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 $\boldsymbol{x}$, $\boldsymbol{y}$. Per exemple, si $\mathbf{b}\geq 0$, podem agafar $\boldsymbol{x}=\mathbf{0}$, $\boldsymbol{y}=\mathbf{b}$.

- Afegim m variables artificials ($\boldsymbol{z}$) 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 $\boldsymbol{z}=\mathbf{0}$ i el valor obtingut per $\boldsymbol{x}$ serà la solució òptima perquè satisfaran les condicions de KKT.

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

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

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

Exemple 6.1 Mètode de Wolfe

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

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

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

A més:

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

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:

x_1	x_2	v_1	v_2	y_1	y_2	u_1	u_2	z_1	z_2	b
−1	1	1	−1	0	0	1	4	0	0	5
−2	−1	$\boxed{1}$	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

Per facilitar els càlculs comencem pivotant en v_1:

	x_1	x_2	v_1	v_2	y_1	y_2	u_1	u_2	z_1	z_2	b
−1	1	2	0	−1	0	0	2	2	−1	0	3
	−2	−1	1	0	0	0	−1	2	1	0	2
	1	$\boxed{2}$	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

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

	x_1	x_2	v_1	v_2	y_1	y_2	u_1	u_2	z_1	z_2	b
−2	0	0	0	1	0	0	−2	−2	−1	−2	−3
$\frac{1}{2}$	$\frac{-3}{2}$	0	1	$\frac{-1}{2}$	0	0	0	3	1	$\frac{1}{2}$	$\frac{7}{2}$
	1	2	0	−1	0	0	2	2	0	1	3
−1	0	0	0	1	1	0	−2	−2	0	−1	3
−1	−3	0	0	1	0	1	−2	−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 dóna $f(\boldsymbol{x}) = -9/4$. ■

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 $m_k(\boldsymbol{x}) : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ com:

$$\begin{aligned} &m_k(\boldsymbol{x}) = c_k\, x_1^{a_{k1}}\, x_2^{a_{k2}} \cdots x_n^{a_{kn}} \\ &a_{ki} \in \mathbb{R} \end{aligned} \tag{7.1}$$

i un posinomi (de monomi positiu) $f(\boldsymbol{x}) : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ com:

$$\begin{aligned} &f(\boldsymbol{x}) = \sum_{k=1}^{M} m_k(\boldsymbol{x}) = \sum_{k=1}^{M} c_k\, x_1^{a_{k1}}\, x_2^{a_{k2}} \cdots x_n^{a_{kn}} \\ &c_k > 0 \end{aligned} \tag{7.2}$$

7.2 PG sense restriccions

Es tracta de resoldre el problema posinomial:

$$\begin{aligned} \min \quad & f(\boldsymbol{x}) = \sum_{k=1}^{M} c_k\, x_1^{a_{k1}} \cdots x_n^{a_{kn}} \\ \text{s. a} \quad & \boldsymbol{x} > 0 \end{aligned} \tag{7.3}$$

Per simplificar la notació definim:

$$p_k(\boldsymbol{x}) = x_1^{a_{k1}} \cdots x_n^{a_{kn}} \tag{7.4}$$

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

$$f(\boldsymbol{x}) = \sum_{k=1}^{M} c_k\, x_1^{a_{k1}} \cdots x_n^{a_{kn}} = \sum_{k=1}^{M} c_k\, p_k(\boldsymbol{x}) \tag{7.5}$$

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

$$\begin{aligned} \min \quad f_c(\boldsymbol{y}) &= \log \sum_{k=1}^{M} c_k\, \mathrm{e}^{y_1\, a_{k1}} \cdots \mathrm{e}^{y_n\, a_{kn}} \\ &= \log \sum_{k=1}^{M} c_k\, p_k(\boldsymbol{y}) \end{aligned} \tag{7.6}$$

Sigui $x_i^* = \mathrm{e}^{y_i^*}$ la solució òptima de (7.6). Com que (7.6) és convex, $\nabla f_c(\boldsymbol{y}^*) = \boldsymbol{0}$ és una condició necessària i suficient. Per tant:

$$\begin{aligned} &\frac{\partial f_c(\boldsymbol{y}^*)}{\partial y_i} = 0 \;\Rightarrow \\ &\frac{1}{f(\boldsymbol{x}^*)} \sum_{k=1}^{M} c_k\, a_{ki}\, p_k(\boldsymbol{x}^*) = 0, \; i = 1, \cdots n \end{aligned} \tag{7.7}$$

Ara definim les "variables duals" w_k:

$$w_k = \frac{c_k\, p_k(\boldsymbol{x}^*)}{f(\boldsymbol{x}^*)}, \quad k = 1, \cdots M \tag{7.8}$$

De (7.7) tenim que:

$$\sum_{k=1}^{M} a_{ki}\, w_k = 0, \; i = 1, \cdots n \tag{7.9}$$

A més:

$$\sum_{k=1}^{M} w_k = \frac{\sum_{k=1}^{M} c_k\, p_k(\boldsymbol{x}^*)}{f(\boldsymbol{x}^*)} = \frac{f(\boldsymbol{x}^*)}{f(\boldsymbol{x}^*)} = 1 \tag{7.10}$$

Les equacions (7.9) i (7.10) s'anomenen respectivament condicions de normalitat i ortogonalitat de les variables w_k. Notar que tenim M variables w_k (tantes com monomis té $f(\boldsymbol{x})$), 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.

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

$$p^* = (p^*)^{\sum_k w_k} = \prod_{k=1}^{M} (p^*)^{w_k} = \prod_{k=1}^{M} \left(\frac{c_k\, p_k(\boldsymbol{x}^*)}{w_k} \right)^{w_k} = \prod_{k=1}^{M} \left(\frac{c_k}{w_k} \right)^{w_k} \prod_{k=1}^{M} (p_k(\boldsymbol{x}^*))^{w_k} = \prod_{k=1}^{M} \left(\frac{c_k}{w_k} \right)^{w_k} \quad (7.11)$$

donat que:

$$\prod_{k=1}^{M} (p_k(\boldsymbol{x}^*))^{w_k} = \prod_{k=1}^{M} (x_1^{a_{k1}} \cdots x_n^{a_{kn}})^{w_k} = x_1^{\sum_k a_{k1} w_k} \cdots x_n^{\sum_k a_{kn} w_k} = 1$$

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

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

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

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

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

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

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

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

Exemple 7.1 PG sense restriccions

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

Com que tenim 4 posinomis, tindrem 4 variables duals $w_i,\; i = 1, \cdots 4$. 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 de normalitat i ortogonalitat ens donen la solució:

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

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:

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

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

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

Substituït 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:

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

Per simplificar la notació definim:

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

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

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

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

$$w_{ik} = c_{ik}\, p_{ik}(\boldsymbol{x}^*), \qquad i = 1, \cdots m, \; k = 1, \cdots M_i \quad (7.20)$$

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

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

$$\sum_{k=1}^{M_0} \lambda_{0k} = 1 \tag{7.21}$$

$$\sum_{i=0}^{m} \sum_{k=1}^{M_i} a_{ikj}\, \lambda_{ik} = 0, \quad j = 1, \cdots n \tag{7.22}$$

Notar que el nombre de variables duals a determinar és igual al nombre total de monomis: $M = \sum_{i=0}^{m} M_i$. 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 grau de dificultat val zero: $M - (n+1) = 0$.

La relació entre λ_{ik} i w_{ik} és:

$$w_{0k} = \lambda_{0k}, \quad k = 1, \cdots M_0 \tag{7.23}$$

$$w_{ik} = \frac{\lambda_{ik}}{\sum_{k=1}^{M_i} \lambda_{ik}}, \quad \begin{array}{l} i = 1, \cdots m \\ k = 1, \cdots M_i \end{array} \tag{7.24}$$

La funció dual és:

$$d(\boldsymbol{\lambda}) = \prod_{i=0}^{m} \prod_{k=1}^{M_i} \left(\frac{c_{ik}}{w_{ik}} \right)^{\lambda_{ik}} \tag{7.25}$$

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

Exemple 7.2 PG amb restriccions

$$\begin{aligned} \min \quad & f(\boldsymbol{x}) = \underbrace{40\, x_1\, x_2}_{\lambda_{01}} + \underbrace{20\, x_2\, x_3}_{\lambda_{02}} \\ \text{s. a} \quad & \underbrace{1/5\, x_1^{-1}\, x_2^{-1/2}}_{\lambda_{11}} + \underbrace{3/5\, x_2^{-1}\, x_3^{-2/3}}_{\lambda_{12}} \le 1 \\ & x_i > 0,\ i = 1,\ 2,\ 3 \end{aligned}$$

Com que tenim 4 posinomis, tindrem 4 variables duals $\lambda_{ik},\ i = 0, 1,\ k = 1, \cdots M_i$. 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 de normalitat i ortogonalitat ens donen la solució:

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

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

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

Substituint en la funció dual (7.25) tenim:

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

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

$$\begin{aligned} \log \frac{w_{01}\, p^*}{c_{01}} &= -\log 2 = u_1 + u_2 \\ \log \frac{w_{02}\, p^*}{c_{02}} &= 0 = u_2 + u_3 \\ \log \frac{w_{11}}{c_{11}} &= \log 2 = -u_1 - 1/2\, u_2 \end{aligned}$$

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 suposarem convex:

$$\begin{aligned} \min \quad & f(\boldsymbol{x}) \\ \text{s. a} \quad & g_i(\boldsymbol{x}) \le 0, \quad i = 1, \cdots m \end{aligned} \tag{8.1}$$

L'objectiu és plantejar un mètode iteratiu per resoldre el problema (8.1) amb el mètode de Newton explicat 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:

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

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

$$I_{x \le 0}(x) \begin{cases} 0, & x \le 0 \\ \infty, & x > 0 \end{cases} \tag{8.3}$$

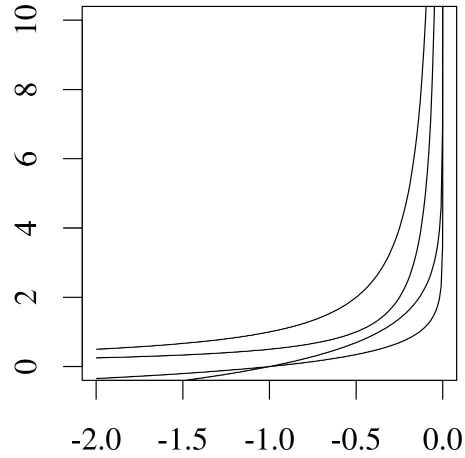


Figura 8.1: Aproximacions de la funció indicador $I_{x\leq 0}(x)$

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 son:

$$B(x) = \frac{-\rho}{x} \tag{8.4}$$
$$B(x) = -\rho \log(-x) \tag{8.5}$$

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 $\boldsymbol{x}_0$ interior a la regió factible: $g_i(\boldsymbol{x}_0) \leq 0$.

2. Triar un valor inicial per ρ.

3. Fer servir el mètode de Newton amb el punt inicial $\boldsymbol{x}_0$ per resoldre el problema:

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

   La solució $\boldsymbol{x}_k$ 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 $h_i(\boldsymbol{x}) = 0$, s'agafa funció de penalització $\rho_k^{-1/2} h_i^2(\boldsymbol{x})$.

Capítol 9

Programació dinàmica determinista

9.1 Formulació

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

- L'estat del sistema x_k dóna 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 $k = 0, 1, \cdots N$ 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 $k+1$, $k+2, \cdots N$. Per exemple:

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

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 $f_k(x_k)$, $k = N-1,\ N-2, \cdots 0$. 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.

Exemple 9.1 Programació dinàmica
Es fa un sondeig petrolífer en tres regions A, B, C on hi poden treballar entre 1 i 3 equips de sondeig. 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 sondeig 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, $r_{k+1}, \cdots r_3$, i la funció objectiu:

$$f_k(x_k) = \min \mathcal{P} \left\{ \begin{matrix} \text{fracàs en les etapes} \\ r_k, \, r_{k+1}, \cdots r_3 \end{matrix} \right\}$$

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

$$f_k(x_k) = \min_n \left\{ \mathcal{P}_k \{n\} \times f_{k+1}(x_k - n) \right\}$$

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 $r_3 = C$:

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

- Per l'etapa $r_2 = B$:

$$\begin{aligned} f_2(2) =& \mathcal{P}_2 \{1\} \; f_3(1) = 0,70 \times 0,75 = 0,525 \\ f_2(3) =& \min\{\mathcal{P}_2 \{1\} \; f_3(2); \; \mathcal{P}_2 \{2\} \; f_3(1)\} = \\ =& \min\{0,21; \; 0,30\} = 0,21 \\ f_2(4) =& \min\{\underline{\mathcal{P}_2 \{1\} \; f_3(3)}; \; \mathcal{P}_2 \{2\} \; f_3(2); \; \mathcal{P}_2 \{3\} \\ & f_3(1)\} = \min\{\underline{0,07}; \; 0,12; \; 0,15\} = 0,07 \end{aligned}$$

- Per l'etapa $r_1 = A$:

$$\begin{aligned} f_1(5) =& \min\{\underline{\mathcal{P}_1 \{1\} \; f_2(4)}; \; \mathcal{P}_1 \{2\} \; f_2(3); \; \mathcal{P}_1 \{3\} \\ & f_2(2)\} = \min\{\underline{0,035}; \; 0,063; \; 0,07875\} \\ =& 0,035 \end{aligned}$$

On s'han subratllat les decisions òptimes. Es conclou doncs que la probabilitat de fallar és de $0,035$, destinant 1 equip en la regió A, 1 equip en la regió B i 3 equips en la regió C. ■

Apèndixs

A. Mètode de la secció àurea

```
# busca el mínim de la funció f(x)
# en l'intèrval [x1, x3, x4, x2]
# amb el mètode de la secció àurea.

x <- c(0, 10) ; # intèrval 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 ;
a1 <- 1.0 / (a + 1.0) ;
x3 <- function() { # calcula x3
  (a * x[1] + x[2]) * a1 ;
}

x4 <- function() { # calcula x4
  (x[1] + a * x[2]) * a1 ;
}

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

for(n in 0:N) {
  if((y[4] < y[3]) && (y[4] < y[2])) {
    x[1] <- x[3] ;  y[1] <- y[3] ;
    x[3] <- x3() ; y3 <- 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'intèrval [x[1], x[3], x[4], x[2]]
# amb el mètode de fibonacci.

x <- c(0, 10) ; # intèrval inicial
N <- 20 ; # nombre d'iteracions

f <- function(x) { # funció objectiu
```

```
  (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") ;
```

C. Mètode de Hooke i Jeeves

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

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

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

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

Una condició necessària i suficient perquè una matriu $\mathbf{A}$ sigui definida positiva és que la seva "part Hermítica": $\mathbf{A}_H = 1/2(\mathbf{A} + \mathbf{A}^{\mathrm{H}})$ 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 és definida positiva com $\mathbf{A} > \mathbf{0}$. Si la matriu compleix $\Re[\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\,\mathbf{A}\,\boldsymbol{x}] \geq 0$ es diu que és semidefinida positiva i ho indicarem com $\mathbf{A} \geq \mathbf{0}$.

Anàlogament, una matriu que compleix $\Re[\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\,\mathbf{A}\,\boldsymbol{x}] < 0$, respectivament $\Re[\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\,\mathbf{A}\,\boldsymbol{x}] \leq 0$, es diu definida negativa i semidefinida negativa (ho indicarem com $\mathbf{A} < \mathbf{0}$ i $\mathbf{A} \leq \mathbf{0}$ respectivament). Una condició necessària i suficient perquè una matriu Hermítica sigui definida negativa és que tots els seus autovalors siguin < 0. També és una condició necessària i suficient que tots els els menors principals d'ordre k, $k = 1, 2, \cdots, n$ siguin negatius si k és senar, i positius si k és parell.

Una matriu que no és ni (semi)definida positiva ni negativa es diu que és indefinida.

Exemple D.1 Matriu definida positiva

La matriu $\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}$ és definida positiva perquè la seva part Hermítica: $\mathbf{A}_H = 1/2(\mathbf{A} + \mathbf{A}^{\mathrm{H}}) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \mathbf{I}$ és definida positiva (té els autovalors $+1, +1$). Efectivament: $\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\,\mathbf{A}\,\boldsymbol{x} = x_1^2 + x_2^2 > 0,\ \forall \boldsymbol{x} \neq 0$. ■

E. Forma quadràtica

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

$$q(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\,\mathbf{A}\,\boldsymbol{x} \tag{E.1}$$

on $\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}$ és el vector (o matriu) conjugat transposat: Si $x_{ij} = u + i\,v$, $x_{ji}^{\mathrm{H}} = u - i\,v$. És fàcil comprovar que:

$$q(\boldsymbol{x}) = \sum_{1 \leq i \leq n} \sum_{1 \leq j \leq n} x_i\,a_{ij}\,x_j \tag{E.2}$$

$$q(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\,\mathbf{A}\,\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\,\mathbf{A}_H\,\boldsymbol{x} \tag{E.3}$$

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

En $\mathbb{R}^2$, l'equació:

$$q(\boldsymbol{x}) = a\,x^2 + b\,x\,y + c\,y^2 \tag{E.4}$$

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

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a & b/2 \\ b/2 & c \end{bmatrix} \tag{E.5}$$

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

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

En particular, les corbes de nivell son (veure la figura E.1):

- El·lipses si $b^2 < 4\,a\,c$ ($\lambda_1, \lambda_2 > 0,\ \lambda_1 \neq \lambda_2$).
- Cercles si $a = c,\ b = 0$ ($\lambda_1, \lambda_2 > 0,\ \lambda_1 = \lambda_2$).
- Paràboles si $b^2 = 4\,a\,c$ ($\lambda_1 > 0,\ \lambda_2 = 0$).
- Hipèrboles si $b^2 > 4\,a\,c$ ($\lambda_1 > 0,\ \lambda_2 < 0$).

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 $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ com:

$$\nabla f(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} \partial f(\boldsymbol{x})/\partial x_1 \\ \cdots \\ \partial f(\boldsymbol{x})/\partial x_n \end{bmatrix} \tag{F.1}$$

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

$$\nabla_{\mathbf{v}} f(\boldsymbol{x}) = \lim_{\lambda \to 0} \frac{f(\boldsymbol{x} + \lambda \mathbf{v}) - f(\boldsymbol{x})}{\lambda} = \nabla f(\boldsymbol{x})^{\mathrm{T}}\,\mathbf{v} \tag{F.2}$$

La interpretació intuïtiva de la derivada direccional és la raó de variació de la funció f en en punt $\boldsymbol{x}$ en la direcció del vector $\mathbf{v}$. Per tant, la direcció del gradient és la de màxima variació de la funció $f(\boldsymbol{x})$.

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

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

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

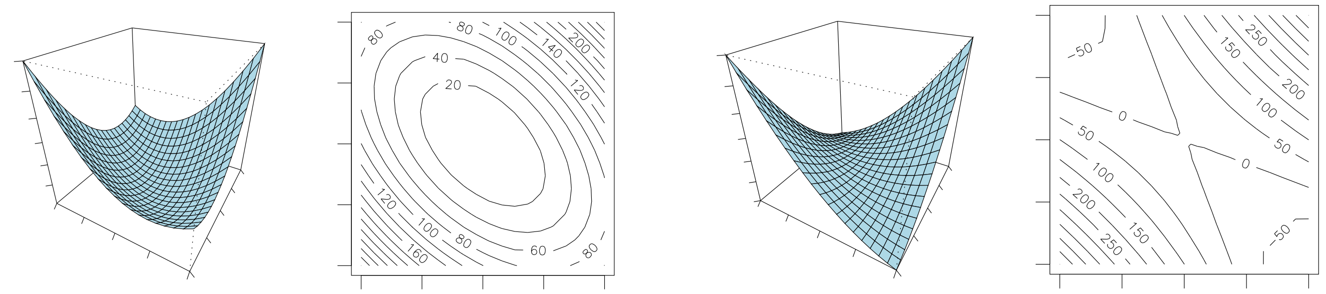
$$\nabla \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} \nabla g_1(\boldsymbol{x}) & \nabla g_2(\boldsymbol{x}) & \cdots & \nabla g_m(\boldsymbol{x}) \end{bmatrix} \tag{F.3}$$

Exemple F.1 Gradient

Si $f(\boldsymbol{x}) = \mathbf{a}^{\mathrm{T}}\,\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\,\mathbf{a} = \sum x_i\,a_i$, aleshores:

$$\nabla f(\boldsymbol{x}) = \nabla(\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\,\mathbf{a}) = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \cdots \\ a_n \end{bmatrix} = \mathbf{a} \tag{F.4}$$

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



(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.

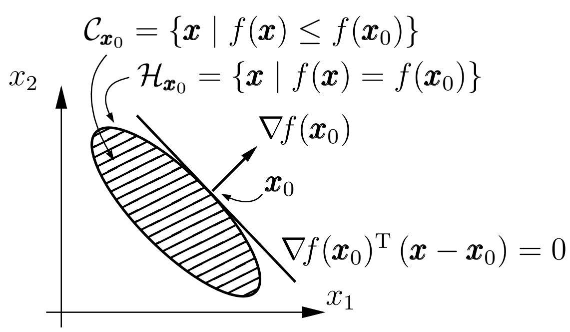


Figura F.1: Relació entre el gradient $\nabla f(\boldsymbol{x}_0)$, hiperfície de nivell $\mathcal{H}_{\boldsymbol{x}_0}$ i subconjunt de nivell $\mathcal{C}_{\boldsymbol{x}_0}$ d'una funció $f : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$.

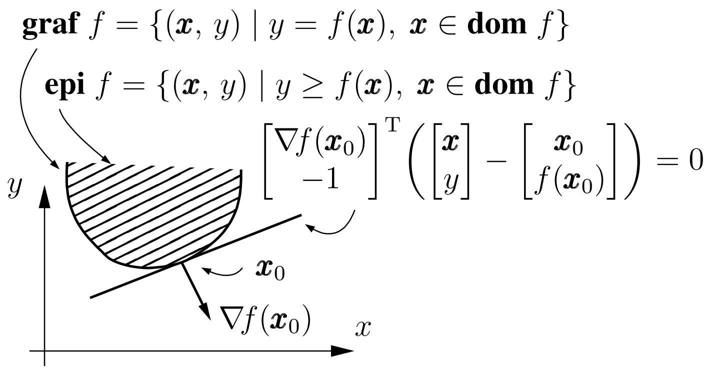


Figura F.2: Relació entre el gradient, gràfic i epigràfic d'una funció $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$.

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

$$\nabla f(\boldsymbol{x}) = \nabla(\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\,\mathbf{A}\,\boldsymbol{x}) = \mathbf{A}\,\boldsymbol{x} + \mathbf{A}\,\boldsymbol{x} = 2\,\mathbf{A}\,\boldsymbol{x} \tag{F.5}$$

■

Observacions

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

G. Hiperfície i subconjunt de nivell

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

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

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

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

$$\nabla f(\boldsymbol{x}_0)^{\mathrm{T}}\,(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_0) = 0 \tag{G.2}$$

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

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

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

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

$$\textbf{graf}\, f = \{(\boldsymbol{x},\, y) \mid y = f(\boldsymbol{x}),\ \boldsymbol{x} \in \textbf{dom}\, f\} \tag{G.4}$$

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

$f(\boldsymbol{x}) - y$. Com que $\nabla F(\boldsymbol{x}, y) = \begin{bmatrix} \nabla f(\boldsymbol{x}) \\ -1 \end{bmatrix}$, aplicant (G.2) tenim que l'hiperplà tangent al gràfic (G.4) en el punt $(\boldsymbol{x}_0, f(\boldsymbol{x}_0))$ és (veure la figura F.2):

$$\begin{bmatrix} \nabla f(\boldsymbol{x}_0) \\ -1 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \left(\begin{bmatrix} \boldsymbol{x} \\ y \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_0 \\ f(\boldsymbol{x}_0) \end{bmatrix} \right) = 0 \tag{G.5}$$

Notar també que si $f(\boldsymbol{x})$ és una funció convexa, aleshores (G.5) serà l'hiperplà suport de l'epigràfic de $f(\boldsymbol{x})$ en el punt $\boldsymbol{x}_0$ (veure la figura F.2).

H. Teorema de Taylor per funcions de vàries variables

Si la funció $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ és diferenciable en una regió $\mathcal{D}$ que conté el segment $[\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2]$, aleshores existeix un $0 \leq \lambda \leq 1$ tal que:

$$f(\boldsymbol{x}_2) = f(\boldsymbol{x}_1) + \nabla f(\lambda \boldsymbol{x}_1 + (1-\lambda)\boldsymbol{x}_2)^{\mathrm{T}} (\boldsymbol{x}_2 - \boldsymbol{x}_1) \tag{H.1}$$

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

$$\begin{aligned} f(\boldsymbol{x}_2) = f(\boldsymbol{x}_1) + \nabla f(\boldsymbol{x}_1)^{\mathrm{T}} (\boldsymbol{x}_2 - \boldsymbol{x}_1) + \\ 1/2\, (\boldsymbol{x}_2 - \boldsymbol{x}_1)^{\mathrm{T}} \nabla^2 f(\lambda \boldsymbol{x}_1 + (1-\lambda)\boldsymbol{x}_2)(\boldsymbol{x}_2 - \boldsymbol{x}_1) \end{aligned} \tag{H.2}$$

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

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.