فصل۲ – مفاهیم اساسی و ریاضی پشتیبان، قضیه اکستریما (بهینه‌یابی کلاسیک-محلی)

مقدمه

در این فصل، به بررسی ابزار ریاضی در قالب قضایای لازم و کافی می‌پردازیم. برای مأنوس‌شدن ذهن و اخذ ایده‌های اساسی، معمولاً تابع هدف را یک‌متغیره یا حداکثر دومتغیره در نظر می‌گیریم. روش‌های این فصل در مسائل عملی به‌طور محدود عمل می‌کنند، به‌ویژه برای مسائل گسسته که تابع هدف دارای مشتق تحلیلی نباشد. به‌هر حال قضایای مزبور نه‌تنها تشکیل یک انتزاع ذهنی برای پشتیبانی ایده‌ها می‌دهند - آموزنده هستند- بلکه در ترکیب و ابداع روش‌های عددی (مبتنی بر تعریف) و همچنین مانیتورینگ پیشرفت کار و مسیر جستجو، بسیار مؤثّر و سازنده هستند.

تعریف ۱: فرض کنید A یک زیرمجموعه از فضای برداری که در آن نورم تعریف می‌شود باشد. اگر A را بُرد تابع اسکالر f با مقادیر حقیقی فرض کنیم، آنگاه f یک نگاشت از فضای n بعدی $\Re^n$(دامنه تعریف) به فضای $\Re^1$ (تابع اسکالر) خواهد بود. به زبان ساده، f یک تابع یکنوای چندمتغیره است.

قضیهٔ ۱ (اکسترمم محلیWeirstrass) - هر تابع که در یک بازهٔ بسته، یکنواخت باشد، دارای مقادیر مینیمم و ماگزیمم چه در داخل و چه روی مرز دامنه متغیرهای مستقلش می‌باشد. بیان دیگر این قضیه مطابق آنالیز استاندارد به شرح زیر است.

> فانکشن(تابع) f دارای یک ماگزیممِ (مینیممِ) نسبی (local, relative) در $\underline{\alpha}$ (یک عنصر یا نقطه یا بردار از دامنهٔ X) است، اگر و تنها اگر وجود داشته‌باشد یک عدد حقیقی مثل δ به‌طوری‌که برای $\underline{x}$ (یک عنصر یا نقطه یا بردار نوعی و نمونه از X) در همسایگی $\underline{\alpha}$ (یعنی فاصلهٔ $\underline{x}$ تا $\underline{\alpha}$ به شعاع کمتر از δ باشد و به زبان هندسی $\|\underline{x}-\underline{\alpha}\| \prec \delta$) داشته باشیم:
>
> برای مینیمم: $f(\underline{x}) \ge f(\underline{\alpha})$ و ماگزیمم: $f(\underline{x}) \le f(\underline{\alpha})$

اگر این شرط برای تمام مقادیر $\underline{x}$ در X (عالم مقال- Universe of discourse) باشد، آنگاه نقطهٔ مزبور یک اِکسترمُم مطلق(global, absolute) است. در شکل (۱) مفاهیم اخیرالذکر بیان شده‌اند. قابل ذکرست که تمامی روش‌های غیرمستقیم و کلاسیک (البتّه بهینه‌یابی نامقید) از همین تعریف ۱ یا قضیهٔ سادهٔ یکنواختی (قضیهٔ ۱) استفاده می‌کنند.

برای مأنوس‌شدن ذهن، حالت یک متغیّره را در نظر گرفته و شرط لازم را برای آن اثبات می‌کنیم. قضیه (شرط لازم) اِکستریمای نسبی برای حالت یک‌متغیّره عبارتست از:

اگر فانکشن(تابع) $f(x)$ در فاصله $a \le x \le b$ تعریف شده‌باشد و دارای یک مینیمم در $x = x^*$ باشد به‌طوری‌که $a \prec x^* \prec b$ (به علامت اکیداً نامساوی دقت کنید) و همچنین مشتق مرتبه اول $f'(x) \overset{\Delta}{=} df(x)/dx$ در این فاصله وجود داشته باشد (یعنی در هر نقطه مقدار معینی داشته باشد)، آنگاه $f'(x^*) = 0$.

اثبات: طبق تعریف مشتق،

$$f'(x^*) = \lim_{\delta \to 0} \frac{f(x^* + \delta) - f(x^*)}{\delta}$$

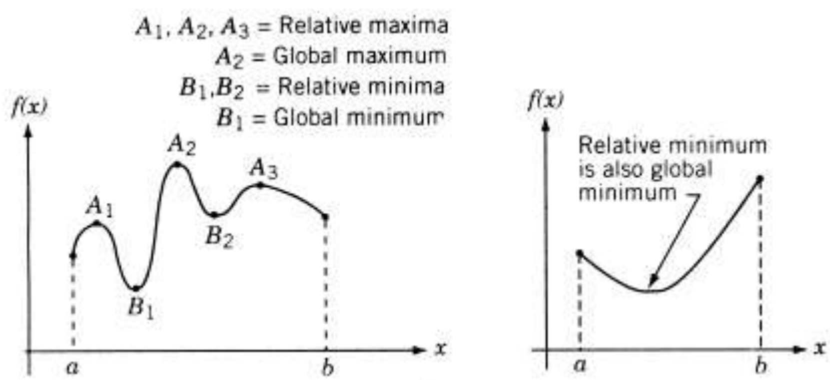
از آنجایی‌که x^* یک مینیمم نسبی می‌باشد، طبق تعریف داریم:

$$f(x^*) \le f(x^* + \delta) \quad \text{(برای } \delta \text{ های به‌اندازه کافی کوچک)}$$

در نتیجه برای دو حالت δ مثبت و δ منفی، تعریف مشتق به‌شکل زیر تعیین علامت می‌شود:

$$\frac{f(x^*+\delta)-f(x^*)}{\delta} \geq 0 \quad if \quad \delta \succ 0$$
$$\frac{f(x^*+\delta)-f(x^*)}{\delta} \leq 0 \quad if \quad \delta \prec 0$$

حال با توجه به تعریف مشتق، باید مقدار $f'(x^*)$ وقتی δ به‌سمت صفر (از سمت راست صفر) می‌رود، مقدار مثبتی باشد، یعنی $f'(x^*) \geq 0$ ، در حالی‌که اگر δ به‌سمت صفر از سمت چپ به صفر نزدیک شود باید مقدار مشتق مقدار منفی‌ای اختیار کند، یعنی $f'(x^*) \leq 0$. تنها حالتی که ممکنست هر دو حالت اخیرالذکر (برای δ آزاد) را ارضاء کند حالت $f'(x^*) = 0$ می‌باشد. $\therefore$



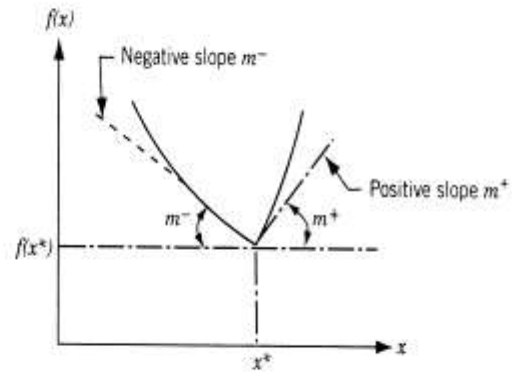
شکل ۱ . اکسترمم محلی و مطلق برای یک تابع هدف یک‌متغیرهٔ نمونه.

نکته ۱: این قضیه را به‌همین ترتیب می‌توان برای حالت ماگزیمم نیز اثبات کرد.

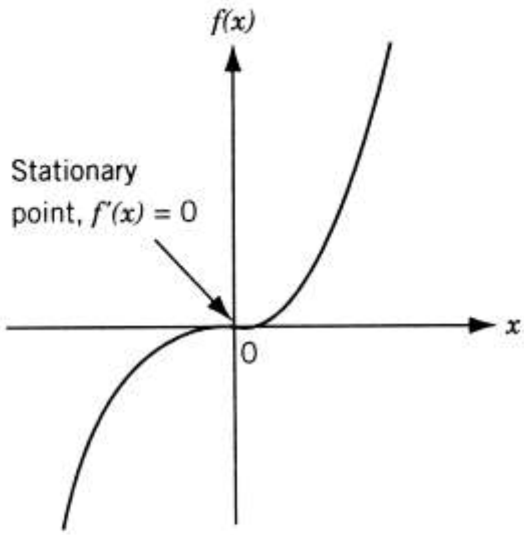
نکته ۲: قضیه فوق‌الذکر وقتی مشتق وجود ندارد قابل استفاده نیست، نظیر عدم تساوی مشتق راست و چپ یا حالت جدایش (bifurcation) (در شکل (۲) نشان داده شده‌است) یا توابع ناپیوسته و/یا گسسته.

نکته ۳: قضیه برای حالاتی‌که مینیمم یا ماگزیمم در مرزها اتّفاق می‌افتد گویا نیست. علّت امر اینست که تعریف مشتق برای هرکدام از نقاط ابتدایی و انتهایی فقط به‌صورت مشتق راست (برای نقطه سمت چپ یا ابتدایی) یا فقط به‌صورت مشتق چپ (برای نقطه سمت راست یا انتهایی) برقرارست.

نکته ۴: قضیه فوق یک شرط لازمست و این بدان معنیست که اگر $f'(x^*) = 0$ باشد الزاماً به‌مفهوم یافتن مینیمم یا حتّی ماگزیمم نیست. به‌طور مثال (شکل (۳))، مقدار $f'(x)$ در $x = 0$، صفر شده‌است ولی مبدأ نه مینیمم است و نه ماگزیمم. به‌طور کلی اگر در هر نقطه‌ای مثل x^* ، مقدار مشتق صفر شود موسوم به نقطه ایستا یا عطف (Stationary, Inflection) می‌باشد.



شکل۲ . عدم تساوی مشتق راست و چپ.



شکل۳ . نمایش نقطه ایستا یا عطف.

حال اگر یک سطح بالاتر از تفکر پیشین جلوتر رویم و سعی در پرهیز از تکرار موجود در تعریف مزبور داشته‌باشیم، نیاز به روابطی یا به زبان ریاضی، قضایا و شرایط لازم و کافی داریم که به خصوصیات f ربط داشته‌باشند.

قضیه ۲، شرط لازم (بهگزینی نامقید) - یک تابع n متغیرهٔ پیوسته، دارای مینیمم یا ماگزیمم درون ناحیه‌ای که متغیّرهای مستقل تعریف شده‌اند، می‌باشد به‌شرطی‌که مشتقّات پاره‌ای مرتبه n ام در آن نقاط همگی صفر باشند (نقاط ایستا، تعادل) یا حداقل یکی یا بیشتر از مشتقات پاره‌ای دارای مقدار باشند.

به‌بیان سادهٔ ریاضی، شرط لازم برای اینکه $\underline{\alpha}$، یک اکسترمم تابع $f(\underline{x})$ به‌طور نسبی (محلی، داخلی، موضعی) باشد، این‌است که دیفرانسیل کامل $f(\underline{x})$ صفر باشد، یعنی $df(\underline{\alpha}) = 0$ باشد. نمایش بستهٔ قضیهٔ فوق، به‌صورت تحلیلی به شکل زیر است:

$$\left.\frac{\partial f(\underline{x})}{\partial \underline{x}}\right|_{\underline{x}=\underline{\alpha}} = \underline{0} \qquad (۱)$$

یا به‌صورت اندکسی و باز:

$$\begin{cases} \left.\dfrac{\partial f(\underline{x})}{\partial x_1}\right|_{\underline{x}=\underline{\alpha}} = 0 \\ \vdots \\ \left.\dfrac{\partial f(\underline{x})}{\partial x_n}\right|_{\underline{x}=\underline{\alpha}} = 0 \end{cases} \qquad (۲)$$

یا به‌صورت هندسی و برداری:

$$\vec{\nabla} f = \underline{0} \qquad (۳)$$

به‌طوریکه اپراتور $\vec{\nabla}$،بردار n بعدی (n مؤلفه‌ای) گرادیان است.

یا به‌صورت نمایش تانسوری:

$$\left.\frac{\partial f\ (\underline{x})}{\partial x_i}\right|_{\underline{x}=\alpha}=0 \tag{۴}$$

در حالت یک‌متغیّره روابط اخیر به‌شکل ساده و خلاصهٔ مشتق مساوی صفر خواهد بود:

$$\frac{df\,(x)}{dx}=0 \tag{۵}$$

در ادامهٔ معرفی قضایا می‌خواهیم شرط کافی (برای مسائل نامقید) که همان ارزیابی است (در مقابل شرط لازم که یافتن است) به شکل یک قضیهٔ کلّی بیان کنیم. برای این‌کار (اثبات شرط کافی) یک‌بار مسئله را یک‌متغیّره (متغیر مستقل) و یک‌بار دومتغیّره فرض می‌کنیم.

شرایط کافی برای ارزیابی اکسترمم توابع اِسکالر یک‌متغیره : فرض کنید تابع $y=f(x)$ دردست می‌باشد و $x_\circ$ یک نقطهٔ اکسترمم (کاندیدا) باشد. بسط تیلور (ژاکوبین) تابع حول نقطهٔ $x_\circ$ عبارتست از:

$$y(x)=y(x)\big|_{x=x_\circ}+\left.\frac{dy}{dx}\right|_{x=x_\circ}(x-x_\circ)+\frac{1}{2!}\left.\frac{d^2y}{dx^2}\right|_{x=x_\circ}(x-x_\circ)^2+Higher\ Order\ Terms \tag{۶}$$

حال x را آنقدر نزدیک به $x_\circ$ بگیرید تا بتوان با تقریب خوب از جملات بالاتر صرف‌نظر کرد:

$$y(x)\cong y(x)\big|_{x=x_\circ}+\left.\frac{dy}{dx}\right|_{x=x_\circ}(x-x_\circ)+\frac{1}{2!}\left.\frac{d^2y}{dx^2}\right|_{x=x_\circ}(x-x_\circ)^2 \tag{۷}$$

چون $x_\circ$ نقطهٔ اکسترمم است، عبارت مشتق در جمله دوم معادل صفراست، لذا:

$$y(x)\cong y(x)\big|_{x=x_\circ}+\frac{1}{2!}\left.\frac{d^2y}{dx^2}\right|_{x=x_\circ}(x-x_\circ)^2 \tag{۸}$$

به جمله دوم سمت راست دقت کنید. مقدار عددی $\frac{1}{2}$ و $(x-x_\circ)^2$ همواره مثبت هستند، لذا در همسایگی $x_\circ$ مقدار $y(x)$ نسبت به $y(x_\circ)$ بستگی به جمله دوم و به‌عبارت دقیق‌تر بستگی به علامت مشتق دوم دارد، یعنی مطابق تعریف، برای اینکه بفهمیم آیا مقدار تابع در نقطهٔ نمونهٔ x بزرگتر از مقدار تابع در $x_\circ$ است ($x_\circ$ مینیمم است) یا کوچکتر ($x_\circ$ ماگزیمم است)، باید از روی علامت $\left.\frac{d^2y}{dx^2}\right|_{x=x_\circ}$ قضاوت کنیم:

$$if\quad \left.\frac{d^2y}{dx^2}\right|_{x=x_\circ}\succ 0\qquad \text{(مشتق دوم مثبت)}\quad\Rightarrow\ y(x_\circ)\ \text{مینیمم است}$$

$$if\quad \left.\frac{d^2y}{dx^2}\right|_{x=x_\circ}\prec 0\qquad \text{(مشتق دوم منفی)}\quad\Rightarrow\ y(x_\circ)\ \text{ماگزیمم است}$$

$$if\quad \left.\frac{d^2y}{dx^2}\right|_{x=x_\circ}=0\qquad \text{(مشتق دوم صفر)}\quad\Rightarrow\ \text{نمی‌توان قضاوتی کرد}$$

حالت سوم، یعنی وقتی مشتق مرتبه دوم در نقطهٔ کاندیدای $x_\circ$، معادل صفر شده‌باشد، آنگاه نمی‌توان قضاوتی کرد. درصورت مواجهه با چنین حالتی، باید مشتق مرتبهٔ سوم را در نظر بگیریم، چون $y(x)$ را تقریب زده‌ایم و الزاماً تا مرتبهٔ

دوم دقیق نیست. به‌هرحال اگر مشتق سوم نیز صفر شد، باید یک مرتبه بالاتر را درنظرگرفت و قس علیهذا. برای بیان حکم کلی، فرض کنید تا n مرتبه مشتق می‌گیریم و مرتبه n امی صفر نشد، یعنی

$$\begin{cases} \left.\dfrac{d^2y}{dx^2}\right|_{x=x_\circ} = \left.\dfrac{d^3y}{dx^3}\right|_{x=x_\circ} = \cdots = \left.\dfrac{d^{n-1}y}{dx^{n-1}}\right|_{x=x_\circ} = 0 \\ \left.\dfrac{d^ny}{dx^n}\right|_{x=x_\circ} \neq 0 \end{cases}$$

آنگاه $y(x)$ را حول نقطهٔ $x_\circ$، به‌شکل زیر تقریب زده‌ایم:

$$y(x) \cong y(x)\big|_{x=x_\circ} + \frac{1}{n!}\left.\frac{d^ny}{dx^n}\right|_{x=x_\circ}(x-x_\circ)^n$$

در دو حالت n زوج و n فرد، مسئله را باید بررسی کنیم:

🡐وقتی n زوج باشد، در آن‌صورت عبارت $(x-x_\circ)^n$ ، فارغ از اینکه x از سمت چپ یا راست به $x_\circ$ نزدیک شود، همیشه مثبت است، در نتیجه معیار انحراف از $y(x_\circ)$ فقط علامت مشتق مرتبه n ام می‌باشد، یعنی:

$$if \quad \left.\frac{d^ny}{dx^n}\right|_{x=x_\circ} \succ 0 \qquad \Rightarrow \quad \text{مینیمم است } y(x_\circ)$$

$$if \quad \left.\frac{d^ny}{dx^n}\right|_{x=x_\circ} \prec 0 \qquad \Rightarrow \quad \text{ماگزیمم است } y(x_\circ)$$

🡐حال اگر n فرد باشد، آنگاه علامت عبارت انحراف از $y(x_\circ)$، بستگی به جهت نزدیک‌شدن x به $x_\circ$ دارد، لذا $x_\circ$ یک نقطهٔ عطف خواهدبود.

به‌عبارت خلاصه، قضیهٔ شرط کافی (ارزیابی) برای توابع هدف یک‌متغیره به‌شکل زیر خواهد بود.

قضیه ۳ شرط کافی توابع اسکالر یک‌متغیره نامقید- اگر در یک نقطه‌ای، مشتق اول تابع و چند مشتق مرتبه بالاتر صفر شوند، آنگاه بسته به شرایط زیر، آن نقطه یا نقطهٔ اکسترمم (مینیمم یا ماگزیمم) است یا نقطهٔ عطف (سراب اکسترمم !) ، اگر درجهٔ مشتقِ غیرصفر فرد باشد (به‌جز مشتق مرتبه ۱) ، آنگاه آن نقطه یک نقطهٔ عطف است (نباید فریب خورد !) ولی اگر زوج است، آنگاه با یک نقطهٔ اکسترممی روبرو هستیم که علامت مشتقِ غیرصفرِ زوج تابع هدف در آن نقطه گویای ماگزیمم‌بودن یا مینیمم‌بودن آن می‌باشد.

مثال ۱. نقاط اکسترمم تابع زیر را پیداکرده و آنها را ارزیابی کنید.

$$y(x) = \frac{x^4}{4} - \frac{x^2}{2}$$

حل شرط لازم، عبارتست از صفرقراردادن مشتق مرتبه اول و حل معادله مربوطه:

$$\frac{dy}{dx} = x^3 - x = x(x^2-1) = 0 \qquad \Rightarrow$$

نقاط کاندیدا عبارتند: $x = 0 \;\; , \;\; 1 \;\; , \;\; -1$

برای ارزیابی این نقاط از شرط کافی استفاده می‌کنیم.

$$\frac{d^2y}{dx^2}=3x^2-1 \qquad \Rightarrow$$

$at \quad x^*=0 \quad \Rightarrow \quad y''(0)=-1$ $x^*=0$ نقطه ماگزیمم است.

$at \quad x^*=1 \quad \Rightarrow \quad y''(1)=2$ $x^*=1$ نقطه مینیمم است.

$at \quad x^*=-1 \quad \Rightarrow \quad y''(-1)=2$ $x^*=-1$ نقطه مینیمم است.

مثال ۲. نقاط اکسترمم تابع زیر را پیداکرده و آنها را ارزیابی کنید:

$$y(x)=x^5$$

حل: برای محاسبه اکسترمم، باید معادله مشتق مرتبه اول معادل صفر را حل کنیم:

$$\frac{dy}{dx}=5x^4=0 \qquad \Rightarrow \quad x^*=0$$

برای ارزیابی این نقطه باید مشتق مرتبه دوم را امتحان کنیم:

$$\left.\frac{d^2y}{dx^2}\right|_{x=0}=20x^3\Big|_{x=0}=0 \quad \Rightarrow$$

چون مقدار مشتق در نقطهٔ کاندیدا صفر شده، نمی‌توان قضاوتی انجام داد و مجبور به مشتق‌گیری مجدّد هستیم و درصورت تکرار این حالت می‌بایست مشتق‌گیری را ادامه دهیم تا به یک مقدار غیرصفر برسیم:

$$\left.\frac{d^3y}{dx^3}\right|_{x=0}=60x^2\Big|_{x=0}=0 \quad \Rightarrow$$ نمی‌توان قضاوتی کرد.

$$\left.\frac{d^4y}{dx^4}\right|_{x=0}=120x\Big|_{x=0}=0 \quad \Rightarrow$$ نمی‌توان قضاوتی کرد.

$$\left.\frac{d^5y}{dx^5}\right|_{x=0}=120\succ 0 \quad \Rightarrow$$ $n=5 \quad \Rightarrow$ فرد می‌باشد.

پس مبدأ (نقطه $x^*=0$)، اصلا" نقطهٔ اکسترمم نمی‌باشد، بلکه یک نقطهٔ عطف است.

قضیه ۴: شرایط کافی برای ارزیابی اکسترمم توابع اسکالر دو متغیره نامقیّد (آنالیز کلاسیک)- اگر تابع دو متغیّره را حول نقطه کاری $\underline{x}_\circ$ بسط تیلور دهیم:

$$y(x_1,x_2)=y(x_1,x_2)\big|_{\underline{x}=\underline{x}_\circ}+\left.\frac{\partial y}{\partial x_1}\right|_{\underline{x}=\underline{x}_\circ}(x_1-x_{1,\circ})+\left.\frac{\partial y}{\partial x_2}\right|_{\underline{x}=\underline{x}_\circ}(x_2-x_{2,\circ})+$$

$$\frac{1}{2}\left\{\left.\frac{\partial^2 y}{\partial x_1^2}\right|_{\underline{x}=\underline{x}_\circ}(x_1-x_{1,\circ})^2+2\left.\frac{\partial^2 y}{\partial x_1\partial x_2}\right|_{\underline{x}=\underline{x}_\circ}(x_1-x_{1,\circ})(x_2-x_{2,\circ})+\left.\frac{\partial^2 y}{\partial x_2^2}\right|_{\underline{x}=\underline{x}_\circ}(x_2-x_{2,\circ})^2\right\}+HOT$$

به‌طوریکه $\underline{x}\equiv\begin{bmatrix}x_1 & x_2\end{bmatrix}^T$ دوباره مثل قبل از جملات بالاتر صرف‌نظرکرده و شرط لازم (مشتقّات اوّل معادل صفر) را اِعمال می‌کنیم و به فرم بسته‌تری (نمایش ماتریسی) تابع را تقریب می‌زنیم:

$$y(x_1,x_2)=y(x_1,x_2)\big|_{\underline{x}=\underline{x}_\circ}+0+\frac{1}{2}\begin{bmatrix}(x_1-x_{1,\circ}) & (x_2-x_{2,\circ})\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\frac{\partial^2 y}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 y}{\partial x_1\partial x_2}\\ \frac{\partial^2 y}{\partial x_2\partial x_1} & \frac{\partial^2 y}{\partial x_2^2}\end{bmatrix}_{\underline{x}=\underline{x}_\circ}\begin{bmatrix}(x_1-x_{1,\circ})\\ (x_2-x_{2,\circ})\end{bmatrix} \qquad (۹)$$

یا باز هم بسته‌تر:

$$y(\underline{x}) = y(\underline{x}_\circ) + \underbrace{\frac{1}{2}(\underline{x}-\underline{x}_\circ)^T H_\circ (\underline{x}-\underline{x}_\circ)}_{Differential\ Quadratic Form} \tag{۱۰}$$

دوباره همان مفهوم مثبت و منفی داریم. ولی در این حالت (دو متغیره) باید مفهوم مثبت و منفی را تعمیم دهیم. لذا، مختصری از جبر خطی، بخش فرم‌های مجذوری در اینجا آورده می‌شود.

فرم‌های مجذوری نمایش فرم‌های مجذوری در هر دو حالت جبری و ماتریسی به شکل زیر است:

$$Q(A,\underline{x}) = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_i x_j = \underline{x}^T A \underline{x} \tag{۱۱}$$

به‌طوریکه a_{ij} یک عنصر نمونه از ماتریس متقارن A می‌باشد (یعنی $a_{ij}=a_{ji}$). می‌خواهیم بدانیم تحت چه شرایطی مقدار $Q(A,\underline{x})$ **مستقل** از علامات عناصر $\underline{x}$ همیشه مثبت است یا منفی. می‌توان نشان داد علامت $Q(A,\underline{x})$ بستگی به علامت ماینورهای اصلی (دترمینانهای ماتریس A و افرازهای آن) دارد. اگر ماینور i ام را به شکل زیر نمایش دهیم:

$$D_i = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1i} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2i} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{i1} & a_{i2} & \cdots & a_{ii} \end{vmatrix} \quad , \quad D_1 = |a_{11}| = a_{11}\ ,\ D_n = \det(A) \tag{۱۲}$$

آنگاه

$$if\ \ D_i \succ 0\ \ for\ i=1,2,3,\cdots,n\ ,\ then\ \ A \text{ is Positive Definite or } Q(A,\underline{x}) \succ 0 \tag{۱۳}$$

$$if \begin{cases} D_i \prec 0\ \ for\ i=1,3,5,\cdots\ AND \\ D_i \succ 0\ for\ i=2,4,6,\cdots \end{cases} \quad then\ A \text{ is Negative Definite or } Q(A,\underline{x}) \prec 0 \tag{۱۴}$$

نکته ۵: لازم به‌ذکرست که همین شرایط، برحسب مقادیر ویژه (به‌جای ماینورهای اصلی) نیز قابل بیانست. یعنی اگر مقادیر ویژه ماتریس ضرائب همگی مثبت باشند آنگاه ماتریس مربوطه اصطلاحاً اکیداً مثبت بوده و فرم مجذوری اسکالر همیشه مقدار مثبت خواهد داشت. دقّت شود اگر هیچکدام از شرایط بالا برقرار نباشد، آنگاه نمی‌توان قضاوتی برای علامت همیشگی $Q(A,\underline{x})$ کرد و ازاین‌رو علامت $Q(A,\underline{x})$ تابع علامت عناصر ماتریس A می‌شود.

قضیه ۵ شرایط کافی برای ارزیابی اکسترمم نامقیّد توابع چندمتغیّره

اگر $y(\underline{x})$ و همچنین دو مشتق پاره‌ای مرتبه اول و دوم پیوسته باشند، آنگاه یک شرط کافی برای‌اینکه $y(\underline{x})$ دارای مینیمم (یا ماگزیمم) نسبی در $\underline{x}_\circ$ باشد (یعنی $\left.\partial y/\partial \underline{x}\right|_{\underline{x}=\underline{x}_\circ}=0$) اینست که ماتریس هسیان آن در $\underline{x}_\circ$ ، مثبت معین (یا منفی معین) باشد.

خلاصه این بخش: تابه‌حال دو قضیه از آنالیز Exterema که در روش‌های ریاضی (روش‌های غیرمستقیم و یا مبتنی بر قضیه) کاربرد دارند آموخته‌ایم:

شرط لازم (یافتن): مشتق اول = 0

شرط کافی (ارزیابی):

$$\begin{cases} if\ \ H_\circ \succ 0 \rightarrow \underline{x}_\circ\ is\ minimum \\ if\ \ H_\circ \prec 0 \rightarrow \underline{x}_\circ\ is\ maximum \end{cases}$$

مثال ۳ . فرآیند ساده زیر را در نظر بگیرید. خوراک هیدروکربنی با جریان برگشتی مخلوط شده و قبل از ورود به راکتور کاتالیستی کمپرس می‌شود. محصول و مواد واکنش‌نداده توسط برج تقطیر جدا می‌شوند (مواد واکنش‌نداده برگشت داده می‌شوند). فشار P برحسب psi و نسبت برگشتی R باید طوری انتخاب شوند تا هزینه تولید سالیانه 10^7 پوند محصول مینیمم شود. اقلام زیر هزینه تولید شامل تامین خوراک در فشار P معادل $1000P$ دلار است و برای مخلوط‌شدن تا رسیدن به ورودی راکتور نیز معادل $4\times10^9/RP$ می‌باشد. هزینه جداسازی نیز سالیانه $10^5 R$ دلار و هزینه برگشت[1] مواد نیز سالیانه $1.5\times10^5 R$ دلار می‌باشد.

حل: ابتدا تابع هدف را فرموله می‌کنیم:

$$C(\$/yr)=1000P+4\times10^9/RP+2.5\times10^5 R$$: تابع هدف (مدل اقتصادی)

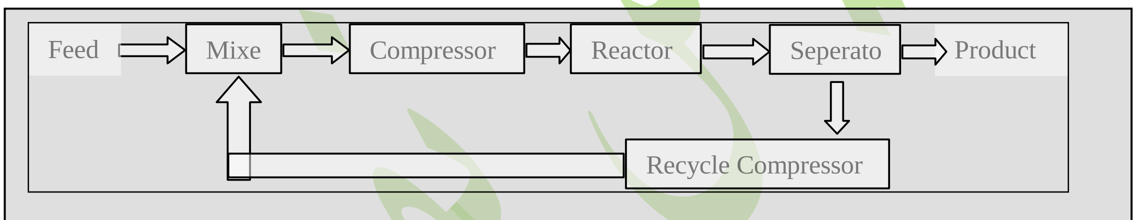
مسئله دارای دو متغیر مستقل P و R، موسوم به متغیّرهای تصمیم‌گیری می‌باشد. نکته قابل توجّه در شکل تابع هدف، وجود جملاتی از متغیّرهای مستقل در مخرج می‌باشد. و این نشانگر وجود نوعی جاذبه- دافعه یا push-pull می‌باشد. لذا، به‌طور حسّی نیز می‌توان دریافت که حداقل یک مقدار بهینه نسبی و نه در مرزها خواهیم داشت.

شرط لازم را برای یافتن نقطه (نقاط) بهینه می‌نویسیم:

$$\begin{cases}\partial C/\partial P=0\\ \partial C/\partial R=0\end{cases}\Rightarrow\begin{cases}1000-4\times10^9/RP^2=0\\ 2.5\times10^5-4\times10^9/PR^2=0\end{cases}\Rightarrow$$

حل همزمان

$$P=1000\,psi\quad,\quad R=4\quad\Rightarrow\quad C=3\times10^6\ \$/yr$$



شکل ۴. نمودار شماتیک جریان برای مثال فرآیندی.

در ادامه شرایط کافی را جهت ارزیابی می‌نویسیم:

$$@\ P=1000\ \ \&\ \ R=4\ \rightarrow\ \begin{cases}\partial^2C\big/\partial P^2=2\succ0\quad AND\\ \begin{vmatrix}2 & 10^3/4\\ 10^3/4 & 10^6/8\end{vmatrix}=3\times10^6/16\succ0\end{cases}$$

لذا، شرایط $R=4$ و $P=1000\,psi$ ، منجر به مقدار بهینه مینیمم می‌شود.

حالت نیمه معیّن و نقطه زین‌اسبی در حالت استثنایی ممکنست ماتریس هسیان در نقطه اکسترمم مساوی یا نزدیک صفر شود. به عبارت دقیق‌تر ماتریس هسیان نیمه مثبت یا نیمه منفی شود. علامت نیمه معیّن وجود دترمینان ماینور یا مقدار ویژه نزدیک به صفر می‌باشد. در حالت یک متغیّره این مسئله به‌طور کامل از طریق مشتقات مراتب بالاتر بحث و حلّ شد. در حالت چندمتغیره محاسبات ریاضی بسیار پیچیده و وقت‌گیر خواهد بود و لذا در مسائل عملی گرچه ندرتاً اتفاق می‌افتد ولی شگرد آن استفاده از تعریف مینیمم یا ماگزیمم است، بدین صورت که با تهییج و اغتشاش کوچک در متغیرهای اصلی مسئله رفتار تابع بررسی شده و رأی به ماگزیمم یا مینیمم‌بودن داده می‌شود.

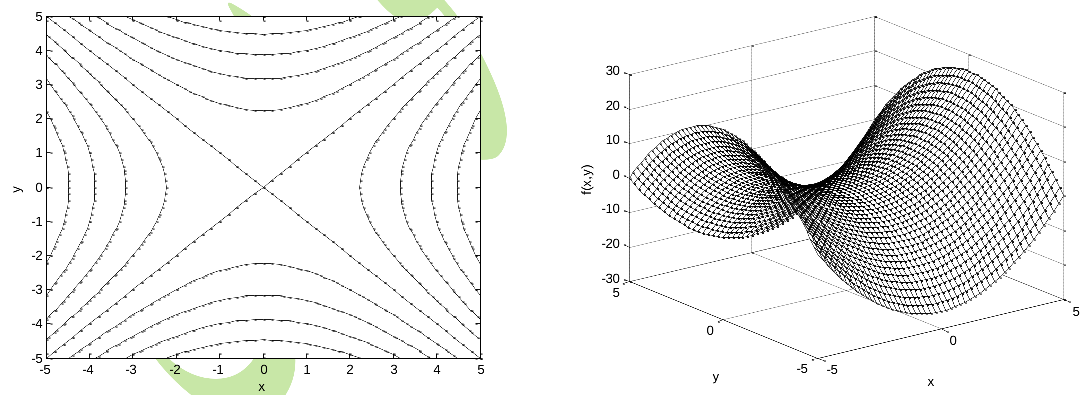
[1] Back-pump

نکته جالبی که فقط برای مسائل چندمتغیره ممکنست رخ دهد حالتیست که ماتریس هسیان نه مثبت (نیمه) معین باشد و نه منفی (نیمه) معین. اصولا در بحث ماتریس‌ها برخلاف حالت یک‌بُعدی، بحث منفی‌بودن و مثبت‌بودن یک مفهوم متناقض نیستند و بلکه متضاد هستند، یعنی در حالت چندمتغیّره ماتریس هسیان در نقطه اکسترمم ممکنست نه مثبت و نه منفی معین باشد. در حالت دومتغیّره این خاصیت ماتریس هسیان شکل جالبی دارد و موسومست به حالت یا نقطه زین‌اسبی. به‌طور مثال تابع $f(x,y)=x^2-y^2$ را درنظر بگیرید . نقطه اکسترمم از حل دستگاه جبری دومعادله- دو مجهول زیر به‌دست می‌آید:

$$\frac{\partial f}{\partial x}=2x=0 \quad , \quad \frac{\partial f}{\partial y}=2y=0$$

حل دستگاه همان مبدا مختصات می‌باشد، یعنی $x^*=0\,,\,y^*=0$. ماتریس هسیان در این نقطه به‌صورت $H\big|_{(0,0)}=\begin{bmatrix}2 & 0\\ 0 & -2\end{bmatrix}$ محاسبه می‌شود.

همان‌طور که معلومست ماتریس هسیان در مبدا نه مثبت معین است و نه منفی معین. در این حالت می‌توان گفت که نقطه مبدأ هم مینیمم است و هم ماگزیمم ! و به همین خاطر معروف به نقطه میناماکس یا زین اسبی می‌باشد. وجه تسمیه این نام‌گذاری به‌طور ریاضی معلومست. کافیست یکی از متغیرها را فیکس گرفته و رفتار تابع هدف را مورد بررسی قرار دهیم. مشاهده می‌کنیم که نقطه اکسترمم در یک حالت فیکس (ازیک متغیر) مینیمم محسوب می‌شود در حالی‌که اگر متغیر دیگر را فیکس بگیریم همان اکسترمم نقطه ماگزیمم می‌شود و بالعکس. رفتار تابع هدف فوق‌المذکور در شکل (۵) نشان داده شده است. نقطه زین اسبی، سرآغاز مبحث تئوریک معروفی در مسائل بهینه‌سازی موسوم به تئوری بازی‌ها (Game Theory) می‌باشد که از حوصله این مقال خارج است.



شکل۵ . نمایش نقطه زین‌اسبی برای تابع $f(x,y)=x^2-y^2$ ، رویه (سمت راست) و منحنیهای تراز (سمت چپ).

مثال ۴. نقاط اکسترمم تابع زیر را پیداکرده و آنها را ارزیابی کنید:

$$f(x_1,x_2)=x_1^3+x_2^3+2x_1^2+4x_2^2+6$$

شرایط لازم برای وجود نقطه (نقاط) اکسترمم عبارتند از:

$$\begin{cases}\dfrac{\partial f}{\partial x_1}=3x_1^2+4x_1=x_1(3x_1+4)=0\\[2mm] \dfrac{\partial f}{\partial x_2}=3x_2^2+8x_2=x_2(3x_2+8)=0\end{cases}$$

ریشه‌های دستگاه فوق عبارتند از: $(0,0)\quad,\quad(0,-8/3)\quad,\quad(-4/3,0)\quad,\quad(-4/3,-8/3)$

برای ارزیابی نقاط اکسترمم ماتریس هسیان را تشکیل داده و طبیعت آن را در نقاط مربوطه بررسی می‌کنیم:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} = 6x_1 + 4 \\ \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_2^2} = 6x_2 + 8 \end{cases} \Rightarrow H = \begin{bmatrix} 6x_1+4 & 0 \\ 0 & 6x_2+8 \end{bmatrix} \Rightarrow H_1 = |6x_1+4| \, , H_2 = \begin{vmatrix} 6x_1+4 & 0 \\ 0 & 6x_2+8 \end{vmatrix}$$

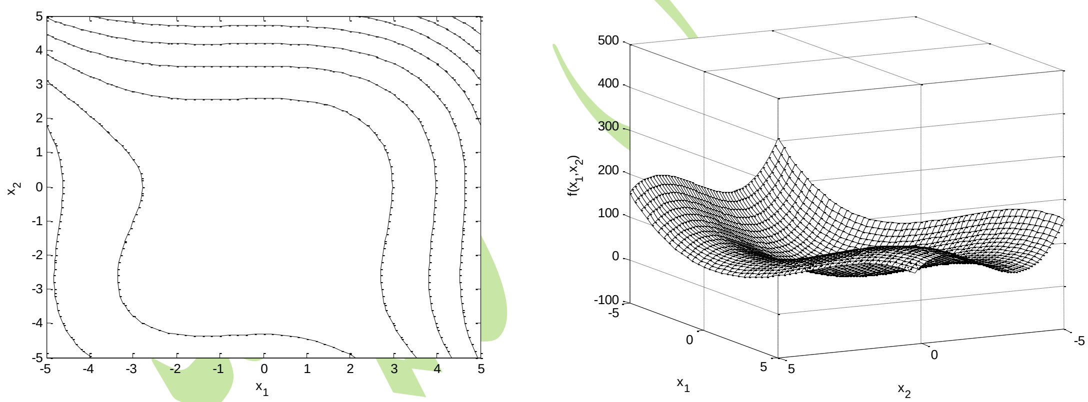
رفتار تابع هدف در شکل (۶) نشان داده شده و نتایج ارزیابی به‌طور خلاصه در زیر آمده‌است:

$$at\ (0,0): H_1 = +4 \,\&\, H_2 = +32 \Rightarrow H: Positive\ Def. \Rightarrow (0,0)\ is\ relative\ min. \,\&\, f(0,0) = 6$$

$$at\ (0,-\frac{8}{3}): H_1 = +4 \,\&\, H_2 = -32 \Rightarrow H: Indefinite \Rightarrow (0,-\frac{8}{3})\ is\ Saddle\ Point \,\&\, f(0,-\frac{8}{3}) = \frac{418}{27}$$

$$at\ (-\frac{4}{3},0): H_1 = -4 \,\&\, H_2 = -32 \Rightarrow H: Indefinite \Rightarrow (-\frac{4}{3},0)\ is\ Saddle\ Point \,\&\, f(-\frac{4}{3},0) = \frac{194}{27}$$

$$at\ (-\frac{4}{3},-\frac{8}{3}): H_1 = -4 \,\&\, H_2 = +32 \Rightarrow H: Negative\ Def. \Rightarrow (-\frac{4}{3},-\frac{8}{3})\ is\ relative\ max. \,\&\, f(-\frac{4}{3},-\frac{8}{3}) = \frac{50}{3}$$



شکل۶ . نمایش نقطه زین‌اسبی برای مثال۴، رویه (سمت راست) و منحنیهای تراز (سمت چپ).

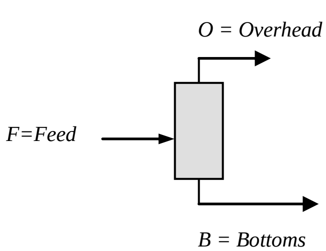
روش‌های تحلیلی برای لحاظ کردن قیود جبری مساوی و نامساوی

تا اینجا متغیّرهای مستقل (متغیرهای تصمیم‌گیری) هر مقداری را می‌توانستند اخذ کنند ولی در عمل چون این متغیّرها کمّیت فیزیکی نظیر دما، فشار و شدت‌جریان هستند، معمولاً دارای سقف(Upper bound) و کف(Lower bound) بوده و/یا تحت قیودی مثل شرط بیلان جرم یا انرژی می‌باشند.

مثال ۵–. یک واحد جداسازی مثل یک ستون تقطیر در نظر بگیرید:

اگر بیلان کلی جرم را برای سیستم در حالت یکنواخت درنظر بگیریم، عملا یک قید جبری مساوی (خطی) را لحاظ کرده‌ایم:

$$F - (O + B) = 0$$



و اگر ماگزیمم شدت جریان خوراک را به‌صورت یک محدودیت عملی نظیر قدرت پمپاژ یا ظرفیت واحد درنظر بگیریم، آنگاه یک قید نامساوی را منظور کرده‌ایم: $F \le 50000\ (brl/day)$

نکته ۶: در مسائل فرآیندی قیود مساوی معمولاً همان معادلات بیلان جرم، انرژی و مومنتوم (پدیده‌های انتقال ثلاثه در مهندسی شیمی) در اَشکال مقتضی مسئله یا روابط تجربی و ضروری (روابط ترمودینامیکی یا سرعت واکنشها و امثالهم) می‌باشد. در واقع این دستگاه معادلات، مدل فرآیند را تشکیل می‌دهند و اگر نامی از سیمولاتور فرآیند به‌میان می‌آید به‌خاطر اینست که مسئله بهگزینی را نامقید حل کنند! در ادامه به شگردهای مربوطه در ارتباط با لحاظ‌کردن قیود می‌پردازیم.

نکته: قیود مساوی و نامساوی الزاماً طبیعی نیستند. به عبارت دیگر همیشه در مقام انکشاف نیستند بلکه ممکنست تصنّعی و در مقام اختراع باشند. محدودکردن حلّ یا فضای جستجو، تضمین کارکرد موفّق محاسبات میانی (نظیر عدم مواجهه با آرگومان رادیکال یا لگاریتم منفی) و انتخاب حتمی فقط یک مقدار عدد صحیح در مسائل آمیخته تنها مثالهای معدودی از این امر می‌باشند.

نکته اساسی برای لحاظ‌کردن قیود، تبدیل مسئله به مسئله‌ای است که روش حلّ آن را (بهگزینی نامقید) می‌دانیم، لذا سعی می‌کنیم اگر مسئله بهینه‌سازی مقید نامساوی داریم، آنرا تبدیل به یک مسئله مقید مساوی کنیم و در حرکت بعدی مسئله مقید مساوی را به مسئله نامقید برگردانیم.

تبدیل قیود نامساوی به قیود مساوی

۱. متغیرهای کمبود/مازاد - اگر همان مثال ساده را در نظر بگیریم، استدلال زیر مبنی بر تعریف یک متغیّر جدید، متین و متقن خواهدبود:

$$F \le 50000 \to F + s^2 = 50000$$

به‌طوری‌که s، متغیر جدید و موسوم به متغیر کمبود(Slack variable) می‌باشد. مفهوم آن روشن است و می‌گوید مقدار F به یک اندازه‌ای از 50000 کمتر است و این کمبود را با یک مقدار مثبت بیان‌کرده تا نامساوی به مساوی تبدیل شود. دقت شود برای تبیین این مقدار مثبت می‌توانستیم از قدرمطلق متغیّر کمبود ($|s|$) استفاده کنیم ولی تابع قدرمطلق یک تابع پیوسته نیست و در روش‌هایی که از مشتق تابع هدف استفاده می‌شود (اعمّ از قضایای لازم و کافی)، بهتر است تابع مشتق‌پذیر باشد، لذا از توان‌های زوج متغیر کمبود استفاده می‌شود.

اگر نامساوی بصورت حدّ پایین باشد، دوباره همان مفهوم برقرار است، در عوض باید متغیّر جدید را کم کنیم:

$$F \ge 10000 \to F - s^2 = 10000$$

متغیّر جدید موسوم به متغیّر مازاد(Surplus variable) است، چراکه مقدار F ، به‌اندازه یک عبارت مثبت تا مقدار 10000 کم دارد.

نکته ۷: در برخی روش‌ها (نظیر برنامه‌ریزی خطّی یا مجذوری)که قیود نامساوی خطّی هستند، برای حفظ ساختار خطّی مسئله، از توان واحد متغیرهای کمبود و یا مازاد استفاده می‌کنند و لذا در الگوریتم مربوطه باید به‌نحوی مثبت بودن متغیّر کمبود یا مازاد را حفظ یا تضمین کنند، فأفهم!

قیود Hard/Soft و Tight/Loose همان‌طور که بعداً خواهیم‌دید، دو نکته مرتبط با قیود نامساوی وجود دارد. مثال ساده $F \le 50000$ را در نظر بگیرید. اگر پس از حلّ، مثلاً به مقدار بهینه $F^{opt.} = 30000$ (کمتر از 50000) رسیدیم، آنگاه $s^2 = 20000$ خواهد شد. در این‌صورت از قید $\le$ فقط علامت کوچکتر ($\prec$) آن برقرار شده‌است. لذا وجود یا عدم وجود قید برای مسئله بهینه‌سازی علی‌السّویه می‌باشد. به‌عبارت دیگر قید در نقطه اُپتیمم غیرفعّال است و اصطلاحاً

می‌گوییم این قید یک قید غیرجدی(Loose) می‌باشد. حال اگر جواب بهینه به‌صورت $F^{opt.} = 50000$ باشد، آنگاه $s^2 = 0$ خواهدشد. در این‌صورت از قید $\le$ فقط علامت مساوی ($=$) آن برقرار است. لذا، وجود قید به‌صورت فعّال عمل کرده و موسوم به قید جدّی(Tight) می‌باشد.

دو اصطلاح مشابه، یعنی قیود Hard/Soft، نیز رایج هستند. معذلک، باید توجه داشت که این دو اصطلاح عموماً در روش‌های بهینه‌سازی مبتنی بر تعریف (یا جستجو) به‌کار برده می‌شوند و نوعاً در محاسبات میانی کاربرد دارند تا در محاسبات نهایی. علّت اینست که اگر در حین عملیات جستجو از قید مربوطه تخطّی کردیم و روش یا فیزیک مسئله یا روابط موجود اجازه تخطّی را نمی‌داد (مثل فشار مطلق یا دمای مطلق)، آنگاه قید مزبور به‌صورت سخت عمل کرده و اصلاً اجازه تخطّی برقرار نیست.

۲. تغییر متغیّر – در صورتی‌که قیود به‌صورت تابع صریحی از متغیّرها باشد و یا کلاً به‌شکل ساده‌ای باشند، شاید بتوان با تبدیل یا تغییر متغیر کاری کرد که قیود به‌طور خودکار ارضاء شوند[7].

چند نوع تبدیل ممکن در زیر آورده شده‌است:

الف) اگر باند بالا و/یا پایین برای متغیرهای اصلی به‌صورت $l_i \le x_i \le u_i$ تعریف شده‌باشند، آنگاه با تغییر متغیر زیر

$$x_i = l_i + (u_i - l_i)\sin^2 y_i$$

مسئله مقیّد نامساوی به مقیّد مساوی یا اصلاً به‌طور کامل به مسئله نامقیّد (متغیّر جدید y_i، می‌تواند هر مقداری اختیار کند) تبدیل می‌شود.

ب) اگر باند بالا و پایین برای متغیرهای اصلی به‌صورت $0 \le x_i \le 1$ تعریف شده‌باشند، آنگاه با هرکدام از تغییر متغیرهای زیر، مسئله به‌صورت نامقید در می‌آید.

$$x_i = \sin^2 y_i \quad , \quad x_i = \cos^2 y_i \quad , \quad x_i = \frac{e^{y_i}}{e^{y_i} + e^{-y_i}} \quad , \quad x_i = \frac{y_i^2}{1 + y_i^2}$$

ج) اگر متغیّر اصلی باید مثبت باشد، آنگاه با هرکدام از تغییرمتغیّرهای زیر، مسئله به‌صورت نامقیّد درمی‌آید.

$$x_i = abs(y_i) \quad , \quad x_i = y_i^2 \quad , \quad x_i = e^{y_i}$$

د) اگر باند بالا و پایین برای متغیرهای اصلی به‌صورت $-1 \le x_i \le 1$ تعریف شده‌باشند، آنگاه تبدیل مقتضی هرکدام از روابط زیر می‌باشد.

$$x_i = \sin y_i \quad , \quad x_i = \cos y_i \quad , \quad x_i = \frac{2y_i}{1 + y_i^2}$$

۳. توابع جریمه و تمانعی این روش یک حالت تکراری دارد و سعی می‌شود در حلقه‌های تکرار اصلی مسئله، مرتباً و حتی‌الامکان از قیود (سقف و کف) دور شویم. بحث مفصّل این روش‌ها در فصل مربوط به برنامه‌ریزی غیرخطی (بهگزینی چندمتغیّره مقیّد غیرخطّی) گنجانده شده‌است.

تبدیل مسئله مقیّد مساوی به مسئله نامقیّد

فرض می‌کنیم مسئله بهگزینی دارای قیود مساوی باشد:

$$\begin{aligned} &Optimize \quad y(x_1, x_2, \cdots, x_n) \\ &subject\ to \quad f_i(x_1, x_2, \cdots, x_n) = 0 \quad , \quad i = 1,2,\cdots,m \end{aligned}$$

سه حالت برای m (تعداد قیود مساوی) نسبت به n (بُعد یا تعداد متغیرهای مستقل) برقرارست:

← *حالت $m \prec n$: این حالت از نظر مسئله بهینه‌سازی طبیعی است ولی از دیدگاه حلّ دستگاه جبری معروف به حالت* under-determined *می‌باشد.*

← *حالت $m = n$: در این حالت به‌جای مسئله بهینه‌سازی، با حلّ یک دستگاه جبری روبرو هستیم و در نتیجه جواب فیکس شده و تقدیری می‌باشد. لذا، نیاز به یافتن نقطه بهینه نیست بلکه از قبل معلوم است.*

← *حالت $m \succ n$: در این حالت نیز نظیر حالت قبل جواب بهینه نداریم. این حالت از دیدگاه حلّ دستگاه جبری معروف به حالت* over-determined *می‌باشد.*

لازم به‌ذکرست که در غالب مسائل بهگزینی مهندسی شیمی، قیود مساوی همان مدل یا دستگاه معادلات جبری است که سیمولاتور وظیفه تأمین حلّ یا تضمین برقراری آن قیود واجب‌الارتضاء را دارد!

به‌طور کلّی پنج روش برای یافتن نقطه (نقاط) اُپتیمم برای تابع $y(x_1, x_2, \cdots, x_n)$ با m تا قیود مساوی ($m \prec n$) وجود دارد:

۱- روش جایگزینی مستقیم(direct substitution)،

۲- روش تغییر مقیّد(Constrained variation)،

۳ و ۴- توابع پنالتی(Penalty functions) و روش‌های تمانعی(Barrier Methods) و

۵ - تعریف ضرایب لاگرانژ(Lagrange multipliers).

(۱) روش جایگزینی مستقیم:

در این روش به‌طور خیلی ساده، متغیّرهای دستگاه جبری شامل قیود مساوی را برحسب همدیگر حل کرده و در $y(x_1, x_2, \cdots, x_n)$ جایگزین کرده و عملاً مسئله را به‌صورت نامقیّد ولی با $n-m$ متغیر تصمیم‌گیری حلّ می‌کنیم. عیب عمده این روش، صعوبت به‌کارگیری آن در مسائل با مقیاس بزرگ و قیود غیرخطّی می‌باشد و معمولاً نمی‌توانیم به‌راحتی این جایگزینی و بازترکیبی را انجام دهیم، مگراینکه مسئله خیلی کوچک و یا قیود بسیار ساده باشند.

(۲) روش تغییر مقیّد:

برای سهولت فهم، مسئله را برای یک تابع هدف دومتغیره شرح و بسط می‌دهیم. دقّت کنید که برای یک مسئله دومتغیّره فقط می‌توانیم یک قید مساوی (والبته بی‌نهایت قید نامساوی) داشته‌باشیم.

$$\begin{aligned} &\textit{Optimize} \quad f(x_1, x_2) \\ &\textit{subject to} \quad g(x_1, x_2) = 0 \end{aligned}$$

ایده اصلی برای به‌دست آوردن شرط (شرایط) لازم شبیه به حالت نامقیّد، محاسبه یک فرم بسته برای دیفرنسیال کامل تابع هدف می‌باشد، ولی برخلاف حالت نامقیّد باید این دیفرنسیال کامل به‌طور همزمان در قید (قیود) مساوی نیز صدق کند. شرط لازم برای اینکه تابع هدف $f(x_1, x_2)$ دارای اکسترمم در نقطه (x_1^*, x_2^*) باشد اینست که دیفرنسیال کامل آن صفر باشد:

$$df = \frac{\partial f}{\partial x_1} dx_1 + \frac{\partial f}{\partial x_2} dx_2 = 0$$

از طرفی در نقطه اکسترمم باید قید تساوی نیز برقرارباشد، یعنی $g(x_1^*, x_2^*) = 0$. لذا هر گونه نقطه حدّی جدید که از تغییر در x_1 (یعنی dx_1 موسوم به تغییر مجاز در x_1) یا تغییر در x_2 (یعنی dx_2 موسوم به تغییر مجاز در x_2) به‌دست آید

باید در قید مربوطه نیز صدق نماید: $g(x_1^*+dx_1, x_2^*+dx_2)=0$

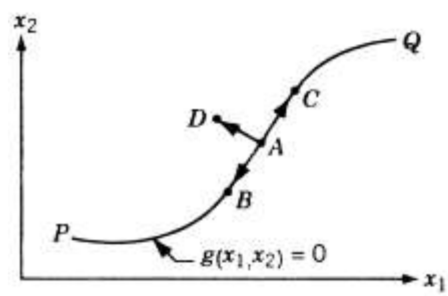
بسط تیلور برای رابطه بالا حول نقطه (x_1^*, x_2^*) رابطه زیر را می‌دهد:

(۱۵)
$$g(x_1^*+dx_1, x_2^*+dx_2)\cong g(x_1^*, x_2^*)+\left.\frac{\partial g}{\partial x_1}\right|_{(x_1^*,x_2^*)}\cdot dx_1+\left.\frac{\partial g}{\partial x_2}\right|_{(x_1^*,x_2^*)}\cdot dx_2=0$$

ترم اوّل همان قید مساویست و لذا معادل صفرست و در نتیجه عبارت بالا به‌شکل زیر ساده می‌شود:

(۱۶)
$$\left.\frac{\partial g}{\partial x_1}\right|_{(x_1^*,x_2^*)}\cdot dx_1+\left.\frac{\partial g}{\partial x_2}\right|_{(x_1^*,x_2^*)}\cdot dx_2=0$$

و این بدان معنیست که هرگونه تغییر در هرکدام از متغیرها منجر به تغییر در برخی متغیّرهای دیگر در آئینه قید مساوی می‌شود. شکل (۷) را ملاحظه کنید. منحنی نشان داده‌شده همان قید مساوی می‌باشد (تابعیت x_2 برحسب x_1). اگر نقطه شروع را نقطه اکسترمم مثل A در نظر بگیریم، آنگاه تغییر در x_1 و x_2 منجر به حرکت روی منحنی شده و نقاط نوعی B و C را می‌دهد. دقت کنید چون حرکت روی منحنی قید می‌باشد، لذا حرکت روی آن موسوم به تغییر مجاز می‌باشد. در طرف مقابل حرکت از A به D غیرمجاز می‌باشد، چون نقطه D روی منحنی قید نمی‌باشد.



شکل ۷ . تغییر حول نقطه اکسترمم (نقطه A).

فرض کنید $\partial g/\partial x_2\neq 0$ ، آنگاه تغییر در x_2 تابعی از تغییر در x_1 می‌باشد:

(۱۷)
$$dx_2=-\left.\frac{\partial g/\partial x_1}{\partial g/\partial x_2}\right|_{(x_1^*,x_2^*)}\cdot dx_1$$

یعنی اگر بخواهیم مسئله مقیّد بماند همه متغیرها آزادانه نمی‌توانند تغییر کنند. برای مسئله دومتغیره حاضر اگر x_1 بخواهد آزادانه تغییر کند، آنگاه x_2 مطابق رابطه بالا تغییر می‌کند.

با جایگذاری رابطه تغییرات x_2 با تغییر در x_1 در عبارت دیفرنسیال کامل f ، خواهیم داشت:

(۱۸)
$$df=\left.\left(\frac{\partial f}{\partial x_1}-\frac{\partial g/\partial x_1}{\partial g/\partial x_2}\frac{\partial f}{\partial x_2}\right)\right|_{\underline{x}^*}\cdot dx_1=0$$

عبارت بالا موسوم به تغییر مقید تابع هدف می‌باشد و چون dx_1 یک متغیر آزادست، پس حتماً ضریب آن صفرست:

(۱۹)
$$\left.\left(\frac{\partial f}{\partial x_1}\frac{\partial g}{\partial x_2}-\frac{\partial f}{\partial x_2}\frac{\partial g}{\partial x_1}\right)\right|_{\underline{x}^*}=0$$

با کنارهم‌گذاشتن عبارت بالا و رابطه قید، به یک دستگاه معادله جبری شامل دو مجهول x_1^* و x_2^* تحویل می‌شویم، یعنی شرط لازم برای یک مسئله دومتغیره مقید:

$$\begin{cases}\dfrac{\partial f}{\partial x_1}\dfrac{\partial g}{\partial x_2}-\dfrac{\partial f}{\partial x_2}\dfrac{\partial g}{\partial x_1}=0\\ g(x_1,x_2)=0\end{cases} \tag{۲۰}$$

قضیه ۶- شرایط لازم برای بهگزینی مقید مساوی چندمتغیره (با استفاده از روش تغییر مقیّد)

با تعمیم موارد اخیرالذّکر و تعقیب روال مربوطه می‌توان به شرایط لازم برای به‌گزینی مقیّد مساوی n متغیّره با حضور m قید مساوی ($m \prec n$) رسید. تعداد m قید مساوی منجر به ترکیب خطّی تغییرات هرکدام برحسب dx_i (به‌طوریکه $i=1,2,\cdots,n$) می‌شود، یعنی m معادله با n مجهول و درنتیجه هر m تا dg_i (به‌طوریکه $i=1,2,\cdots,m$) را می‌توان برحسب $n-m$ تا تغییر در x ها نوشت. سپس با جایگذاری این روابط در df، به $n-m$ تا رابطه شرط لازم می‌رسیم که همراه با m تا رابطه قید تساوی، تشکیل یک دستگاه جبری (معمولاً غیرخطّی) می‌دهند که حلّ آن، همان نقطه اکسترمم مقید می‌باشد:

$$\begin{aligned}&\text{Optimize} && f(x_1,x_2,\cdots,x_n)\\ &\text{subject to} && g_1(x_1,x_2,\cdots,x_n)=0\\ &&& g_2(x_1,x_2,\cdots,x_n)=0\\ &&& \vdots\\ &&& g_m(x_1,x_2,\cdots,x_n)=0 \quad , \quad m\prec n\end{aligned} \tag{۲۱}$$

از بسط تیلور داریم: (m تا معادله)

$$\begin{cases}\dfrac{\partial g_1}{\partial x_1}dx_1+\dfrac{\partial g_1}{\partial x_2}dx_2+\cdots+\dfrac{\partial g_1}{\partial x_n}dx_n=0\\ \vdots\\ \dfrac{\partial g_m}{\partial x_1}dx_1+\dfrac{\partial g_m}{\partial x_2}dx_2+\cdots+\dfrac{\partial g_m}{\partial x_n}dx_n=0\end{cases} \tag{۲۲}$$

ازاین m تا معادله، m تا مجهول (مثلا dx_1 و dx_2 تا dx_m) را برحسب بقیه باید به‌دست آوریم:

$$\begin{cases}\dfrac{\partial g_1}{\partial x_1}dx_1+\dfrac{\partial g_1}{\partial x_2}dx_2+\cdots+\dfrac{\partial g_1}{\partial x_m}dx_m=-\dfrac{\partial g_1}{\partial x_{m+1}}dx_{m+1}-\dfrac{\partial g_1}{\partial x_{m+2}}dx_{m+2}-\cdots-\dfrac{\partial g_1}{\partial x_n}dx_n\\ \vdots\\ \dfrac{\partial g_m}{\partial x_1}dx_1+\dfrac{\partial g_m}{\partial x_2}dx_2+\cdots+\dfrac{\partial g_m}{\partial x_m}dx_m=-\dfrac{\partial g_m}{\partial x_{m+1}}dx_{m+1}-\dfrac{\partial g_m}{\partial x_{m+2}}dx_{m+2}-\cdots-\dfrac{\partial g_m}{\partial x_n}dx_n\end{cases} \tag{۲۳}$$

پس از حلّ:

$$\begin{bmatrix}dx_1\\ dx_2\\ \vdots\\ dx_m\end{bmatrix}=-\begin{bmatrix}\dfrac{\partial g_1}{\partial x_1} & \cdots & \dfrac{\partial g_1}{\partial x_m}\\ \vdots & \ddots & \vdots\\ \dfrac{\partial g_m}{\partial x_1} & \cdots & \dfrac{\partial g_m}{\partial x_m}\end{bmatrix}^{-1}\begin{bmatrix}\dfrac{\partial g_1}{\partial x_{m+1}}dx_{m+1}+\dfrac{\partial g_1}{\partial x_{m+2}}dx_{m+2}+\cdots+\dfrac{\partial g_1}{\partial x_n}dx_n\\ \vdots\\ \dfrac{\partial g_m}{\partial x_{m+1}}dx_{m+1}+\dfrac{\partial g_m}{\partial x_{m+2}}dx_{m+2}+\cdots+\dfrac{\partial g_m}{\partial x_n}dx_n\end{bmatrix} \tag{۲۴}$$

درصورتی‌که ماتریس ژاکوبین بالا معکوس داشته باشد، آنگاه با حلّ m تا مجهول دیفرنسیالی و جایگذاری در شرط دیفرنسیال کامل تابع هدف، شرط لازم برای حالت چندمتغیّره مقیّد به‌دست می‌آید:

$$df=\frac{\partial f}{\partial x_1}dx_1+\frac{\partial f}{\partial x_2}dx_2+\cdots+\frac{\partial f}{\partial x_n}dx_n=0 \tag{۲۵}$$

یک روش برای نمایش کلی شرط لازم، اینست که هردفعه یک متغیر مجهول (بعد از m) را درنظر گرفته و عبارت بالا را بنویسیم تا $n-m$ مجهول باقیمانده تمام شود [1].

$$\left|J\left(\frac{f,g_1,g_2,\cdots,g_m}{x_k,x_1,x_2,\cdots,x_m}\right)\right| \triangleq \begin{vmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_k} & \frac{\partial f}{\partial x_1} & \frac{\partial f}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f}{\partial x_m} \\ \frac{\partial g_1}{\partial x_k} & \frac{\partial g_1}{\partial x_1} & \frac{\partial g_1}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial g_1}{\partial x_m} \\ \frac{\partial g_2}{\partial x_k} & \frac{\partial g_2}{\partial x_1} & \frac{\partial g_2}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial g_2}{\partial x_m} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial g_m}{\partial x_k} & \frac{\partial g_m}{\partial x_1} & \frac{\partial g_m}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial g_m}{\partial x_m} \end{vmatrix} = 0 \qquad (۲۶)$$

به‌طوریکه k می‌تواند مقادیر بعداز m (یعنی $m+1$ ، $m+2$ تا n) را اختیارکند. دقّت شود شرط مزبور از روی رابطه برخی دیفرنسیال برحسب بعضی دیگر به‌دست آمده‌اند و لذا شرط محاسبه آنها این می‌باشد که ژاکوبین فیلد برداری $\underline{g}$ تکین نباشد:

$$\left|J\left(\frac{g_1,g_2,\cdots,g_m}{x_1,x_2,\cdots,x_m}\right)\right| \neq 0 \qquad (۲۷)$$

مثال۶: مطلوبست محاسبه اکسترمم تابع هدف زیر با قیود تساوی مربوطه.

$$\begin{aligned} &Optimize \quad f(\underline{x}) = \frac{1}{2}\left(x_1^2+x_2^2+x_3^2+x_4^2\right) \\ &S.T. \quad g_1(\underline{x}) = x_1+2x_2+3x_3+5x_4-10=0 \\ &\qquad\quad g_2(\underline{x}) = x_1+2x_2+5x_3+6x_4-15=0 \end{aligned}$$

حل: برای این مسئله تعداد متغیرهای اصلی (n) معادل 4 و تعداد قیود مساوی برابر با 2 می‌باشد. برای ادامه باید دو متغیر مستقل انتخاب کنیم تا دوتای دیگر را برحسب آنها بنویسیم. اگر دو متغیر اول (یعنی x_1 و x_2) را درنظر بگیریم، ابتدا چک می‌کنیم که آیا اصلاً دیفرنسیال این دو متغیر را می‌توان برحسب دوتای دیگر محاسبه نمود:

$$\left|J\left(\frac{g_1,g_2}{x_1,x_2}\right)\right| = \begin{vmatrix} \frac{\partial g_1}{\partial x_1} & \frac{\partial g_1}{\partial x_2} \\ \frac{\partial g_2}{\partial x_1} & \frac{\partial g_2}{\partial x_2} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 & 2 \\ 1 & 2 \end{vmatrix} = 0$$

با توجه به نتیجه اخذشده، dx_1 و dx_2 را نمی‌توان برحسب dx_3 و dx_4 فرموله کرد. مجموعه متغیرهای مستقل و وابسته را عوض می‌کنیم، مثلا دو متغیر dx_1 و dx_3 را برحسب dx_2 و dx_4 درنظر می‌گیریم:

$$\left|J\left(\frac{g_1,g_2}{x_1,x_3}\right)\right| = \begin{vmatrix} \frac{\partial g_1}{\partial x_1} & \frac{\partial g_1}{\partial x_3} \\ \frac{\partial g_2}{\partial x_1} & \frac{\partial g_2}{\partial x_3} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 & 3 \\ 1 & 5 \end{vmatrix} = 2 \neq 0$$

درنتیجه می‌توان شرط لازم را نوشت، یکبار ایندکس k را برابر 2 (برای x_2) و باردیگر (برای x_4) معادل 4 درنظر می‌گیریم:

$$\left|J\left(\frac{f,g_1,g_2}{x_2,x_1,x_3}\right)\right| = \begin{vmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_2} & \frac{\partial f}{\partial x_1} & \frac{\partial f}{\partial x_3} \\ \frac{\partial g_1}{\partial x_2} & \frac{\partial g_1}{\partial x_1} & \frac{\partial g_1}{\partial x_3} \\ \frac{\partial g_2}{\partial x_2} & \frac{\partial g_2}{\partial x_1} & \frac{\partial g_2}{\partial x_3} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} x_2 & x_1 & x_3 \\ 2 & 1 & 3 \\ 2 & 1 & 5 \end{vmatrix} = 0$$

$$\left|J\left(\frac{f,g_1,g_2}{x_4,x_1,x_3}\right)\right| = \begin{vmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_4} & \frac{\partial f}{\partial x_1} & \frac{\partial f}{\partial x_3} \\ \frac{\partial g_1}{\partial x_4} & \frac{\partial g_1}{\partial x_1} & \frac{\partial g_1}{\partial x_3} \\ \frac{\partial g_2}{\partial x_4} & \frac{\partial g_2}{\partial x_1} & \frac{\partial g_2}{\partial x_3} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} x_4 & x_1 & x_3 \\ 5 & 1 & 3 \\ 6 & 1 & 5 \end{vmatrix} = 0$$

اگر دوشرط بالا را همراه با دو رابطه قیود g_1 و g_2 بنویسیم، مسئله بهگزینی تبدیل به حلّ دستگاه می‌شود:

$$\begin{cases} -4x_1 + 2x_2 = 0 \\ -7x_1 - x_3 + 2x_4 = 0 \\ x_1 + 2x_2 + 3x_3 + 5x_4 = 10 \\ x_1 + 2x_2 + 5x_3 + 6x_4 = 15 \end{cases}$$

پس از حلّ دستگاه:

$$\underline{x}^* = \begin{bmatrix} -5/74 \\ -5/37 \\ 155/74 \\ 30/37 \end{bmatrix}$$

قضیه ۷- شرایط کافی برای به‌گزینی مقیّد مساوی چندمتغیّره (با استفاده از روش تغییر مقیّد)

با حذف m متغیر اصلی از طریق قیود مساوی، تابع هدف تابعی $n-m$ متغیره و البته نامقیّد می‌شود. گرچه شاید نتوان به‌طور صریح m تا متغیّر را حذف کرد یا تابع هدف را برحسب $n-m$ تا متغیّر نوشت ولی برای تعیین شرایط ارزیابی، همین تعداد متغیّرها و اینکه مسئله تبدیل به نامقیّد شده‌است، کافیست.

دوباره مشابه حالت قبل (حالت نامقیّد)، تابع هدف مسئله را با ساختار جدید (تابع متغیّرهای اصلی x_{m+1}، x_{m+2} تا x_{m+n}) بسط تیلور می‌دهیم:

$$f(\underline{x}^* + d\underline{x}) \simeq f(\underline{x}^*) + \sum_{i=m+1}^{n} \left(\frac{\partial f}{\partial x_i}\right)_g dx_i + \frac{1}{2!}\sum_{i=m+1}^{n}\sum_{j=m+1}^{n}\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}\right)_g dx_i dx_j \qquad (۲۸)$$

بقیه کار (بحث روی علامت فرم مجذوری) شبیه قبل می‌باشد.

در انتها ذکر این نکته لازمست که از این روش (تغییر مقیّد) خیلی استفاده نمی‌شود، بلکه به‌عنوان یک پایه ریاضی در روش‌های ترکیبی جستجوی چندمتغیره نظیر گرادیان تقلیل‌یافته و تعمیم‌یافته استفاده می‌شود.

(۳) و (۴) تبدیل مسئله مقیّد، توابع جریمه و روش‌های تمانعی

ایده کلّی و پشتیبان این روش‌ها مبتنی بر مجبورکردن تابع هدف برای ارضای قیود (در روش‌های جستجو) یا پارامتریزه‌کردن تابع هدف با یک تابع جریمه یا تعدیلی (در روش‌های ریاضی یا مبتنی بر قضیه) می‌باشد.

برای تقریب ذهن و مأنوس‌شدن با این مفاهیم، به ذکر یک مثال از توابع پنالتی می‌پردازیم و برای مسائل با مقیاس بزرگ (بیش از 20 متغیر) در فصول مقتضی (روش‌های جستجو)، به‌طور مفصّل این روش‌ها را بحث می‌کنیم.

مثال۷. با استفاده از تابع پنالتی بیرونی و پارامتر r مسئله بهگزینی مقیّد مسئله را تبدیل به یک مسئله نامقیّد کنید و در انتها با صفرقراردادن r، قید مساوی را ارضاء کنید:

$$\begin{aligned} &Minimize \quad y(x_1,x_2)=2x_1^2+3x_2^2 \\ &Subject\ to: \quad x_1+2x_2=5 \end{aligned}$$

حل: تابع پنالتی (شکل تغییریافته تابع هدف)را به این شکل تعریف می‌کنیم:

$$P(x_1,x_2,r)=\underbrace{2x_1^2+3x_2^2}_{Objective\ function}+\underbrace{1/r[x_1+2x_2-5]^2}_{Penalty\ term}$$

به عبارت دوم دقّت کنید. عبارت مثبت $[x_1+2x_2-5]^2$ نشان‌دهنده میزان ارضاء یا عدم ارضای قید (قیود) می‌باشد. پارامتر r می‌تواند برای مقیاس‌دهی استفاده شود یا در روشهای جستجو با میل‌دادن r به سمت صفر، سعی در یکی‌کردن جواب بهینه تابع پنالتی با تابع هدف اصلی داشته‌باشیم.

در ادامه، به حلّ مسئله نامقیّد تابع پنالتی (به‌جای حلّ مسئله مقیّد تابع هدف اصلی) می‌پردازیم. شرط لازم از روی معادل صفرقراردادن گرادیان تابع پنالتی به‌دست می‌آید:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial P}{\partial x_1}=4x_1+\dfrac{2}{r}[x_1+2x_2-5]=0 \\ \dfrac{\partial P}{\partial x_2}=6x_2+\dfrac{4}{r}[x_1+2x_2-5]=0 \end{cases}$$

پس از حل خواهیم داشت:

$$x_1=\frac{15}{11+6r} \quad , \quad x_2=\frac{20}{11+6r}$$

حال برای اینکه جواب بالا، جواب تابع هدف اصلی باشد باید r به سمت صفر میل کند:

$$x_1^{opt.}=\frac{15}{11} \quad , \quad x_2^{opt.}=\frac{20}{11}$$

(۵) تبدیل مسئله مقید، ضرائب لاگرانژ

برای سادگی مسئله را دومتغیره فرض کنید. اگر تابع هدف را با y و (تنها) قید مساوی مسئله را با f نمایش دهیم:

$$\begin{cases} dy=\left(\dfrac{\partial y}{\partial x_1}\right)dx_1+\left(\dfrac{\partial y}{\partial x_2}\right)dx_2=0 \rightarrow \dfrac{dx_2}{dx_1}=-\dfrac{\partial y/\partial x_1}{\partial y/\partial x_2} & \text{(شرط لازم)} \\ df=\left(\dfrac{\partial f}{\partial x_1}\right)dx_1+\left(\dfrac{\partial f}{\partial x_2}\right)dx_2=0 \rightarrow \dfrac{dx_2}{dx_1}=-\dfrac{\partial f/\partial x_1}{\partial f/\partial x_2} & \text{(} f \text{ ثابت)} \end{cases}$$

دو چیز مساوی یک چیز با هم مساویند.

$$\frac{\left(\dfrac{\partial y}{\partial x_1}\right)}{\left(\dfrac{\partial y}{\partial x_2}\right)}=\frac{\left(\dfrac{\partial f}{\partial x_1}\right)}{\left(\dfrac{\partial f}{\partial x_2}\right)}$$

با باز ترکیب نتیجه آخر، خواهیم داشت:

$$\frac{\left(\dfrac{\partial y}{\partial x_1}\right)}{\left(\dfrac{\partial f}{\partial x_1}\right)}=\frac{\left(\dfrac{\partial y}{\partial x_2}\right)}{\left(\dfrac{\partial f}{\partial x_2}\right)}$$

عبارت سمت چپ (به طور کلی)حتماً تابعی از x_1 و x_2 است و همین‌طور عبارت سمت راست. ولی برای اینکه این‌دو تابعیت همیشه با هم مساوی باشند، ممکن نیست مگراینکه هردوطرف تابعی از x_1 و x_2 نباشند (!!!)، بلکه یک مقدار ثابتی باشند. به افتخار لاگرانژ، به آن می‌گوییم ضریب لاگرانژ و آن را با $-\lambda$ نمایش می دهیم. علامت منفی، همانطور که بعداً خواهیم دید، جهت سهولت درج شده است.

$$\frac{\left(\dfrac{\partial y}{\partial x_1}\right)}{\left(\dfrac{\partial f}{\partial x_1}\right)}=\frac{\left(\dfrac{\partial y}{\partial x_2}\right)}{\left(\dfrac{\partial f}{\partial x_2}\right)}=-\lambda \quad\rightarrow\quad \begin{cases}\dfrac{\partial y}{\partial x_1}+\lambda\dfrac{\partial f}{\partial x_1}=0\\ \dfrac{\partial y}{\partial x_2}+\lambda\dfrac{\partial f}{\partial x_2}=0\end{cases}$$

پس باید دو معادله جبری حل کنیم. برای یکپارچه کردن این نتایج با شرط لازم مسائل نامقید، تابع لاگرانژ (در مقام مشابهت با تابع هدف اصلی) را به شکل خطی(affine) زیر نسبت به λ تعریف می‌کنیم:

$$L\equiv \underbrace{y(x_1,x_2)}_{Objective\ function}+\lambda\times\underbrace{f(x_1,x_2)}_{Constr.\ function}$$

در این‌صورت شرط لازم اخیر (دو معادله جبری فوق المذکور) را می‌توان به شکل زیر نوشت:

$$\left.\frac{\partial L}{\partial \underline{x}}\right|_{\underline{x}=\underline{\alpha}}=0\quad,\quad \underline{x}\equiv[x_1\quad x_2\quad \lambda]^T$$

خلاصه اینکه به منظورمان رسیدیم. یعنی مسئله مقیّد (با تابع هدف y، قید f و متغیرهای مستقل x_1 و x_2) به مسئله نامقید (ولی با تابع هدف L و متغیّرهای مستقل x_1 ، x_2 و λ) تبدیل شد.

قضیه ۸- شرط لازم برای بهگزینی مقیّد مساوی چندمتغیّره (با استفاده از ضرایب لاگرانژ)

به طور کلّی شرط لازم برای محاسبه اکسترمم یک تابع هدف مثل $y(\underline{x})$ تحت قیود $f(\underline{x})$ ، به شکل زیر است:

$$L(\underline{x},\underline{\lambda})\equiv\underbrace{y(\underline{x})+\underline{\lambda}^T f(\underline{x})}_{Geometric\ representation}\equiv\underbrace{y(\underline{x})+\sum_{i=1}^{m}\lambda_i f_i(\underline{x})}_{\text{Algebraic representation}}$$

آنگاه شرط لازم برای جواب بهینه مقیّد به شکل زیر است:

$$\begin{cases}\dfrac{\partial L}{\partial \underline{x}}=\underline{0} & \text{n تا معادله جبری}\\ \dfrac{\partial L}{\partial \underline{\lambda}}=\underline{0} & \text{m تا معادله جبری (همان قیود تساوی)}\end{cases}\quad\Rightarrow\quad\frac{\partial L}{\partial \underline{\theta}}=0$$

به‌طوریکه $\underline{\theta}$ بردار متغیرهای جدید است، $\underline{\theta}^T\equiv[\underline{x}^T\quad \underline{\lambda}^T]$. دقّت شود که تعداد ضرایب لاگرانژ ($\underline{\lambda}$) به تعداد قیود مساوی می‌باشد.

مثال ۸. مطلوبست حل مسئله بهگزینی مقیّد(مساوی) زیر:

$$\begin{aligned}&Optimize\quad y(\underline{x})=x_1\times x_2\\&Subject\ to:\ f(\underline{x})=x_1^2+x_2^2-1=0\end{aligned}$$

(مکان یک دایره است.)

حل- با تعریف تابع لاگرانژ:

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

$$\begin{cases} \partial L/\partial x_1 = x_2 + 2\lambda x_1 = 0 \\ \partial L/\partial x_2 = x_1 + 2\lambda x_2 = 0 \\ \partial L/\partial \lambda = x_1^2 + x_2^2 - 1 = 0 \end{cases}$$

پس‌از حلّ،

$$\begin{matrix} maxima: \\ (\lambda = -1/2) \end{matrix} \begin{cases} x_1 = \sqrt{2}/2 \quad , \quad x_2 = \sqrt{2}/2 \quad and \\ x_1 = -\sqrt{2}/2 \quad , \quad x_2 = -\sqrt{2}/2 \end{cases}$$

$$\begin{matrix} minima: \\ (\lambda = 1/2) \end{matrix} \begin{cases} x_1 = \sqrt{2}/2 \quad , \quad x_2 = -\sqrt{2}/2 \quad and \\ x_1 = -\sqrt{2}/2 \quad , \quad x_2 = \sqrt{2}/2 \end{cases}$$

لحاظ‌کردن قیود (از دیدگاه فرمولاسیون) قید تساوی یا از بیرون (شرح مسئله) اجبار می‌شود (نظیر وجود مدل) یا توسط طرّاح و حلّ‌کننده مسئله که دارای تفکّر مهندسی است مطرح می‌شود. در هرصورت برای حلّ، دو روش می‌توان درنظرگرفت:

روش اول- مسئله را نامقیّد حل کنیم، سپس محکّ می‌زنیم آیا جواب بهینه نامقیّد، قیود را نقض می‌کند یا خیر. معمولاً قیود نامساوی به‌صورت مقادیر ماگزیمم و مینیمم کمّیت‌های فیزیکی هستند و قیود مساوی بیلان جرم و انرژی هستند. به هرحال حل مسایل مقیّد نامساوی سخت و غیرتحلیلی است.

روش دوم - مسئله را به‌نوعی "زیربهینه" حلّ می‌کنیم و از اول مسئله را مقیّد حل می‌کنیم (معمولاً به‌صورت مساوی). به‌هرحال برای بعضی مسائل (به‌ویژه مسائل با مقیاس کوچک) حل تحلیلی مسائل مقیّد مساوی امکان‌پذیرست.

برای مأنوس‌شدن با مفاهیم و روش‌های اخیر، همان مثال فرآیندی قبلی را به‌صورت مقیّد (مساوی) حلّ می‌کنیم.

ازنظرطرّاحی، می‌دانیم برای راکتور کاتالیستی در فشار بالا کارکردن بهتراست ولی برای اینکه صرفه‌جویی در هزینه شود باید جریان برگشتی کمتر شود (و همینطور بالعکس). لذا برای اِعمال این ایده، یک قید مصنوعی و ریاضی می‌گذاریم تا هرچه برگشتی بیشتر شود فشارکمترشود (و بالعکس). رابطه هموگرافیک زیر دارای این خاصیت است: $PR = Const.$

برای محاسبه ، از شمّ مهندسی استفاده می‌کنیم، مثلا برای $R=1$، فرض کنید فشار باید (نه حداکثر) $9000\,psi$ باشد. لذا، مقدار ثابت بالا، معادل 9000 می‌شود.

مثال۹. مسئله فرآیندی قبلی را درنظرگرفته و مسئله زیر را حلّ کنید:

$$\begin{aligned} &minimize \quad C = 1000P + 4\times10^9/PR + 2.5\times10^5 R \\ &Subject\ to \quad PR = 9000 \end{aligned}$$

حل: با روش جایگزینی مستقیم

$$PR = 9000 \rightarrow P = 9000/R$$

$$C = 9\times10^6/R + (4/9)\times10^6 + 2.5\times10^5 R \quad \rightarrow \quad dC/dR = 0$$

$$\rightarrow \quad R = 6 \quad \rightarrow \quad P = 1500\,psi \quad \rightarrow \quad C = 3.44\times10^6$$

همانطور که انتظار می‌رفت این مقدار بزرگتر از مینیمم نامقیّد است.

حلّ: با روش تغییر مقیّد

$$\begin{cases} \dfrac{\partial C}{\partial P}\dfrac{\partial}{\partial R}(PR-9000)-\dfrac{\partial C}{\partial R}\dfrac{\partial}{\partial P}(PR-9000)=0 \\ PR-9000=0 \end{cases} \rightarrow \begin{cases} P=250R \\ PR-9000=0 \end{cases} \rightarrow$$

(همان جواب قبلی)

حل با ضرایب لاگرانژ:

$$L \equiv 1000P+4\times10^9/PR+2.5\times10^5R+\lambda(PR-9000)$$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial L}{\partial P}=0 \\ \dfrac{\partial L}{\partial R}=0 \\ \dfrac{\partial L}{\partial \lambda}=0 \end{cases} \rightarrow \begin{cases} 1000-4\times10^9/P^2R+\lambda R=0 \\ 2.5\times10^5-4\times10^9/PR^2+\lambda P=0 \\ PR-9000=0 \end{cases} \rightarrow \begin{cases} P=1500 \\ R=6 \\ \lambda=-117.3 \end{cases}$$

ضرایب لاگرانژ از پشتوانه‌ای قوی و ریاضی برخوردارند. لذا، ایده مزبور نه‌تنها در روش‌های جستجو مورد استفاده قرار می‌گیرد (مثل روش تندترین شیب فروشو یا فرارفت)، بلکه در تحلیل‌های فرابهینه‌سازی و تفسیر و تأویل اقتصادی نیز کاربرد دارند. قضایای لازم و کافی مسائل مقید اعمّ از قیود مساوی و نامساوی از ضرایب لاگرانژ بهره وافر می‌برند.

در ادامه یک کاربرد (ایده) استفاده از ضرایب لاگرانژ را در مسائل مقیّد نامساوی را جهت آشنایی مقدّماتی با قضایای Cohen-Tuker مطرح می‌کنیم.

مسئله کلی بهینه‌سازی مقیّد (فقط نامساوی) زیر را درنظر بگیرید:

$$\begin{cases} Optimize \quad y(\underline{x}) \\ Subject\ to \quad f(\underline{x}) \le 0 \end{cases}$$

اگر تابع لاگرانژ را به‌صورت زیر تعریف کنیم:

$$L(\underline{x},\lambda)=\underbrace{y(\underline{x})}_{Objective\ func.}+\underbrace{\lambda[f(\underline{x})+x_s^2]}_{Added\ term\ including\ slack\ variable}$$

آنگاه شرط لازم (یافتن) برای اکسترمم بودن:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial L}{\partial x_i}=0 \\ \dfrac{\partial L}{\partial x_s}=0 \\ \dfrac{\partial L}{\partial \lambda}=0 \end{cases}$$

عبارت دوم را درنظر بگیرید، با بسط آن خواهیم داشت: $\dfrac{\partial L}{\partial x_s}=0 \rightarrow 2\lambda x_s=0$

از روی همین عبارت می‌توان قضاوت‌های زیر را انجام داد:

اگر در نهایت λ معادل صفر شد ولی x_s صفر نبود، آنگاه از شرط $\le$، فقط شرط $\prec$ برقرارست، درنتیجه قید مربوطه غیرفعّال است ولی اگر λها مخالف صفر ولی متغیّر کمبود معادل صفر شد، آنگاه فقط شرط مساوی (=) برقرار است و لذا قید مربوطه فعّال است.

مثال ۱۰. همان مثال فرآیندی قبلی را درنظر بگیرید ولی با قید نامساوی $PR \le 9000$

حل: تعریف تابع لاگرانژ
$$L \equiv 1000P + 4\times10^9 / PR + 2.5\times10^5 R + \lambda(PR + x_s^2 - 9000)$$

شرایط لازم:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial L}{\partial P} = 0 \\ \dfrac{\partial L}{\partial R} = 0 \\ \dfrac{\partial L}{\partial x_s} = 0 \\ \dfrac{\partial L}{\partial \lambda} = 0 \end{cases} \rightarrow \begin{cases} 1000 - 4\times10^9 / P^2 R + \lambda R = 0 \\ 2.5\times10^5 - 4\times10^9 / PR^2 + \lambda P = 0 \\ 2\lambda x_s = 0 \\ PR + x_s^2 - 9000 = 0 \end{cases}$$

حل دستگاه غیرخطّی بالا دارای دو حالت است: (از روی معادله سوم)

حالت اول: $\lambda \ne 0 \quad \& \quad x_s = 0$

دراین حالت قید فعّال است و به جواب قبلی می‌رسیم، یعنی

$$P = 1500\, psi\,,\ R = 6\,,\ \lambda = -117.3\,,\ C = 3.44\times10^6\ \$/yr.$$

حالت دوم: $\lambda = 0 \quad \& \quad x_s \ne 0$

در این حالت قید غیرفعال است و به جواب اول می‌رسیم، یعنی

$$P = 1000\, psi\,,\ R = 4\,,\ \lambda = 0\,,\ C = 3.00\times10^6\ \$/yr.$$

روش فوق‌المذکور برای فقط یک نامساوی بود(محض یادآوری در تعداد قیود نامساوی برخلاف قیود مساوی هیچ محدودیتی نداریم) و برای بیشتر از یکی، مسئله سخت می‌شود. یک روش پیشنهادی در مراجع آمده‌است [3,4] .

بار اطّلاعاتی و قابلیت تعبیر ضرایب لاگرانژ

به‌طور مثال فرض کنید فقط قیود مساوی داریم، یا اینکه فقط قسمت مساوی (اکید) قیود نامساوی را درنظر بگیرید. سپس با بازآرایی قیود (به‌طوریکه سمت راست عبارات فقط اعداد ثابت باشند)، مسئله دارای تعبیر هندسی می‌شود، بدین معنی که ثوابت مربوطه معمولاً میزان تقاضا، ظرفیت دستگاه‌ها یا میزان تولید هستند، چراکه از روابط بیلان جرم و انرژی به‌دست آمده‌اند. در مباحث فرابهینه‌سازی می‌توان ثابت کرد که میزان تغییر یا حساسیت تابع هدف (مقدار مینیمم یا ماگزیمم) به این ثوابت با مقادیر ضرایب لاگرانژ در نقطه بهینه برابرند. برای فهم و اثبات ساده، فرض کنید یک تابع دومتغیّره همراه با قید مساوی به‌شکل زیر داریم:

$$\begin{cases} Optimize \quad y(x_1,x_2) = f(x_1,x_2) \\ Subject\ to\ \ g(x_1,x_2) - b = 0 \quad or \quad g(x_1,x_2) = b \end{cases} \qquad (۲۹)$$

ابتدا با قاعده زنجیری، مقدار ${\partial y}/{\partial b}$ را برحسب سایر خصوصیات دیفرنسیالی مربوط کنید:

$$\frac{\partial y}{\partial b} = \frac{\partial y}{\partial x_1}\frac{\partial x_1}{\partial b} + \frac{\partial y}{\partial x_2}\frac{\partial x_2}{\partial b} \qquad (۳۰)$$

مشابه همین کار را برای قید مساوی انجام دهید:

$$\frac{\partial g}{\partial x_1}\frac{\partial x_1}{\partial b} + \frac{\partial g}{\partial x_2}\frac{\partial x_2}{\partial b} - 1 = 0 \qquad (۳۱)$$

سپس معادله اخیر را در λ ضرب کرده و با عبارت ماقبل جمع می‌کنیم تا به‌تدریج لاگرانژین و مشتقّات آن ظاهر شود:

$$\begin{aligned}\frac{\partial y}{\partial b} &= \left(\frac{\partial y}{\partial x_1}+\lambda\frac{\partial g}{\partial x_1}\right)\frac{\partial x_1}{\partial b}+\left(\frac{\partial y}{\partial x_2}+\lambda\frac{\partial g}{\partial x_2}\right)\frac{\partial x_2}{\partial b}-\lambda \\ &= \frac{\partial}{\partial x_1}\{y+\lambda g\}\times\frac{\partial x_1}{\partial b}+\frac{\partial}{\partial x_2}\{y+\lambda g\}\times\frac{\partial x_2}{\partial b}-\lambda \\ &= \frac{\partial L}{\partial x_1}\frac{\partial x_1}{\partial b}+\frac{\partial L}{\partial x_2}\frac{\partial x_2}{\partial b}-\lambda=-\lambda\end{aligned} \tag{۳۲}$$

در عبارت آخر، چون مشتقّات تابع لاگرانژین در نقطه بهینه معادل صفر هستند، لذا میزان تغییر یا حساسیت تابع هدف اصلی به تغییرات ثوابت قیود مساوی (یا حالت فعّال قیود نامساوی) در نقطه بهینه همان ضرایب لاگرانژ محاسبه شده هستند. لازم به‌ذکرست که برای حالت چندمتغیّره، با استقرای همین عبارات و بازآرایی روابط ذکرشده، معادلاً به همین نتیجه می‌رسیم.

شرایط لازم برای بهگزینی مقیّد مساوی چند متغیّره(با استفاده از ضرایب لاگرانژ)، نگاهی دقیق‌تر

فرم کلی یک بهگزینی n متغیّره مقیّد به m قید مساوی به صورت زیر می‌باشد (با نمایش‌های قبلی اشتباه نشود):

$$\begin{array}{lll} Optimize & f(\underline{x}) & \\ S.T. & g_j(\underline{x})=b_j \quad \text{یا} & \underline{g}(\underline{x})=\underline{b} \end{array} \tag{۳۳}$$

به طوریکه x یک بردار n متغیّره از متغیّرهای مستقل(تصمیم‌گیری) مسئله بوده و b_j (یا $\underline{b}$) ثوابت (یا بردار ثابت) سمت راست قیود مساوی می باشند . فرض می‌کنیم تابع هدف f و توابع g_j دارای مقادیر و مشتقات مرتبه اول پیوسته باشند. حال متناظر با هر قید مساوی یک ضریب لاگرانژ تعریف کنید و تابع لاگرانژین را به شکل زیر تشکیل دهید:

$$L(\underline{x},\underline{\lambda})=f(\underline{x})+\sum_{j=1}^{m}\lambda_j(g_j(\underline{x})-\underline{b_j})==f(\underline{x})+\underline{\lambda}^T(\underline{g}(\underline{x})-\underline{b})$$

چون مسأله به این شکل تبدیل به حالت نامقیّد شده‌است، لذا از شرط لازم توابع بهینه‌سازی نامقیّد می‌توان استفاده نمود، یعنی جواب بهینه (ماگزیمم، مینیمم و نقاط عطف) از حلّ دستگاه زیر، با سایز $m+n$ بدست می‌آید:

$$\frac{\partial L}{\partial\underline{\theta}}=\underline{0} \quad ,\underline{\theta}\underline{\underline{\Delta}}[\underline{x}^T:\underline{\lambda}^T]^T$$

و در نتیجه شرط لازم بهینه‌سازی نامقیّد ، باید همان $dL=0$ یا $\underline{\nabla L}=\underline{0}$ باشد، ولی نکته ظریفی وجود دارد و آن هم این است که چون تابعیت L با λ ها، به صورت خطی (affine) می‌باشد، لذا آن بخشی از دستگاه که مشتق نسبت به λ گرفته می‌شود، عملاً همان دستگاه جبری و به طور کلی غیرخطّی قیود مساوی می‌باشد، پس در نقطه اُپتیمم اگر فضای هیچه (Nullity space) این زیردستگاه (یعنی $\underline{g}(\underline{x}^*)=\underline{b}$) دارای بُعد معیّن(غیر صفر) بود و به عبارتی تکین (singular) بود یا استقلال خطی نداشت، آنگاه جواب دستگاه بالا الزاماً نقطه اکسترمم نیست!

این مسأله را (شاید) اولین بار، ژیل و همکاران [7] طرح کردند و برای آن مثال آوردند، در نتیجه به شرط (شرایط) لازم مسأله بهگزینی مقیّد(قیود مساوی)، یک شرط دیگر نیز اضافه شد و آن هم استقلال خطی بردارهای گرادیان $\underline{\nabla g}_j$ می‌باشد.

قضیه ۹- شرط لازم مرتبه اوّل وجود اکسترمم محلی برای مسائل بهگزینی مقید به فقط قیود تساوی (روش لاگرانژ)

برای اینکه $\underline{x}^*$ یک اکسترمم محلی برای مسأله بهگزینی (۳۳) باشد، باید

اولاً) $\underline{x}^*$ در دستگاه $\frac{\partial L}{\partial \underline{\theta}} = \underline{0}$ صادق باشد (یا $\nabla L|_{\underline{x}^*} = \underline{0}$) و

ثانیاً) بردارهای $\nabla g_j|_{\underline{x}^*}$ استقلال خطی داشته باشند.

نکته ۸: وجه تسمیه مرتبه اوّل به این خاطر است که :

اولاً) شرط پیوستگی توابع فقط تا مرتبه اوّل قید شده است و ثانیاً) از مشتقّات مراتب بالاتر استفاده نکرده‌ایم (!)

نکته ۹: شرایط مرتبه دوم (حضور یا ظهور ماتریس هسیان) معمولاً در شرط کافی (ارزیابی) ذکر می شوند.

قضیه ۱۰ – شرط کافی برای مسائل بهگزینی مقیّد به قیود تساوی (با استفاده از روش لاگرانژ)

شرط کافی برای مسأله بهگزینی(۳۳) شامل چک کردن علامت فرم مجذوری زیر می باشد:

$$Q = \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n} \frac{\partial^2 L}{\partial x_i \partial x_j} dx_i dx_j \qquad (۳۴)$$

اثبات: روش اثبات دقیقاً مثل حالت شرط کافی برای بهگزینی نامقیّد می باشد.

نکته: یک الگوریتم مناسب و افتراقی(تمایز بین $\underline{x}$ و λ) برای شرط ارزیابی توسط هنکاک [9] ارائه شده است. بدین صورت که شرط مثبت (منفی) معیّن بودن فرم مجذوری (۳۴) در نقطه اکسترمم مقیّد اینست که ریشه های چند جمله ای زیر که با فرم دترمینان تعریف شده است ، همگی مثبت(منفی) باشند:

$$\begin{vmatrix} L_{11}-Z & L_{12} & L_{13} & \cdots & L_{1n} & g_{11} & g_{21} & \cdots & g_{m1} \\ L_{21} & L_{22}-Z & L_{23} & \cdots & L_{2n} & g_{12} & g_{22} & \cdots & g_{m2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & & \\ L_{n1} & L_{n2} & L_{n3} & \cdots & L_{nn}-Z & g_{1n} & g_{2n} & \cdots & g_{mn} \\ g_{11} & g_{12} & g_{13} & \cdots & g_{1n} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ g_{21} & g_{22} & g_{23} & \cdots & g_{2n} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ g_{m1} & g_{m2} & g_{m3} & \cdots & g_{mn} & 0 & 0 & \cdots & 0 \end{vmatrix} = 0$$

قضیه ۱۱- شرط لازم برای بهینه سازی مقید به فقط قیود نامساوی (استفاده از ضرایب لاگرانژ و متغیّرهای کمبود)

شرط یا شرایط مرتبه اول برای مسائل بهینه سازی مقیّد به فقط قیود نامساوی ، معروف به شرایط کوهن- تاکر (Kuhn-Tucker Conditions - KTC) یا کاروش- کوهن – تاکر (Karush-Kuhn-Tucker Conditions – KKTC) نیز می باشند. لازم به ذکر است که شکل‌ها یا بیان‌های نسبتاً متفاوتی از این قضیه (شرط لازم مرتبه اول) در مراجع مختلف وارد شده

است ولی وجه اشتراک همه آنها در تفهیم نحوی(syntactical) شرایط جامعیّت تقیید(Constrained Qualification Conditions) می‌باشد. علت افتراق نیز بیان این وجه اشتراک به زبان های هندسی(نحوی) و جبری(صَرفی-semantics) بوده است. به هرحال یک اثبات خوب و متین توسط لونبرگر(Leunberger) که خود متخصص هندسه دیفرنسیالی می باشد ارائه شده است [8].

مسأله بهگزینی مقیّد به فقط قیود نامساوی (از نوع کوچکتر یا مساوی) را به شکل زیر در نظر بگیرید:

$$Optimize \quad f(\underline{x}) \tag{۳۵}$$
$$S.T. \quad g_j(\underline{x}) \le 0 \qquad , j = 1,2,\ldots,m$$

با استفاده از متغیّرهای کمبود، قیود نامساوی را به قیود مساوی تبدیل می‌کنیم:

$$G_j(\underline{x},\underline{y}) = g_j(\underline{x}) + y_j^2 = 0 \qquad , j = 1,2,\ldots,m$$

دقّت شود مقادیر متغیّرهای کمبود(y_j) مجهول هستند و لذا آنها را در زمره متغیّرهای مسئله محسوب می‌کنیم.

با تشکیل لاگرانژین، مسأله بهگزینی اوّلیه به مسأله نامقیّد زیر تبدیل می‌شود.

$$L(\underline{x},\underline{y},\underline{\lambda}) = f(\underline{x}) + \sum_{j=1}^{m} \lambda_j G_j(\underline{x},\underline{y}) \tag{۳۶}$$

شرط لازم برای محاسبه(یافتن) نقاط اکسترمم از حلّ دستگاه زیر بدست می‌آید:

$$\frac{\partial L}{\partial x_i}(\underline{x},\underline{y},\underline{\lambda}) = \frac{\partial f}{\partial x_i}(\underline{x}) + \sum_{j=1}^{m} \lambda_j \frac{\partial g_j}{\partial x_i}(\underline{x}) = 0 \qquad , i = 1,2,\ldots,n \tag{۳۷}$$

$$\frac{\partial L}{\partial \lambda_j}(\underline{x},\underline{y},\underline{\lambda}) = G_j(\underline{x},\underline{y}) = g_j(\underline{x}) + y_j^2 = 0 \qquad , j = 1,2,\ldots,m \tag{۳۸}$$

$$\frac{\partial L}{\partial y_j}(\underline{x},\underline{y},\underline{\lambda}) = 2\lambda_j y_j = 0 \qquad , j = 1,2,\ldots,m \tag{۳۹}$$

سه شرط یا سه گروه معادلات بالا برای بیان شرط لازم به طور اساسی و خام کفایت می‌کنند ولی برای کاربردهای عملی و حصول شرایط ساده‌تر می‌توان روی آنها بحث کرده و از تعابیر هندسی و جبری کمک گرفت تا امکان تعمیم به سایر مسائل مبتلابه برقرار شود. در ادامه به محورهای مهمّ مباحثاتی که آنها را مفاهیم مدرن قضیه $KKTC$ در بهگزینی استاتیکی می‌نامیم می‌پردازیم.

۱- سایز دستگاه : در صورتی‌که قصد حل دستگاه (۳۷) تا (۳۹) را داشته‌باشیم، تعداد معادلات معادل $n+2m$ خواهد بود، درحالی‌که تعداد مجهولات برابر n تا متغیّر اصلی(تصمیم‌گیری) به علاوه m تا متغیر کمبود و m تا ضریب لاگرانژ خواهد بود. مجموع مجهولات برابر با $n+2m$ خواهد بود و در نتیجه دستگاه جبری سازگار خواهد بود.

۲- قیود فعّال و غیرفعّال: گروه معادلات غیر خطّی(۳۹) دارای این تعبیر جبری هستند که به ازای یک اندیس نمونه j از قیود، باید یا y_j صفر باشد یا λ_j یا هر دو! در صورتیکه λ_j صفر باشد، یعنی قید متناظر با آن(g_j یا G_j) غیر فعّال است بدین مفهوم که حضور یا عدم حضور آن علی‌السّویه می‌باشد و اگر در مسأله به تنهایی حضور داشت، می‌توانستیم اصلاً مسأله را نامقید حل کنیم. این خاصیت معروف به خاصیت تکمیلی متغیرهای کمبود (Complementary Slackness) می‌باشد. در طرف مقابل اگر y_j صفر باشد، بدین معنیست که به سقف یا مرز برخورده‌ایم و از دو حالت فصلی(کوچکتر یامساوی) نامساوی به حالت مساوی آن برخورده‌ایم . لذا در این

حالت می‌گوییم قید به صورت فعّال عمل کرده‌است. در حالتی که هردو با هم صفر باشند به‌حالتی استثنائی برخورده‌ایم که فصل مشترک هر دو حالت می‌باشد. با تقسیم بندی مجموعه قیود فعّال و غیر فعّال، می‌توان دستگاه معادلات را ساده‌تر کرد و یا حتّی در مسائل ترکیبی، نحوه حلّ را تعقیب کرد. به هر حال اگر دسته بندی قیود را به شکل J_1 (قیود فعال، $y_j = 0$) و J_2 (قیودغیر فعال ، $\lambda_j = 0$) انجام دهیم، آنگاه گروه معادلات(۳۷) به شکل زیر نوشته می‌شود:

$$\frac{\partial f}{\partial x_i} + \sum_{j \in J_1} \lambda_j \frac{\partial g_j}{\partial x_i} = 0 \qquad , i = 1,2,\ldots,n \qquad (۴۰)$$

و متشابهاً گروه معادلات(۳۸) به شکل زیر نوشته می شود:

$$\begin{cases} g_j(\underline{x}) = 0 & j \in J_1 \qquad (۲۲) \qquad (۴۱) \\ \vdots & \\ g_j(\underline{x}) + y_j^2 = 0 & j \in J_2 \qquad (۲۳) \qquad (۴۲) \end{cases}$$

۳- گرادیان تابع هدف: فرض کنید بعد از حلّ دستگاه، قیود را طوری مرتب کرده‌ایم که P قید اوّل فعّال باشند، آنگاه دستگاه معادله (۳۷) یا (۴۰) را به این صورت بازآرائی کنید:

$$-\frac{\partial f}{\partial x_i} = \lambda_1 \frac{\partial g_1}{\partial x_1} + \lambda_2 \frac{\partial g_2}{\partial x_2} + \ldots + \lambda_P \frac{\partial g_P}{\partial x_P} \qquad , i = 1,2,\ldots,n \qquad (۴۳)$$

و اگر به صورت تجمیعی(برای هر i) یا ستونی بنویسیم :

$$-\underline{\nabla f} = \lambda_1 \underline{\nabla g_1} + \lambda_2 \underline{\nabla g_2} + \ldots + \lambda_P \underline{\nabla g_P} \qquad (۴۴)$$

به طوریکه گرادیان تابع هدف و قیود به شکل زیر تعریف می‌شوند:

$$\underline{\nabla f} \triangleq \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f}{\partial x_2} \\ \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial x_n} \end{bmatrix} \quad \text{و} \quad \underline{\nabla g_j} \triangleq \begin{bmatrix} \frac{\partial g_j}{\partial x_1} \\ \frac{\partial g_j}{\partial x_2} \\ \vdots \\ \frac{\partial g_j}{\partial x_n} \end{bmatrix}$$

معادله(۴۴) می‌گوید که جهت منفی بردار گرادیان، ترکیب خطی از قیود فعال در نقطه اکسترمم می‌باشد!

این فراز از قضیه $KKTC$ اساس و پایه ریاضی برخی از روش‌های بهگزینی مقیّد مبتنی بر جستجو می‌باشد.

۴- علامت ضرایب لاگرانژ: برای حالت مینیمم سازی و قیود نامساوی به شکل کوچکتر یا مساوی می‌توان ثابت کرد که ضرایب لاگرانژ باید مثبت باشند! این نکته بسیار شبیه علامت هسیان برای ارزیابی نقطه ایستا (اکسترمم) می‌باشد و شاید به درد شرایط کافی بخورد تا شرایط لازم. اتفاقاً همین طور هم هست، چراکه برای یک فامیلی از مسائل (معروف به برنامه ریزی محدّب) قضیه $KKTC$ هم شرط لازم است و هم شرط کافی!

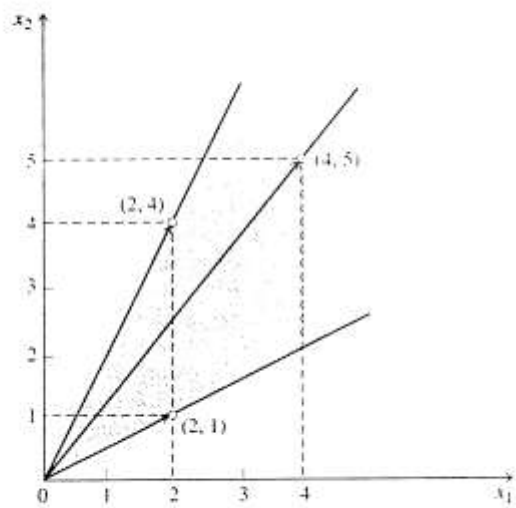
از آنجایی که متعاقب این بحث به مسائل مقیّد کلی (هم قیود مساوی و هم قیود نامساوی) و همچنین وجود یا حضور انواع قیود نامساوی (هم کوچکتر یا مساوی و هم بزرگتر یا مساوی) خواهیم پرداخت، لذا بحث روی علامت ضرایب لاگرانژ را یکبار با بیان هندسی(مفهوم مخروط) و یکبار با بیان جبری دنبال می‌کنیم تا هم سازنده (برای تعمیم) باشد و هم آموزنده (برای فهم بیشتر).

بیان هندسی– یک مخروط مجموعه ای از نقاط $\Re^n$ (n بعدی) می‌باشد به طوریکه اگر $\underline{x}_i$ در $\Re^n$ باشد آنگاه هر ترکیب خطّی از آنها نیز متعلق به $\Re^n$ باشد. یک مخروط محدّب، مخروطی است که خود یک مجموعه محدّب باشد. در شکل (۸) ، نمایش مجسّم یک مخروط برای حالت دوبعدی نشان داده شده است. با توجه به تعریف فوق می‌توان نشان داد که مجموعه متشکل از ترکیب خطی چند بردار یک مخروط محدّب است، یعنی مجموعه P با تعریف زیر:

$$P = \{\underline{x} | \underline{x} = \lambda_1 \underline{x_1} + \lambda_2 \underline{x_2} + \ldots + \lambda_m \underline{x_m} \quad , \lambda_i \geq 0, \qquad i = 1,2,\ldots,m\} \qquad (۴۵)$$

یک مخروط محدّب است و بردارهای $\underline{x}_1, \underline{x}_2, \ldots, \underline{x}_m$ موسوم به پایه‌های مولّد مخروط هستند. در شکل ۸ یک مخروط با پایه های مولّد $[2,1]^T$ و $[2,4]^T$ نشان داده شده‌است. هر بردار که از ترکیب خطی پایه‌های مولّد بدست‌آید در داخل این مخروط قرار می‌گیرد. به طور مثال بردار $[4,5]^T$ از ترکیب خطی (با وزن مساوی) از بردارهای پایه فوق‌المذکور بدست‌آمده‌است.

$$\begin{bmatrix} 4 \\ 5 \end{bmatrix} = 1 \times \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix} + 1 \times \begin{bmatrix} 2 \\ 4 \end{bmatrix}$$



شکل ۸- یک مخروط محدّب دو بعدی نمونه.

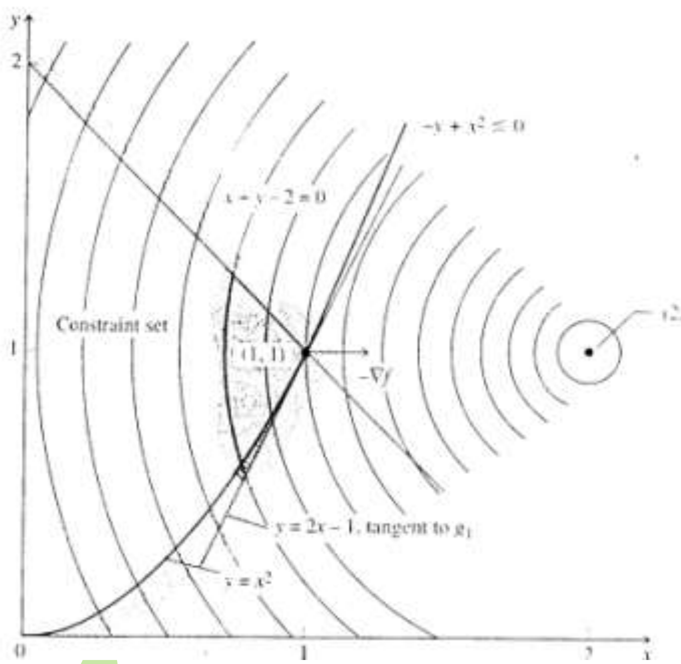
حال اگر به شرط $KKTC$ برای بهگزینی مقید (نامساوی) برگردیم، می‌گوید در هر نقطه اُپتیمم(اکسترمم) مقیّد و نسبی، به ازای یک تغییر کوچک در متغیّر مستقل نباید هیچ بهبودی در مقدار تابع هدف مشاهده شود.

یک مسأله بهینه سازی نمونه (پایه) دو متغیّره به شکل زیر در نظر بگیرید:

$$\begin{aligned} &Minimize \quad && f(\underline{x}) = (x_1 - 2)^2 + (x_2 - 1)^2 \\ &S.T: && g_1(\underline{x}) = x_1^2 - x_2 \leq 0 \\ & && g_2(\underline{x}) = x_1 + x_2 \leq 2 \\ & && g_3(\underline{x}) = x_2 \geq 0 \end{aligned}$$

منحنی‌های تراز تابع هدف به همراه قیود مربوطه در شکل (۹) نشان داده شده‌است. همانطور که از شکل پیداست نقطه اکسترمم نامقیّد نقطه(۱و۲) می‌باشد، در حالی‌که اکسترمم مقیّد در محلّ منتهی‌الیه سمت راست و محل تقاطع دو قید g_1 و g_2 یعنی نقطه (۱و۱) اتفاق می‌اُفتد.

محض یادآوری، از آن‌جائیکه فقط قسمت مساوی قیود در محل اُپتیمم برقرار است، موسوم به قیود فعّال هستند، در حالی‌که قید g_2 به صورت اکیداً نامساوی برقرارست، لذا این قید در نقطه اُپتیمم غیر فعُال است. حال یک جهت یا راستای مجاز(feasible direction) تعریف کنید که اگر به طور دیفرانسیلی در راستای آن حرکت کنیم، آن موقع هیچ قیدی را نقض نکند و در عین حال باعث کاهش مقدار تابع نیز بشود. دقت کنید بحث جهت برقرار است و نه مقدار حدّی. از روی شکل (۱۰) این مسأله به طور شهودی پیداست که جهات و راستاهای مجاز باید در مخروط متشکل از گرادیان‌های g_1 و g_2 قرار بگیرند.



شکل۹- منحنی‌های تراز یک مسئله بهگزینی نامقیّد (به قیود نامساوی).

دقت شود که راستای گرادیان f ، منجر به بیشترین سرعت افزایش f شده و در نتیجه $-\underline{\nabla f}$ جهت کاهش f با بیشترین سرعت می‌باشد. پس با برهان خلف می‌توان ثابت کرد که شرط $KKTC$ با تعبیر هندسی به این شکل است که $-\underline{\nabla f}$ در مخروط متشکل از پایه های $-\underline{\nabla g}_1$ و $-\underline{\nabla g}_2$ (قیود فعّال در نقطه اپتیمم) قرار بگیرد یا به عبارت معادل، $\underline{\nabla f}$ در مخروط متشکل از پایه های مولد $-\underline{\nabla g}_1$ و $-\underline{\nabla g}_2$ قرار بگیرد.
لازم به ذکر است که بیان جبری خاصیت فوق در آیتم قبلی (مورد ۳- گرادیان تابع هدف) ذکر شد ودر ادامه بحث درباره علامت λ_j به کمک دو تعبیر هندسی و جبری در حالت دو متغیّره همراه با دو قید فعّال می‌پردازیم.

خاصیت گرادیان که در بالا ذکر شد برای حالتی که فقط دو قید فعّال در نقطه اُپتیمم داشته‌باشیم به شکل زیر خواهد بود:

$$-\underline{\nabla f} = \lambda_1 \underline{\nabla g}_1 + \lambda_2 \underline{\nabla g}_2 \qquad (۴۶)$$

فرض کنید بردار $\underline{S}$ یک جهت مجاز در نقطه اُپتیمم باشد. محض یادآوری، یک جهت مجاز در نقطه‌ای مانند $\underline{x}$ به صورت برداری تعریف می‌شود که بتوان در راستای آن گام‌های دیفرانسیلی برداشت بدون اینکه از ناحیه مجاز (ناحیه‌ای که قیود نامساوی صادق باشند) خارج شویم. این تعریف را می‌توان به صورت هندسی نشان داد :

$$\underline{S}^T \underline{\nabla g}_j \prec 0$$

یعنی راستاهای مجاز با بردار زمان قیود زاویه منفرجه(زاویه بین$^\circ$۹۰ و$^\circ$۱۸۰) می‌سازند. یک حالت استثناء برای این تعریف وجود دارد و آنهم قیود خطّی یا کاو ($Concave$) هستند که ممکن است زاویه سازنده بین راستای مجاز و بردار نرمال قید به $^\circ$۹۰ برسد و لذا تعریف راستای مجاز را به صورت کلّی زیر می‌نویسند:

$$\underline{S}^T \underline{\nabla g}_j \le 0$$

اگر به اصل بحث برگردیم، با ضرب داخلی بردار نمونه $\underline{S}$در طرفین رابطه (۴۶) به تساوی اسکالر زیر می‌رسیم:

$$-\underline{S}^T \underline{\nabla f} = \lambda_1 \underline{S}^T \underline{\nabla g}_1 + \lambda_2 \underline{S}^T \underline{\nabla g}_2 \qquad (۴۷)$$

از آنجائیکه بردار $\underline{S}$ بیانگر یک راستای مجازست لذا :

$$\underline{S}^T \underline{\nabla g}_1 \le 0 \qquad \text{و} \qquad \underline{S}^T \underline{\nabla g}2 \le 0$$

در نتیجه برای اینکه رابطه(۴۷) برقرار باشد، باید λ_1 و λ_2 مثبت باشند. دقّت کنید اگر با نگرش هندسی به تعریف مخروط محدّب برگردیم، این خاصیت در تعریف رابطه مخروط محدّب، مکتوم، مسلّم و مقدّم (رابطه ۴۵) بود، فافهم !

نکته: لازم به ذکر است اگر همین استدلال را برای حالت ماگزیمم‌سازی داشته باشیم یا قیود نامساوی مینیمم‌سازی به صورت بزرگتر یا مساوی باشند، آنگاه شرط فوق الذکر به صورت منفی بودن ضرایب لاگرانژ فعّال در می‌آید.

۵- خلاصه تطبیقی شرط لازم KKT : اگر بخواهیم شرط لازم را برای سه حالت نامقیّد، مقیّد مساوی و مقیّد نامساوی (شرط کوچکتر یا مساوی) خلاصه و مقایسه کنیم، برای حالت نامقیّد شرط صفر بودن دیفرنسیال کامل تابع هدف و برای حالت مقیّد مساوی شرط صفربودن دیفرنسیال مقیّد و برای حالت فقط مقیّد نامساوی، شرط صفربودن دیفرانسیل کامل لاگرانژین می‌باشد. در حالت مقیّد نامساوی، شمّه‌ای از شرط کافی، یعنی علامت λ_j (برای قیود فعّال) را می‌توان اضافه کرد:

$$\frac{\partial f}{\partial x_i} + \sum_{j \in J_1} \lambda_j \frac{\partial g_j}{\partial x_i} = 0 \qquad i = 1,2,\ldots,n$$

شرط اضافی برای مینیمم‌سازی و قید کوچکتر یا مساوی:

$$\lambda_j \succ 0 \quad , \quad j \in J_1 \qquad (۴۸)$$

(یا) شرط اضافی برای ماکزیمم‌سازی و قید کوچکتر یا مساوی:

$$\lambda_j \prec 0 \quad , \quad j \in J_1 \qquad (۴۹)$$

شرایط بالا به افتخار دو ریاضی دان کوهن و تاکر، نامگذاری شده‌اند[10]، چون اوّلین بار بحث علامت ضرایب لاگرانژ را در قضیه(شرط لازم) گنجاندند. بعداً کارهای زیادی توسط محقّقین روی آن انجام شد به‌طوریکه در مراجع مختلف واریانت‌های مختلفی از آن درج شده است. به طور مثال در یک شاخه‌ای از بهگزینی مقیّد، موسوم به برنامه‌ریزی محدّب، این قضیه و عکس آن مطرح می‌شود، به عبارتی شرط KT، یک شرط لازم و کافی می‌باشد. در یک واریانت

دیگر، این ایراد مطرح می‌شود که قبل از حل دستگاه جبری نمی‌دانیم کدام قید فعّال می‌باشد و کدام قید غیر فعّال شده است، لذا قضیه KT را برای حالت مقیّد فقط نامساوی به این شکل می‌نویسند:

$$\frac{\partial f}{\partial x_i}+\sum_{j=1}^{m}\lambda_j\frac{\partial g_j}{\partial x_i}=0 \qquad i=1,2,\ldots,n$$
$$\lambda_i g_j=0 \qquad j=1,2,\ldots,m$$
$$g_j\le 0 \qquad j=1,2,\ldots,m$$
$$\lambda_j\ge 0 \qquad j=1,2,\ldots,m \qquad (۵۰)$$

دقّت شود که در رابطه اوّل، ایندکس j به‌طور کلّی نوشته شده‌است و خبری از مجموعه J_1 (مجموعه قیود فعّال) نمی‌باشد. همچنین رابطه دوم که معادل رابطه(۳۹) نوشته شده، به شکل دیگر و بدون حضور متغیّر کمبود(یعنی y_j) نوشته شده‌است. دلیل این کار اینست که قبل از حل مسأله دستگاه جبری، نمی‌توان از قیود فعّال یا غیر فعّال صحبت کرد، لذا به میان کشیدن y_j بی‌مورد و بلاموضوع می‌شود.

قضیه ۱۲ - شرایط لازم برای مسائل بهگزینی مقیّد (هم تساوی و هم نامساوی)

اگر به‌طور همزمان مسأله بهگزینی را همراه با قیود تساوی و نامساوی به شکل زیر بنویسیم:

$$\begin{array}{lll} Optimize & f(\underline{x}) & \\ S.T. & g_j(\underline{x})\le 0 & ,\ j=1,2,\ldots,m \\ & h_k(\underline{x})=0 & ,k=1,2,\ldots,P \end{array}$$

آنگاه قضیه KKT به شکل زیر بیان می شود. یک اثبات خوب در مرجع[1] آمده است.

$$(I)\quad \underline{\nabla f}+\sum_{j=1}^{m}\lambda_j\underline{\nabla g}_j-\sum_{k=1}^{P}\beta_k\nabla h_k=\underline{0}$$
$$(II)\quad \lambda_j g_j=0 \quad ,\ j=1,2,\ldots,m$$
$$(III)\quad g_j\le 0 \quad ,\ j=1,2,\ldots,m$$
$$(IV)\quad h_k=0 \quad ,k=1,2,\ldots,P$$
$$(V)\quad \begin{cases}\lambda_j\ge 0 & ,\ j=1,2,\ldots,m \quad \text{(برای مینیمم‌سازی)}\\ \lambda_j\le 0 & ,\ j=1,2,\ldots,m \quad \text{(برای ماکزیمم‌سازی)}\end{cases}$$

(VI) بردارهای گرادیان g_j (برای $j\in J_1$) و ∇h_k در نقطه اُپتیمم مستقل خطی‌اند.

همانطور که قبلاً نیز ذکر شد شرط آخر موسوم به شرط جامعیّت قیود است و اگر قضیه برای مسائل محدّب به کار رود، بخشی از شرایط کافی مسأله نیز می شود (موسوم به شرایط مرتبه اول). به هر حال اگر این شرط نقض شود،ممکن است جوابی برای حلّ دستگاه فوق نیابیم یا بی‌نهایت جواب بیابیم!

چک کردن این شرط قبل از محاسبه نقطه اُپتیمم مشکل است ولی برای دو حالت زیر، شرط مزبور به طور خودکار ارضاء می‌شوند:

۱- اگر تمام قیود اعم از مساوی و نامساوی خطّی باشند.

۲- اگر قیود نامساوی محدّب بوده و همه توابع قیود مساوی خطّی باشند و حداقل یک بردار ممکن مثل $\tilde{x}^*$ وجود داشته باشد که اکیداً داخل منطقه ممکن قرار بگیرد، به طوریکه

$$\begin{cases} g_j(\tilde{x}^*) \prec 0 & , j=1,2,\dots,m \\ h_k(\tilde{x}^*)=0 & , k=1,2,\dots,P \end{cases}$$

مثال۱۱: مسأله مینیمم‌سازی زیر را همراه با قیود مربوطه درنظر بگیرید:

$$\begin{aligned} &Minimize && f(x_1,x_2)=(x_1-1)^2+x_2^2 && (E_1) \\ &S.T. && g_1(x_1,x_2)=x_1^3-2x_2 \le 0 && (E_2) \\ & && g_2(x_1,x_2)=x_1^3+2x_2 \le 0 && (E_3) \end{aligned}$$

مطلوبست کنترل شرط جامعیت و شرایط KKT در نقطه اُپتیمم.

حل: ناحیه ممکن حلّ و منحنی‌های تراز مسأله در شکل(۱۰) نشان داده شده‌اند. همان‌طور که به‌طورگرافیکی معلوم است، نقطه مبدأ یک نقطه اُپتیمم مسأله می‌باشد. از آنجائی‌که g_1 و g_2 هردو در مبدأ فعّال هستند، لذا باید گرادیان آنها را محاسبه کنیم:

$$\underline{\nabla g}_1(\underline{x}^*)=\begin{bmatrix}3x_1^2\\-2\end{bmatrix}\Bigg|_{(0,0)}=\begin{bmatrix}0\\-2\end{bmatrix} \quad ,$$

$$\underline{\nabla g}_2(\underline{x}^*)=\begin{bmatrix}3x_1^2\\2\end{bmatrix}\Bigg|_{(0,0)}=\begin{bmatrix}0\\2\end{bmatrix} \quad ,$$

با توجه به محاسبه گرادیان‌ها، بدیهیست که آنها وابسته خطّی‌اند (گرادیان g_1 قرینه گرادیان g_2 است) در نتیجه شرط جامعیّت برقرار نیست. اگر سایر شرایط KT را نیز بنویسیم خالی از لطف نخواهد بود.

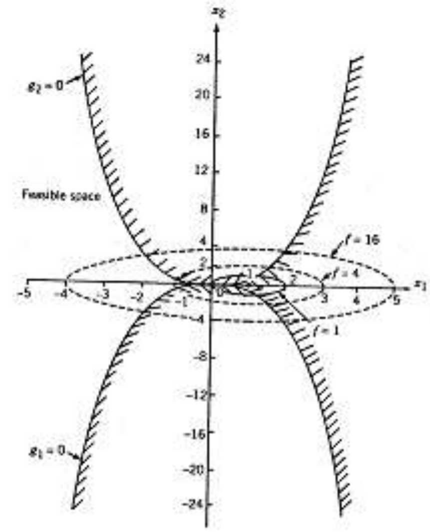
اگر گرادیان تابع هدف را بنویسیم:

$$\underline{\nabla f}(\underline{x}^*)=\begin{bmatrix}2(x_1-1)\\2x_2\end{bmatrix}\Bigg|_{(0,0)}=\begin{bmatrix}-2 & 0\end{bmatrix}^T$$

و در شرایط KT بگذاریم:

$$\begin{aligned} &-2+\lambda_1(0)+\lambda(0)\neq 0 && (E_4) \\ &0+\lambda_1(-2)+\lambda_2(2)=0 && (E_5) \\ &\lambda_1 \succ 0 && (E_6) \\ &\lambda_2 \succ 0 && (E_7) \end{aligned}$$

و چون شرط (E_4) صادق نیست، در نتیجه شرایط KT در نقطه اُپتیمم صادق نیست.



شکل ۱۰ – ناحیه ممکن حلّ همراه با منحنی‌های تراز مثال ناقض شرایط KKT

مثال۱۲: یک شرکت سازنده یخچال‌های خانگی قراردادی مبنی بر ساخت و تحویل ۵۰ یخچال در انتهای هر ماه برای کلّ تعداد ۱۵۰ دستگاه بسته است (ظرف سه ماه باید تحویل دهد). هزینه تولید هر x دستگاه در هر ماه معادل ($x^2 + 1000$) دلار می‌باشد. کارخانه می‌تواند هر تعداد یخچال اضافه بر این قرارداد بسازد و در انبار برای تحویل در ماه بعد نگهدارد ولی این کار برابر با ۲۰دلار به‌ازای هر دستگاه برایش هزینه دارد. فرض کنید هیچ یخچالی ابتدائاً در انبار نیست. مطلوبست میزان تولید ماهانه کارخانه برای اینکه هزینه کلّ (شامل هزینه تولید و انبارداری) حداقل شود.

حل: فرض کنید x_3, x_2, x_1 بیانگر تعداد دستگاه ساخته شده در هر ماه باشد، هزینه کلّ به شکل زیر محاسبه می‌شود:

$$f(x_1,x_2,x_3) = (x_1^2+1000)+(x_2^2+1000)+(x_3^2+1000)+20(x_1-50)$$
$$+20(x_1+x_2-100) = x_1^2+x_2^2+x_3^2+40x_1+20x_2$$

قیود نامساوی را می توان به این شکل نوشت:

$$g_1(\underline{x}): \quad x_1 - 50 \geq 0$$
$$g_2(\underline{x}): \quad x_1 + x_2 - 100 \geq 0$$
$$g_3(\underline{x}): \quad x_1 + x_2 + x_3 - 150 \geq 0$$

شرایط KKT را برای این مسأله می‌نویسیم(لاگرانژین)

$$\frac{\partial f}{\partial x_i} + \lambda_1 \frac{\partial g_1}{\partial x_i} + \lambda_2 \frac{\partial g_2}{\partial x_i} + \lambda_3 \frac{\partial g_3}{\partial x_i} = 0 \qquad i = 1,2,3$$

که معادل روابط زیر می‌شود:

$$\begin{cases} 2x_1 + 40 + \lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 = 0 & (E_1) \\ 2x_2 + 20 + \lambda_2 + \lambda_3 = 0 & (E_2) \\ 2x_3 + \lambda_3 = 0 & (E_3) \end{cases}$$

و در ادامه، برای $j = 1,2,3$, $\lambda_j g_j = 0$ خواهیم داشت:

$$\begin{cases}\lambda_1(x_1-50)=0 & (E_4)\\ \lambda_2(x_1+x_2-100)=0 & (E_5)\\ \lambda_3(x_1+x_2+x_3-150)=0 & (E_6)\end{cases}$$

و سپس برای $, j=1,2,3 \quad : g_j \geq 0$

$$\begin{cases}x_1-50\geq 0 & (E_7)\\ x\ \ +x_2-100\geq 0 & (E_8)\\ x_1+x_2+x_3-150\geq 0 & (E_9)\end{cases}$$

و چون مسأله مینیمم‌سازی است، برای $, j=1,2,3 \quad \lambda_j \leq 0$، خواهیم داشت:

$$\begin{cases}\lambda_1\leq 0 & (E_{10})\\ \lambda_2\leq 0 & (E_{11})\\ \lambda_3\leq 0 & (E_{12})\end{cases}$$

برای شروع حلّ، از ساده ترین عبارت یعنی (E_4) شروع می کنیم:

حالت۱) λ_1 صفر است. معادلات (E_1) تا (E_3) منجر به نتیجه زیر می شود:

$$\begin{cases}x_3=-\lambda_3/2\\ x_2=-10-\lambda_2/2-\lambda_3/2\\ x_1=-20-\lambda_2/2-\lambda_3/2\end{cases} \qquad (E_{13})$$

با جایگزینی عبارات (E_{13}) در روابط (E_5) و (E_6) خواهیم داشت:

$$\begin{cases}\lambda_2(-130-\lambda_2-\lambda_3)=0\\ \lambda_3(-180-\lambda_2-3/2\lambda_3)=0\end{cases} \qquad (E_{14})$$

در معادلات (E_{14}) ، چون دو تا λ به صورت ضربی ظاهر شده‌اند، لذا چهار حالت ممکن است پیش بیاید.

الف) λ_2 صفر باشد و در نتیجه:

$$-180-\lambda_2-3/2\lambda_3=0 \quad \to (E_{13}) \qquad \to$$

جایگذاری در

$$, \lambda_3=-120, x_1=40, x_2=50, x_3=60 \qquad (\lambda_2=\lambda_1=0)$$: یک حلّ کاندیدا

این جواب معادلات (E_{10}) تا (E_{12}) را ارضاء می کند، ولی معادلات (E_7) و (E_8) را نقض می‌کند. نتیجه اینکه این نقطه اُپتیمم نیست.

ب) λ_3 صفر باشد و در نتیجه:

$$-180-\lambda_2-3/2\lambda_3=0 \quad \rightarrow (E_{13}) \quad \rightarrow$$
جایگذاری در

یک حلّ کاندیدا : $(\lambda_3=\lambda_1=0) \quad ,\lambda_2=-130, x_1=45, x_2=55, x_3=0$

این جواب معادلات (E_{10}) تا (E_{12}) را ارضاء می کند، ولی معادلات (E_7) و (E_9) را نقض می کند. نتیجه اینکه این نقطه اُپتیمم نیست.

ب) λ_3,λ_2 هر دو صفر باشد و در نتیجه:

$$\lambda_2=\lambda_3=0 \quad \rightarrow (E_{13}) \quad \rightarrow$$
جایگذاری در

یک حلّ کاندیدا : $(\lambda_3=\lambda_1=0) \quad ,\lambda_2=-130, x_1=45, x_2=55, x_3=0$

این جواب معادلات (E_{10}) تا (E_{12}) را ارضاء می کند، ولی قیود (E_7) تا (E_9) را نقض می کند و نمی‌تواند اُپتیمم باشد.

ب) λ_3,λ_2 هر دو غیر صفر هستند :

$$\begin{cases}-130-\lambda_2-\lambda_3=0\\ \\ -180-\lambda_2-3/2\lambda_3=0\end{cases} \rightarrow \lambda_2=-30, \lambda_3=-100 \rightarrow (E_{13})$$
جاگذاری در →

یک حلّ کاندیدا : $(\lambda_1=0,\lambda_2=-30,\lambda_3=-100), x_1=45, x_2=55, x_3=50$

این جواب معادلات (E_{10}) تا (E_{12}) را ارضاء می کند، ولی قید (E_7) را نقض می‌کند و در نتیجه نقطه اُپتیمم نیست.

حالت ۲) $x_1=50$ باشد، در این حالت معادلات (E_1) تا (E_3) به شکل زیر در می‌آیند:

$$\begin{cases}\lambda_3=-2x_3\\ \lambda_2=-20-2x_2-\lambda_3=-20-2x_2=2x_3\\ \lambda_1=-40-2x_1-\lambda_2-\lambda_3=-120+2x_2\end{cases} \qquad (E_{15})$$

با جایگذاری مجموعه معادلات (E_{15}) در معادلات (E_5) و (E_6) :

$$\begin{aligned}&(-20-2x_2+2x_3)(x_1+x_2-100)=0\\ &(-2x_3)(x_1+x_2+x_3-150)=0\end{aligned} \qquad (E_{16})$$

مجدداً ملاحظه می‌کنیم، چهار حالت ممکنست پیش بیاید:

الف) ترکیب زیر را در نظر می‌گیریم:

$$\begin{cases}-20-2x_2+2x_3=0\\ \\ x_1+x_2+x_3-150=0\end{cases} \rightarrow (x_1=50), x_2=45, x_3=55 \rightarrow (E_8)$$
نقض

ب) ترکیب زیر:

$$\begin{cases}-20-2x_2+2x_3=0\\ \\ -2x_3=0\end{cases} \rightarrow (x_1=50), x_2=-10, x_3=0 \rightarrow (E_9),(E_8)$$
نقض

ج) ترکیب زیر را در نظر می‌گیریم:

$$\begin{cases} x_1 + x_2 - 100 = 0 \\ -2x_3 = 0 \end{cases} \rightarrow (x_1 = 50), x_2 = 50, x_3 = 0 \rightarrow (E_4) \text{ نقض}$$

د) و ترکیب نهایی :

$$\begin{cases} x_1 + x_2 - 100 = 0 \\ x_1 + x_2 + x_3 - 150 = 0 \end{cases} \rightarrow (x_1 = 50), x_2 = 50, x_3 = 50$$

این حلّ امیدوارکننده است، چراکه تمام قیود (E_7) تا (E_9) را ارضاء می‌کند. با جایگزینی این مقادیر در مجموعه معادلات (E_{15}) :

$$\lambda_1 = -20, \lambda_2 = -20, \lambda_3 = -100 \rightarrow \text{ارضای } (E_{10}) \text{ تا } (E_{12})$$

در نتیجه جواب نهایی به شکل زیر بدست می‌آید:

$$x_1^* = x_2^* = x_3^* = 50$$

قضیه ۱۳- شرط کافی برای مسائل بهگزینی مقیّد مساوی توأم با قیود نامساوی

همانطور که قبلاً نیز اشاره شد، قضیه KKT برای مسائل محدّب هم شرط لازم می‌باشد و هم شرط کافی و در صورتی‌که این طور نباشد یا نتوان محدّب بودن را تضمین کرد، آنگاه از شرایط مرتبه دوم، یعنی استفاده از علامت ماتریس هسیان (جملات بسط تیلور که از مشتقّ دوم تابع چند متغیّره استفاده می‌کند) برای تعیین ماگزیمم یا مینیمم‌بودن بهره می‌گیریم.

مشابه حالت نامقیّد، ماتریس هسیان را برای لاگرانژین تشکیل داده و در نقطه اکسترمم، علامت آن را تعیین می‌کنیم.

فقط باید دقّت نمود که محاسبه هسیان باید در قیود فعّال صورت بگیرد:

$$\underline{Y}^T H(\underline{x}^*, \underline{\lambda}^*, \underline{\beta}^*)\underline{Y} \quad \text{: (فرم مجذوری تحت مطالعه)}$$

برای تمامی بردارهای غیر صفر $\underline{Y}$ ، به طوریکه:

$$J(\underline{x}^*)\underline{Y} = \underline{0}$$

و $J(\underline{x}^*)$ ماتریس ژاکوبین یا ماتریسی است که سطور آن گرادیان قیود فعّال در $\underline{x}^*$ می باشد.

اگر فرم مجذوری بالا، مثبت معیّن باشد، نقطه اکسترمم، نقطه مینیمم بوده و در صورت منفی معیّن بودن، نقطه اُپتیمم مسأله، تابع هدف را ماگزیمم می‌کند. مطالعه تحلیلی و اثبات کامل شرایط کافی(و همچنین لازم) مرتبه دوم در مراجع [8,12] آمده است.

مراجع:

[1]. Beveridge & Schechter, “*Optimization Theory and Practice*”, McGraw-Hil Book Co. NY (1970).

[2]. Wilde & Beightler, “*Foundations of Optimization*”, Prentice-Hall, Inc. Englewood Cliffs, NJ. (1967).

[3]. L. Cooper, “*Mathematical Programming for Operation Researchers and Computer Scientists*”, Ed. A.G. Holzman, Marcel Dekker, Inc. NY, (1981).

[4]. Walsh, G.R., “*Methods of Optimization*”, John Wiley & Sons, NY (1979).

[5]. Avriel, M., “*Nonlinear Programming, Analysis and Methods*”, Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, N.J. (1976).

[6]. Reklaitis,G.V. A. Ravindrass and K.M. Ragsdell, ”*Engineering Optimization: Methods and applications*”, John Wiley & Sons, Inc., NY, 1983.

[7]. Gill, P.E., W.A. Murray and M.H. Wright, ”*Practical optimization*”, Academic Press, NY, (1981).

[8]. Leunberger, D.G., *”Linear and Nonlinear Programming”*, 2nd Ed. Adison-Wesley, Menlo Park, CA, (1984).

[9]. Hancock, H., *"Theory of Maxima and Minima"*, Dover, New York, 1960.

[10]. Kuhn, H.W., Tucker, A., *"Nonlinear Programming"*, Proc. Of the 2nd Berkely Symposium on Mathematical Statistics and Probability, University of California Press, Berkeley, 1951.

[11]. Bazara, M.S., Shetty, C.M.; *"Nonlinear Programming: Theory and Algorithms"*, Wiley, New York, (1979).

[12]. Nash, S.G., Sofer, A., *"Linear and Nonlinear Programming"*, McGraw-Hill, New York, (1996).