Λογισμος ΙΙ, Βελτιστοποίηση υπο περιορισμούς

Α. Ν. Γιαννακόπουλος
Τμήμα Στατιστικής

Ο.Π.Α

Εαρινό Εξάμηνο 2021

Μέγιστα και ελάχιστα κάτω απο περιορισμούς

Ορισμός

Έστω $f : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ *μια συνάρτηση και* $C \subset \mathbb{R}^d$ *ένα υποσύνολο*

Το σημείο $x_* \in S$ *θα ονομάζεται ελάχιστο της* f *στο* S

$$f(x_*) \le f(x), \ \forall \, x \in S$$

και θα χρησιμοποιούμε τον συμβολισμό

$$f(x_*) = \min_{x \in S} f(x),$$

ή

$$x_* = \arg\min_{x \in S} f(x).$$

Ορισμός

Το σημείο $x^* \in S$ *θα ονομάζεται* ***μέγιστο*** *της* f *στο* S *αν*

$$f(x^*) \geq f(x), \ \ \forall \, x \in S,$$

και θα χρησιμοποιούμε τον συμβολισμό

$$f(x^*) = \max_{x \in S} f(x),$$

ή

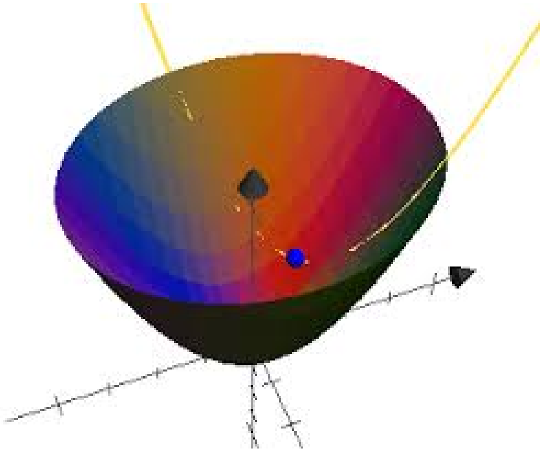
$$x^* = \arg\max_{x \in S} f(x).$$

Παράδειγμα

Πώς συγκρινονται τα $\min_{x\in\mathbb{R}^d} f(x)$ *και* $\min_{x\in S} f(x)$;

Πώς συγκρινονται τα $\max_{x\in\mathbb{R}^d} f(x)$ *και* $\max_{x\in S} f(x)$;

Πιστεύετε οτι ταυτίζεται το ελάχιστο της f *στο* S *με το ελάχιστο της* f *στο* $\mathbb{R}^d$;



Η μέθοδος των πολλαπλασιαστών Lagrange

Ένας συνήθισμένος τρόπος για να ορίσουμε το υποσύνολο $S \subset \mathbb{R}^d$ των περιορισμών είναι να το ορίσουμε μέσω m συναρτήσεων $g_i : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$, $i = 1, \cdots m$, ως

$$S = \{x \in \mathbb{R}^d \;:\; g_i(x) = 0, \;\; i = 1, \cdots, m\}$$

Το πρόβλημα βελτιστοποίησης

$$\min_{x \in S} f(x),$$

στην περίπτωση αυτή γράφεται

$$\begin{aligned} \min_{x \in \mathbb{R}^d} f(x) \\ \text{υπό τους περιορισμούς} \\ g_i(x) = 0, \;\; i = 1, \cdots, m. \end{aligned}$$

Για οποιαδήποτε επιλογή $\lambda = (\lambda_1, \cdots, \lambda_m) \in \mathbb{R}^m$, ορίζουμε την συνάρτηση Lagrange

$$L(x) = f(x) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i g_i(x) = f(x) + \langle \lambda, g(x) \rangle, \ \ \forall\, x \in \mathbb{R}^d.$$

Τα $\lambda = (\lambda_1, \cdots, \lambda_m)$ ονομάζονται πολλαπλασιαστές Lagrange.

Παρατηρούμε οτι αν $x \in S$ τότε $L(x) = f(x)$, εν γένει ομως $L(x) \neq f(x)$

Συνεπώς αν $x_* = \arg\min_{x \in S} f(x)$ τότε και $x_* = \arg\min_{x \in S} L(x)$

Αυτό όμως που είναι πιο σημαντικό είναι οτι αν προσπαθήσουμε να βρούμε το $x_0 = \arg\min_{x \in \mathbb{R}^d} L(x)$ θα ισχυει εν γένει οτι ανάλογα με την επιλογή των λ θα πάρουμε και άλλο σημείο ελαχίστου x_0, $x_0 = x_0(\lambda)$

Αν για κάποια επιλογή του λ, π.χ. $\lambda_* \in \mathbb{R}^m$ ισχύει ότι $x_0(\lambda_*) \in S$, τότε απο την παραπάνω παρατήρηση το $x_0(\lambda_*)$ είναι μια λύση του προβλήματος ελαχιστοποίησης $\min_{x \in S} f(x)$!

Συνδέσαμε λοιπόν μια ολόκληρη οικογένεια λύσεων προβλημάτων βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς, την $x_0(\lambda)$ με την λύση του αρχικού μας προβλήματος με τον περιορισμό x_*, μέσω της σχέσης $x_* = x_0(\lambda_*)$.

Ο παραπάνω συλλογισμός παραμένει ορθός αν με ενδιέφερε να λύσω ένα πρόβλημα μεγιστοποίησης.

Θα μελετήσουμε λοιπόν γενικά το πρόβλημα του να βρω ακρότατα (μέγιστα ή ελάχιστα) για συναρτήσεις d μεταβλητών κάτω απο m περιορισμούς με την μορφή ισότητας.

- Γράφουμε την συνάρτηση Lagrange

$$L(x) = f(x) + \langle \lambda, g(x) \rangle = f(x) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i g_i(x).$$

- Για οποιαδήποτε επιλογή των πολλαπλασιαστών Lagrange $\lambda = (\lambda_1, \cdots, \lambda_m)$ βρίσκουμε τα ακρότατα της συνάρτησης L χωρίς περιορισμούς.

  Αν η L είναι C^1 τα πιθανά ακρότατα θα είναι τα κρίσιμα σημεία της δηλαδή λύσεις της

$$D_x L(x) = D_x f(x) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i D_x g_i(x) = 0.$$

- Μας ενδιαφέρουν οι λύσεις του συστήματος αυτού (που εξαρτώνται απο την επιλογή του λ) για τις οποίες ισχύει και $x \in S$.
- Αυτό δεν θα ισχύει για οποιοδήποτε λ, συνεπώς πρέπει να επιλέξουμε το $\lambda \in \mathbb{R}^m$ με κατάλληλο τρόπο
- Απο τον τροπο που ορίστηκε το S βλέπουμε οτι αυτό προυποθέτει τα (x, λ) να είναι λύσεις του συστήματος

$$D_x L(x) = D_x f(x) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i D_x g_i(x) = 0,$$
$$g_i(x) = 0, \quad i = 1, \cdots, m.$$

- Αυτό είναι ένα σύστημα $d + m$ εξισώσεων με $d + m$ αγνώστους, εν γένει μη γραμμικό, η λύση του οποίου με δινει υποψήφια ακρότατα για το πρόβλημα της εύρεσης των ακροτάτων υπό τους περιορισμούς.

Θεώρημα

Έστω ότι $S = \{x \in \mathbb{R}^d \ : \ g_i(x) = 0, \ \ i = 1, \cdots, m\}$ *όπου* $g_i : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ *και* $f : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ C^1 *συναρτήσεις.*
Ένα ακρότατο της f *σε εσωτερικα σημεία του* S *μπορεί να βρεθεί απο την λύση του συστήματος εξισώσεων*

$$D_x L(x) = D_x f(x) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i D_x g_i(x) = 0,$$
$$g_i(x) = 0, \ \ i = 1, \cdots, m.$$

Παράδειγμα

Ας υποθέσουμε ότι $X_1, \cdots, X_n$ *ανεξάρτητες τυχαίες μεταβλητές με* $\mathbb{E}[X_i] = \mu_i$ *και* $Var(X_i) = \sigma_i^2$.

Βρείτε τους συντελεστές a_i *που ελαχιστοποιούν το* $Var(\sum_{i=1}^n a_i X_i)$ *υπο τον περιορισμό* $\mathbb{E}[\sum_{i=1}^n a_i X_i] = \mu$.

Περιορισμοί με την μορφή ανισοτήτων

Μια πιο γενική μορφή του προβλήματος περιλαμβάνει περιορισμούς με την μορφή ανισοτήτων

$$\begin{aligned} \min_{x\in\mathbb{R}^d} f(x), \\ \text{υπο τους περιορισμούς} \\ g_i(x) = 0, \quad i = 1, \cdots, m, \\ h_j(x) \geq 0 \;\; j = 1, \cdots, k. \end{aligned}$$

Αν στην λύση του προβλήματος x_* ισχύει ότι $h_j(x_*) = 0$ για κάποια $j \in \{1, \cdots, k\}$ θα λέμε ότι οι αντίστοιχοι περιορισμοί ειναι ενεργοί, αλλιώς θα λέμε ότι ειναι ανενεργοί.

Η λύση αυτού του προβλήματος χρησιμοποιεί τις συνθήκες Karush - Kuhn -Tucker

$$L(x) = f(x) + \sum_{i=2}^{m} \lambda_i g_i(x) + \sum_{j=1}^{k} \mu_j h_j(x).$$

Το πιθανό ελάχιστο που ψάχνουμε θα πρέπει να ικανοποιεί τις συνθήκες,

$$\begin{aligned} D_x f(x) + \sum_{i=2}^{m} \lambda_i D_x g_i(x) + \sum_{j=1}^{k} \mu_j D_x h_j(x) = 0, \\ g_i(x) = 0, \;\; i = 1, \cdots, m, \\ h_j(x) \geq 0, \;\; j = 1, \cdots, k, \\ \mu_j h_j(x) = 0, \;\; j = 1, \cdots, k, \\ \mu_j \geq 0, \;\; j = 1, \cdots, k. \end{aligned}$$

Παράδειγμα

Ελαχιστοποιείστε την συνάρτηση

$$f(x_1, x_2) = 2x_1^2 + 2x_1x_2 + x_2^2 - 10x_1 - 10x_2$$

υπο τους περιορισμούς,

$$\begin{gathered} 5 - x_1^2 - x_2^2 - 5 \geq 0, \\ 6 - 3x_1 - x_2 \geq 0. \end{gathered}$$

Οι συνθηκες ΚΚΤ μας δίνουν

...

και έχουμε 4 πιθανές περιπτώσεις

1. Κανένας περιορισμος ενεργός,
2. 1 ενεργός και 2 ανενεργός,
3. 1 ανενεργός και 2 ενεργός,
4. 1 και 2 ενεργοί.

1. $\mu_1 = \mu_2 = 0$ και τότε $x_1 = 0$, $x_2 = 5$ που δεν ικανοποιούν τον περιορισμό.
2. $\mu_2 = 0$, και $x_1 = 1, x_2 = 2, \mu_1 = 1$ (αποδεκτό).
3. $\mu_1 = 0$, και $x_1 = \frac{2}{5}$, $x_2 = \frac{24}{5}$ που ερχεται σε αντίθεση με το ότι ο 1 είναι ανενεργός.
4. Το συστημα είναι αδύνατο.

Συνεπώς υπάρχει μόνο ένα σημείο KKT το $(1, 2)$.

Το θεώρημα πεπλεγμενης συνάρτησης (implicit function theorem)

Θεώρημα

Ας υποθέσουμε ότι $F : \mathbb{R}^{d+1} \to \mathbb{R}$ *είναι μια* C^1 *συνάρτηση.*
Ας υποθέσουμε οτι $(x_{0,1}, \cdots, x_{0,d}, x_{0,d+1})$ *είναι ένα σημείο το οποίο ικανοποιεί τις συνθήκες*

$$F(x_{0,1}, \cdots, x_{0,d}, x_{0,d+1}) = 0,$$
$$\frac{\partial F}{\partial x_{d+1}}(x_{0,1}, \cdots, x_{0,d}, x_{0,d+1}) \neq 0.$$

Θεώρημα «Συνέχεια ...»

Τότε υπάρχει μια γειτονιά U *του σημείου* $(x_{0,1}, \cdots, x_{0,d}, x_{0,d}) \in \mathbb{R}^d$ *και μια γειτονια του σημείου* $x_{0,d+1} \in V$ *και* *μοναδική* *συνάρτηση* $f : U \subset \mathbb{R}^d \to V \subset \mathbb{R}$ *τέτοια ώστε*

$$F(x_1, \cdots, x_d, f(x_1, \cdots, x_d)) = 0, \ \ \forall (x_1, \cdots, x_d) \in U.$$

Η συνάρτηση f *ειναι* C^1 *και*

$$D_{(x_1, \cdots, x_d)} f(x_{(d)}) = -\frac{1}{\frac{\partial F}{\partial x_{d+1}}(x_{(d+1)})} D_{(x_1, \cdots, x_d, x_{d+1})} F(x_{(d+1)}),$$

όπου έχουμε θέσει

$$x_{(d)} = (x_1, \cdots, x_d),$$
$$x_{(d+1)} = (x_1, \cdots, x_d, f(x_1, \cdots, x_d)).$$

Γενίκευση του θεωρήματος πεπλεγμένης συνάρτησης

Θεώρημα

Έστω $F : \mathbb{R}^{m+p} \to \mathbb{R}^m$ *μια* C^1 *και ένα σημείο* $z_0 \in \mathbb{R}^{p+m}$ *για το οποίο ισχύει ότι* $F(z_0) = 0$.

Θα γράψουμε $z = (x, y)$ *όπου* $x \in \mathbb{R}^m$ *και* $y \in \mathbb{R}^p$.

Αν ο πίνακας $J = \left(\frac{\partial F_i}{\partial x_j}(z_0)\right)_{i,j=1,\cdots,m}$, *είναι τάξης* m *(rank* m*) τότε υπάρχει μια γειτονιά του* V *του* $y_0 \in \mathbb{R}^p$ *και* U *του* $x_0 \in \mathbb{R}^m$ *και μια συνάρτηση* C^1 *συνάρτηση* $f : \mathbb{R}^p \to \mathbb{R}^m$ *τέτοια ώστε*

$$F(\phi_1(y), \cdots, \phi_m(y), y_1, \cdots, y_p) = 0.$$

Ένας τροπος ερμηνείας του θεωρήματος αυτού είναι ο ακόλουθος:

Έστω πως έχουμε ένα σύστημα m εξισώσεων με m αγνωστους $x = (x_1, \cdots, x_m)$ και p παραμέτρους $y = (y_1, \cdots, y_p)$, της μορφης

$$F_1(x_1, \cdots, x_m, y_1, \cdots, y_p) = 0,$$
$$\cdots$$
$$F_m(x_1, \cdots, x_m, y_1, \cdots, y_p) = 0.$$

Αν έχουμε βρει μια λύση για την τιμή της παραμέτρου y_0, έστω (x_0, y_0) και ικανοποιειται η συνθήκη για τον πίνακα J, τότε υπάρχει μια ολόκληρη οικογένεια λύσεων για μια γειτονιά V του y_0 και αυτή μπορει να εκφραστεί μέσω μιας διαφορίσιμης συνάρτησης των παραμέτρων ως

$$x_1 = f_1(y_1, \cdots, y_p),$$
$$\cdots$$
$$x_m = f_m(y_1, \cdots, y_p)$$

για κάθε $y \in V$.

Συστήματα της μορφής αυτής εμφανίζονται όταν χρησιμοποιήσουμε την τεχνική των πολλαπλασιαστών Lagrange για την εύρεση ακροτάτων κάτω απο περιορισμούς, οπότε το θεώρημα πεπλεγμένης συνάρτησης είναι πολύ βασικό εργαλείο για να αποδείξουμε το θεώρημα των πολλαπλασιαστών του Lagrange.