Optimointi

Mitri Kitti

Kevät 2013

Sisältö

Luku 1

Johdanto

1.1 Peruskäsitteet

1.1.1 Optimointitehtävä

Optimoinnissa tarkastellaan tehtäviä, joissa pyrkimyksenä on minimoida tai maksimoida annettua funktiota. Tehtävässä voi lisäksi olla rajoitteita. Määritellään seuraavaksi täsmällisemmin mistä optimoinnissa on kyse. Samalla tutustumme muutamiin peruskäsitteisiin.

Muuttuja (tai muuttujat), jonka suhdeen optimoindaan on valinta- tai päätösmuuttuja, jonka avulla esitetään valittavissa olevat vaihtoehdot. Tällä kurssilla päätösmuuttuja oletetaan n-uloitteiseksi vektoriksi. Olkoon siis $x = (x_1, \ldots, x_n) \in \mathbb{R}^n$ päätösmuuttuja. Funktio, jota käytetään arviointikriteerinä päätösmuuttujille on $f : X \mapsto \mathbb{R}$, missä $X \subseteq \mathbb{R}^n$. Tätä funktiota kutsutaan kohdefunktioksi. Kohdefunktiota, joko maksimoidaan tai minimoidaan. Optimointiteorian keskeiset tulokset ovat helposti muotoiltavissa kummalle tahansa tehtävätyypile, minimointi- ja maksimointitehtäville. Jatkossa tarkastelemme pääasiassa maksimointitehtävää.

Tehtävää, jossa maksimoidaan kohdefunktiota f muuttujan x-suhteen ehdolla, että x kuuluu joukkoon $Y \subseteq X$, merkitään

$$\max_{x \in Y} f(x).$$

Minimointitehtävässä max korvataan merkinnällä min. Joukkoa Y kutsutaan tehtävän käyväksi joukoksi. Jos $x \in Y$ niin sanotaan että x on käypä piste (tai käypä ratkaisu). Yleensä käypä joukko määräytyy epäyhtälö- ja yhtälörajoitteista. Epäyhtälörajoitteet ovat muotoa $g_1(x) \leq 0, \ldots, g_k(x) \leq 0$, missä $g_i : X \mapsto \mathbb{R}$. Vektorimerkinnöin $g = (g_1, \ldots, g_k)$, $g(x) \leq \mathbf{0}$. Vastaavasti yhtälörajoitteet ovat $h_1(x) = 0, \ldots, h_m(x) = 0$, eli vektorimerkinnöin $h(x) = \mathbf{0}$. Kun tehtävän rajoitteet ovat $g(x) \leq \mathbf{0}$ ja $h(x) = \mathbf{0}$, niin tehtävä kirjoitetaan yleensä muodossa

$$\begin{array}{ll} \max f(x) & \\ \text{siten, että (s.e.)} & g(x) \leq \mathbf{0} \\ & h(x) = \mathbf{0}. \end{array}$$

Listataan muutamia huomioita optimointitehtävien rajoitteista:

- minimointitehtävä voidaan muuttaa maksimointitehtäväksi: $\max f(x) = -\min -f(x)$
- "$\geq$"-rajoitteet voidaan muuttaa "$\leq$"-rajoitteiksi: $g_i(x) \geq 0 \Leftrightarrow -g_i(x) \leq 0$
- "$<$"-rajoitteita ei yleensä voi käyttää koska tällöin ratkaisun löytäminen muuttuu hankalaksi: ratkaisu voi olla mielivaltaisen lähellä tilannetta $g_i(x) = 0$
- yleensä $Y \neq \emptyset$, eivätkä rajoitteet määrää ratkaisua yksikäsitteisesti.

Jos pisteessä x kaikki epäyhtälörajoitteet ovat aitoja, niin sanotaan että x on sisäpiste. Jos pisteessä x pätee $g_i(x) = 0$, sanotaan, että epäyhtälörajoite $g_i(x) \leq 0$ on sitova tai aktiivinen.

Esimerkki 1.1.1. Lähikaupassa myydään vain perunoita ja jauhelihaa. Tehtävä: hae kokonaiskustannukset minimoiva dieetti, joka toteuttaa vähimmäisvaatimukset eri hivenaineiden määrälle

	perunat (/kg)	jauheliha (/kg)	vaatimus
hiilihydraatit	3	1	8
vitamiinit	4	3	19
proteiinit	1	3	7
hinta	25	50	

Muuttujat: x_1 määrä perunoita ja x_2 määrä jauhelihaa. Kohdefunktio = kokonaiskustannus = $25x_1 + 50x_2$. Rajoitteet ovat

$3x_1 + x_2 \geq 8$ (hiilihydraatit)
$4x_1 + 3x_2 \geq 19$ (vitamiinit)
$x_1 + 3x_2 \geq 7$ (proteiinit)
$x_1, x_2 \geq 0$

1.1.2 Optimi

Määritellään seuraavaksi mitä tarkoitetaan optimointitehtävän ratkaisuilla.

Määäritelmä 1.1.1. $x^* \in Y$ on funktion f maksimi joukossa Y jos $f(x^*) \geq f(x)$ kaikilla $x \in Y$.

Tehtävän $\max_{x \in Y} f(x)$ ratkaisu on siis edellä määritelty maksimi x^*, jos sellainen on löydettävissä. Yleisesti ratkaisua ei välttämättä ole, mutta mikäli sellainen löytyy niin merkitään

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

Huomaa, myös, että tällöin

$$f(x^*) = \sup_{x \in Y} f(x) = \max_{x \in Y} f(x).$$

On syytä huomata myös että ratkaisu ei välttämättä ole yksikäsitteinen, eli funktion maksimiarvon $f(x)$ tuottavia käypiä pisteita voi olla useita. Tulemme myöhemmin esittämään ehdot, jotka takaavat optimin yksikäsitteisyyden. Joskus maksimipisteiden joukosta käytetään merkintää

$$\arg\max_{x \in Y} f(x) = \{x^* \in Y : f(x^*) \geq f(x)\ \forall x \in Y\}.$$

Vastaavasti minimipisteille käytetään merkintää

$$\arg\min_{x \in Y} f(x).$$

Funktion minimi voidaan määritellä aivan vastaavasti kuin maksimi. Optimilla (tai ääriarvolla) viitataan joko maksimiin tai minimiin tehtävätyypistä riippuen. Funktion arvo optimissa puolestaan on yksinkertaisesti funktion optimaalinen arvo, tai funktion arvo minimissä/maksimissa.

Edellä määriteltyä maksimia joukossa Y kutsutaan joskus myös f:n globaaliksi maksimiksi joukossa Y. Näiden lisäksi tärkeä ratkaisukäsite optimoinnissa on lokaali optimi.

Määäritelmä 1.1.2. $x \in Y$ on f:n lokaali maksimi joukossa Y, jos löytyy $\varepsilon > 0$ siten, että $f(x^*) \geq f(x)$ kaikilla $x \in N_{\varepsilon(x)} \cap Y$.

Kuten tulemme huomaamaan monet optimointiteorian keskeisistä tuloksista koskevat itseasiassa lokaaleja optimeja.

Jatkossa tulemme perehtymään erilaisiin välttämättömiin ja riittäviin optimaalisuusehtoihin, jotka helpottavat optimipisteiden löytämistä. Tulemme myös olettamaan yleenä erikseen mainitsematta, että tehtävissä esiintyvät funktiot ovat derivoituvia.

1.2 Tehtävätyyppejä

Optimointitehtäviä voidaan luokitella seuraavasti sen mukaan millainen päätösmuuttuja tehtävässä on, tai millaisia sen kohdefunktio ja rajoitteet ovat. Seuraavassa käydään läpi muutamia tehtävä luokkia. Tehtävä, jossa $Y = X = \mathbb{R}^n$ sanotaan rajoittamattomaksi tehtäväksi.

Lineaarisessa tehtävässä (*linear program*) kohdefunktio on lineaarinen, eli muotoa $r \cdot x$ ja rajoitteet ovat muotoa $g_i(x) = \sum_j b_{ij}x_j - c_i$, $i = 1, \ldots, k$, ja $h_i = \sum_j d_{ij}x_j - e_i$, $i = 1, \ldots, m$. Suuretkin lineaariset tehtävät, nk. lineaarisen ohjelmoinnin tehtävät, saadaan ratkaistua numeerisilla menetelmillä tehokkaasti. Tällä kurssilla näihin menetelmiin ei perehdytä sillä pääpaino on epälineaarisilla tehtävillä. Erityisesti tulemme perehtymään konvekseihin ja kvasikonvekseihin tehtäviin.

Esimerkki 1.2.1. Esimerkki lineaarisesta tehtävästä. Sijoitettavana on summa I sijoituskohteisiin $1, \ldots, n$ Sijoituskohteiden odotetut tuotot ovat r_i, $i = 1, \ldots, n$, $r = (r_1, \ldots, r_n)$. Merkitään sijoittavia määriä sijoitettavia määriä vektorilla $x = (x_1 \ldots, x_n)$. Budjettirajoite on $\sum_i x_i \leq I$ ja lisäksi määrille pitää asettaa ei-negatiivisuus rajoitteet $x_i \geq 0$.

Eräs kohdefunktio voisi olla odotettu kokonaistuotto $r \cdot x$. Tällöin tehtävästä tulee lineaarinen. Toisaalta voimme kysyä, että onko tällainen kohdefunktio järkevä, koska se ei mitenkään huomio eri sijoituskohteiden ”riskiä”.

Esimerkki 1.2.2. Esimerkki kuluttajan ongelmasta ja samalla esimerkki kvasikonveksista tehtävästä. Valintamuuttujat x_i edustavat hyödykkeiden $i = 1, \ldots, n$ määriä. Olkoon hyödykkeellä i hinta p_i. Oletetaan, että kuluttajalla on käytössä tulos I, jotka määrttävät kuluttajan käytössä olevan budjetin. Kohdefunktio on kuluttajan hyötyfunktio $U(x)$ ja kuluttajan tehtävän rajoitteet ovat budjettirajoite $p_1x_1 + p_2x_2 + \ldots + p_nx_n \leq I$, sekä ei-negatiivisuusrajoitteet $x_i \geq 0$, $i = 1, \ldots, n$.

Kuluttaja valitsee hyödyn maksimoivan kysyntäkorin annetuilla hinnoilla ja tuloilla (eksogeeniset muuttujat). Tehtävän ratkaisuna saadaan kuluttajan kysyntä, joka siis riippuu p_i:stä ja I:stä, eli tuloksena on kysyntäfunktio

Esimerkki 1.2.3. Esimerkki yrityksen ongelmasta ja samalla esimerkki konveksista tehtävästä. Tässä esimerkissä valintamuuttujat ovat yrityksen käyttämien panosten määrät x_i, $i = 1, \ldots, n$. Tuotos $y \in \mathbb{R}$ kuvaa lopputuotteen määrää ja se saadaan funktiona panosten käytöstä tuotantofunktion f avulla; $y = f(x)$. Tuotteen yksikköhinta on p ja panoksen i yksikköhintaa merkitään w_i:llä. Yrityksen kohdefunktio on sen saama voitto:

$$\Pi(x) = pf(x) - \sum_{i=1}^{n} w_i x_i.$$

Voiton maksimointitehtävän rajoitteet ovat $x_i \geq 0$ ja saatavuusrajoitteet $g_i(x) \leq b_i$, $i = 1, \ldots, k$. Tehtävän ratkaisuna saadaan tarjonta annetuilla hinnoilla, eli tarjontafunktio.

Luku 2

Rajoittamatonta optimointia

2.1 Yhden muuttujan rajoittamaton optimointi

Tässä luvussa kerrataan lyhyesti muutamia tuloksia aikaisemmilta matematiikan kursseilta.

2.1.1 Välttämättömät ja riittävät ehdot

Tarkastellaan tehtävää jossa optimoidaan (maksimoidaan tai minimoidaan) yhden muuttujan suhteen iloman rajoitteita. Optimipisteissä, eli globaaleissa ja lokaaleissa maksimeissa ja minimeissä, funktion derivaatta saa arvon nolla. Tämä on ensimmäisen kertaluvun välttämätön optimaalisuusehto.

Lause 2.1.1. *Jos x^* on lokaali optimi, niin $f'(x^*) = 0$.*

Kyseessä on vain välttämätön ehto. Toisin sanottuna ehdon toteutuminen jossakin pisteessä ei vielä takaa sitä, että piste olisi optimi, mutta ehto antaa kuitenkin kandidaatteja optimeiksi. Pisteitä, joissa funktion derivaatta häviää sanotaan funktion kriittisiksi pisteiksi.

Esimerkki 2.1.1. Olkoon $f(x) = (x^2 - 1)^3$. Etsitään funktion kriittiset pisteet. Derivaatta on $f'(x) = 6x(x^2 - 1)^3$. Havaitsemme, että kriittisissä pisteissä joko $x = 0$ tai $x^2 - 1 = 0$, joten saamme kolme kriittistä pistettä: $x_1 = 0$, $x_2 = 1$ ja $x_3 = -1$. Piirtämällä funktion kuvaajan havaitsemme, että vain $x = 0$ on optimi. Kyseinen piste on globaali minimi. Muut kriittiset pisteet eivät ole minimejä tai maksimeja.

Pisteen optimaalisuus voidaan usein päätellä toisen derivaatan avulla. Seuraavaa tulosta kutsutaan toisen kertaluvun riittäväksi ehdoksi (rajoittamattomalle yhden muuttujan tehtävälle).

Lause 2.1.2. *Jos x^* on funktion kriittinen piste ja $f''(x^*) < 0$, niin x on lokaali maksimi.*

Lokaalille minimille pätee vastaavasti riittävä ehto, että $f''(x^*) > 0$.

Esimerkki 2.1.2. Esimerkissä 2.1.1 voimme tutkia pisteen $x^* = 0$ optimaalisuutta toisen derivaatan avulla. Toinen derivaatta on $f''(x) = 6(x^2-1)^2 + 24x^2(x^2-1)$. Sijoittamalla $x = x^* = 0$ saamme $f''(0) = 6 > 0$, eli kyseessä on (ainakin lokaali) minimi.

Esimerkki 2.1.3. Tarkastellaan neliöllisiä funktioita $f(x) = ax^2 + bx + c$. Derivoidaan ja etsitään derivaatan nollakohdat: $f'(x) = 2ax + b = 0$, mistä saadaan $x^* = -b/(2a)$. Funktion toinen derivaatta on $f''(x) = 2a$. Jos siis $a > 0$ kyseessä on (ainakin lokaali) minimi ja jos $a < 0$ kyseessä on vastaavasti maksimi.

Jos $f''(x) = 0$, niin kriittisen pisteen laadusta ei voi sanoa vielä mitään. Tällöin voi tutkia korkeampia dervaattoja. Ääriarvon laatu voidaan tällöin päätellä seuraavasti.

1. Jos ensimmäinen l, jolle $f^{[l]}(x^*) \neq 0$, on pariton, funktiolla f ei ole ääriarvoa pisteessä x^*.
2. Jos ensimmäinen l, jolle $f^{[l]}(x^*) \neq 0$, on parillinen ja $f^{[l]}(x^*) < 0$, funktiolla f on lokaali maksimi pisteessä x^*.
3. Jos ensimmäinen l, jolle $f^{[l]}(x^*) \neq 0$, on parillinen ja $f^{[l]}(x^*) > 0$, funktiolla f on lokaali minimi pisteessä x^*.

Edellä esitetyn toisen kertaluvun ehdon lisäksi seuraavan tuloksen avulla voidaan päätellä milloin kriittinen piste on globaali optimi. Tulemme huomaamaan myöhemmin, että kyse on itse asiassa kohdefunktion konveksisuuden ja konkaavisuuden tutkimisesta.

Lause 2.1.3. *Jos x^* on funktion kriittinen piste ja $f''(x) \leq 0$ kaikilla x, niin x on globaali maksimi.*

Globaalille minimille pätee vastaavasti riittävä ehto, että $f''(x) \geq 0$ kaikilla x.

2.1.2 Sovellus: optimaalinen hinnoittelu

Oletetaan, että yritys valmistaa ja myy yhtä tuotetta. Yritys valitseen tuotteelleen hinnan p_i, joka maksimoi sen saaman voiton. Yrityksen kannalta muiden samalla markkinalla toimivien yritysten hinnat (vektori p_{-i}) ovat vakioita. Yritysten tuotteille asettamien hintojen perusteella määräytyy yrityksen kohtaama kysyntä $D_i(p_i, p_{-i})$. Määrän $D_i(p_i, p_{-i})$ valmistamisesta aiheutuu kustannus $C(D_i(p_{i,-i}))$. Yrityksen saama voitto on siten

$$\pi_i(p_i, p_{-i}) = p_i D_i(p_i, p_{-i}) - C(D_i(p_i, p_{-i})).$$

Yrityksen hinnan valinta tehtävä voidaan nyt kirjoittaa

$$\max_{p_i} \pi_i(p_i, p_{-i}).$$

Tehtävä ei tarkalleen ottaen ole rajoittamaton, sillä voimme olettaa että hinta on positiivinen. Tämä rajoite on kuitenkin nyt siinä mielessä turha, että nollahinta tai negatiivinen hinta eivät järkevässä tapauksessa kuitenkaan voisi olla ratkaisuja. Itse asiassa päättelemme näin, että vain nk. sisäpisteratkaisu, missä $p_i > 0$, on mielekäs.

Ensimmäisen kertaluvun ehto saadaan derivoimalla π_i muuttujan p_i suhteen ja asettamalla näin saatava derivaatta nollaksi:

$$\partial D_i/\partial p_i + D_i - C'\partial D_i/\partial p_i = 0.$$

Oletetaan, että kustannusfunktioon lisätään hinnasta riippumaton vakiokustannus K. Voimme ajatella vaikka, että tämä kustannus aiheutuu kaupalle myymälävarkauksista. Koska vakiofunktion derivaatta on nolla, ensimmäisen kertaluvun ehto ei muutu. Näin pätee yleisesti: tehtävän $\max f(x)$ ratkaisu on aina sama kuin tehtävän $\max f(x) + c$. Toisin sanottuna yrityksen tuotteelle asettamaan hintaan ei vaikuta mitenkään se, että sen myynnistä tai valmistamisesta aiheutuu kiinteitä kuluja. Tämä pätee luonnollisesti niin kauan, kun K on sen verran pieni, että yrityksen ei kannata kokonaan poistua markkinoilta.

2.2 Yleinen rajoittamaton tehtävä

Tarkastellaan seuraavaksi usean muuttujan rajoittamattomia tehtäviä.

2.2.1 Ensimmäisen kertaluvun ehdot

Edellä esitetty ensimmäisen kertaluvun ehto yleistyy suoraan useamman muuttujan tapaukseen.

Lause 2.2.1. *Jos x^* on funtion optimi, niin $\nabla f(x^*) = \mathbf{0}$.*

Kuten yhden muuttujan tapuaksessa, se, että piste on funktion kriittinen piste (gradientin nollakohta) ei takaa optimaalisuutta.

Esimerkki 2.2.1. Oletetaan, että yritys maksimoi voittoa, joka on muotoa

$$\pi(k, l) = pf(k, l) - rk - wl,$$

missä p on lopputuotoksen hinta, f on yrityksen tuotantofunktio, k on pääoman kysyntä, l on työvoiman kysyntä, r on pääoman vuokrakustannus, w on palkka per yksikko työpanosta.

Katsotaan seuraavaksi mitä ensimmäisen kertaluvun ehdot kertovat yrityksen optimaalisesta pääoman ja työn kysynnästä. Lasketaan ensin π:n gradientti;

$$\nabla\pi(k,l) = \begin{pmatrix} p\frac{\partial f}{\partial k} - r \\ p\frac{\partial f}{\partial l} - w \end{pmatrix}.$$

Tuotantofunktion osittaisderivaattaa k:n suhteen kutsutaan pääoman rajatuotokseksi MP_k ja osittaisderivaattaa l:n suhteen kutsutaan työpanoksen rajatuotokseksi MP_l. Gradientti voidaan kirjoittaa siis

$$\nabla\pi(k,l) = \begin{pmatrix} pMP_k - r \\ pMP_l - w \end{pmatrix}.$$

Ensimmäisen kertaluvun ehto $\nabla\pi(k,l) = \mathbf{0}$ antaa $MP_k = r/p$ ja $MP_l = w/p$. Toisin sanoen kunkin tuotannontekijän rajatuotos on sen lopputuotteen suhteen mitattu suhteellinen hinta.

Lasketaan optimaalinen ratkaisu, kun $f(k,l) = k^\alpha l^\beta$. Tällöin $MP_k = \alpha k^{\alpha-1} l^\beta$ ja $MP_l = \beta k^\alpha l^{\beta-1}$. Ensimmäisen kertaluvun ehdon perusteella $MP_k/MP_l = r/w$. Saamme tästä ratkaistua k:n l:n avulla:

$$k = \frac{\alpha w}{\beta r} l.$$

Sijoittamalla tämä kaavaan $MP_k/MP_l = r/w$ voimme ratkaista optimaalisen l:n. Pienen sieventelyn jälkeen

$$l = (\alpha^\alpha \beta^{1-\alpha} w^{\alpha-1} r^{-\alpha} p)^{\frac{1}{1-\alpha-\beta}}.$$

Optimaalinen pääoman kysyntä puolestaan on

$$k = (\alpha^{\alpha-1} \beta^\beta w^{-\beta} r^{\beta-1} p)^{\frac{1}{1-\alpha-\beta}}.$$

Onko tämä välttämättä optimaalinen ratkaisu? Jos ei, niin silloin ongelmalla ei ole lainkaan ratkaisua.

Esimerkki 2.2.2. Tarkastellaan neliöllisen funktion ääriarvoja. Kohdefunktiona on siis $f(x) = x \cdot Ax + b \cdot x$. Funktion gradientti on $\nabla f(x) = (A + A^\top)x + b$. Asettamalla gradientin nollaksi saamme

$$(A + A^\top)x = -b,$$

eli optimissa $x^* = -(A + A^\top)^{-1} b$, mikäli $(A + A^\top)$ on säännöllinen.

2.2.2 Toisen kertaluvun ehdot

Tutkitaan seuraavaksi sitä miten voidaan päätellä, onko kvadraattisella funktiolla minimi vai maksimi pisteessä x^*. Merkitään funktion f toista derivaattaa pisteessä x^* symbolilla $D^2 f(x^*)$. Taylorin kehitelmä pätee monen muuttujan funktioille: $f(x^* + h) \approx f(x^*) + \nabla f(x^*) \cdot h + (1/2) h \cdot D^2 f(x^*) h$. Voimme tarkastella gradienttia pisteen x funktiona, jolloin

$$\nabla f(x) : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}^n,$$

ja gradientin derivaatta on siis $n \times n$ matriisin kuvaama lineaarinen funktio. Määritellään siis

$$D^2 f(x) = D(\nabla f(x)) = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1 \partial x_1} & \cdots & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n \partial x_1} & \cdots & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n \partial x_n} \end{pmatrix}.$$

Kutsumme tätä toisten derivaattojen matriisia funktion f Hessin matriisiksi. Ainakin funktion toiset derivaatat ovat jatkuvia niin Hessin matriisista tulee symmetrinen matriisi. Eli käytännössä Hessin matriisi on symmetrinen.

Nyt Taylorin teoreema kertoo siis, että pisteelle x^*, jossa $\nabla f(x^*) = \mathbf{0}$, pätee

$$f(x^* + h) - f(x^*) \approx (1/2) h \cdot D^2 f(x^*) h.$$

Se onko funktiolla minimi, maksimi, vai ei kumoaakaan kriittisessä pisteessä x^*, riippuu siitä minkä merkkinen termi $h \cdot D^2 f(x^*) h$ on. Kriittisen pisteen luonne voidaan siis päätellä Hessin matriisin definiittisyyden avulla.

Lause 2.2.2. *Jos x on f:n kriittinen piste ja $D^2 f(x^*)$ on negatiividefiniitti niin x^* on lokaali maksimi.*

Lokaalille minimille pätee vastaavasti, että riittäävä ehto minimille on se, että kriittisessä pisteessä $D^2 f(x^*)$ on positiividefiniitti.

Eräs tapa todeta matriisin definiittisyys on tutkia Hessin matriisin $D^2 f(x)$ pääminorien determinantteja. Hessin matriisi (toiset derivaatat) kertoo funktion kaarevuudesta annetun pisteen ympäristössä. Optimipisteen luonne liittyy oleellisesti siihen millainen tämä kaarevuus on. Yhden muuttujan tapauksessa on helppo havaita, että lokaalissa maksimissa funktion on oltava konkaavi pisteen ympäristössä. Vastaavasti lokaalin minimin tapauksessa funktion on käyttäydyttävä konveksin funktion tavoin. Konvekseihin ja konkaaveihin funktioihin palataan myöhemmin.

Globaaleille ääriarvoille pätee seuraava tulos, johon palataan konkaavien funktioiden yhteydessä.

Lause 2.2.3. *Jos x on f:n kriittinen piste ja $D^2 f(x)$ on negatiivisemidefiniitti kaikilla $x \in \mathbb{R}^n$, niin x^* on globaali maksimi.*

Vastaavasti globaalille minimille riittää se, että $D^2 f(x)$ on positiivisemidefiniitti.

Lisätään vielä huomiona, Hessin matriisin definiittisyydestä, että jos se on kriittisessä indefiniitti niin kyseessä ei ole maksimi eikä minimi vaan nk. satulapiste. Maksimissa Hessin matriisi on aina ainakin negatiivisemidefiniitti ja minimissä positiivisemidefiniitti. Tätä tulosta kutsutaan toisen kertaluvun välttämättömäksi ehdoksi.

Esimerkki 2.2.3. Tarkastellaan funktiota $f(x_1, x_2, x_3) = x_1^2 - x_2^3 + x_1 x_3$ pisteen $\mathbf{0} = (0, 0, 0)$ ympäristössä. Gradientti on

$$\nabla f(x) = \begin{pmatrix} 2x_1 + x_3 \\ -3x_2^2 \\ x_1 \end{pmatrix}.$$

Havaitsemme, että $\mathbf{0}$ on kriittinen piste. Hessin matriisi on

$$D^2 f(x) = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 1 \\ 0 & -6x_2 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Pisteessä $\mathbf{0}$ saamme

$$D^2 f(\mathbf{0}) = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Merkitään tätä matriisia H:lla. Matriisi on indefiniitti, koska $H_1^1 = 2 > 0$ ja

$$H^2_{\{1,3\}} = \det \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = -1.$$

ääriarvon laadusta ei siis voi sanoa tämän perusteella mitään.

Esimerkki 2.2.4. Tarkastellaan funktiota $f(x_1, x_2) = x_1^\rho + x_2^\rho$. Funktion gradientti on

$$\nabla f(x) = \begin{pmatrix} \rho x_1^{\rho-1} \\ \rho x_2^{\rho-1} \end{pmatrix}.$$

Hessin matriisi saadaan derivoimalla gradientin komponentteja

$$D^2 f(x) = \begin{pmatrix} \rho(\rho-1)x_1^{\rho-2} & 0 \\ 0 & \rho(\rho-1)x_2^{\rho-2} \end{pmatrix}.$$

Tämä matriisi on negatiividefiniitti, kun $x_i \neq 0$ ja $\rho \in (0,1)$. Jos funktiolle siis löytyy kriittinen piste, se on maksimi.

Esimerkki 2.2.5. Etsitään funktion $f(x,y) = x^3 - y^3 + 9xy$ kriittiset pisteet ja tutkitaan funktion Hessin matriisia näissä pisteissä. Lasketaan ensn gradientti

$$\nabla f(x,y) = \begin{pmatrix} 3x^2 + 9y \\ -3y^2 + 9x \end{pmatrix}.$$

Asetetaan gradientti nollaksi, jolloin ratkaistavana on yhtälöpari

$$\begin{aligned} x^2 + 3y &= 0 \\ -y^2 + 3x &= 0. \end{aligned}$$

Ratkasitaan ensimmäisestä y muuttujan x suhteen: $y = x^2/3$. Sijoitetaan alempaan, jolloin

$$-x^4/9 + 3x = 0.$$

Tämän yhtälön ratkaisut ovat $x = 0$ ja $x = 3$. Saadaan kaksi kriittistä pistettä siis f:lle. Nämä ovat $(0,0)$ ja $(3,-3)$.

Lasketaan seuraavaksi f:n Hessin matriisi H:

$$\begin{pmatrix} 6x & 9 \\ 9 & -6y \end{pmatrix}.$$

Ensimmäisen pääminorin determinantti on $H_1 = 6x$ ja toisen $H_2 = -36xy - 81$. Pisteessä $(0,0)$ nämä ovat 0 ja -81, joten Hessin matriisi on origossa indefiniitti. Kyse ei siis ole lokaalista maksimista eikä minimistä vaan satulapisteestä. Pisteessä $(3,-3)$ saamme $H_1 = 18$ ja $H_2 = 343$, joten piste on lokaali minimi.

2.2.3 Pienimmän neliösumman tehtävät

Tarkastellaan tilastollista aineistoa, jossa meillä on N paria havaintoja

$$(y_1, x_{11}, x_{12}, \dots, x_{K1}), \dots, (y_1, x_{1N}, x_{12}, \dots, x_{KN}).$$

Merkitään x^i:llä lyhyesti vektoria $(x_{1i}, x_{12}, \dots, x_{Ki})$. Oletetaan, että haluamme sovittaa aineistoon lineaarisen mallin jossa $y_i = \beta \cdot x^i + \varepsilon_i$, missä ε_i on satunnainen virhetermi. Siis tavoitteena on löytää kerroin vektori $\beta \in \mathbb{R}^K$, joka antaa meille sellaisen mallin joka sopii mahdollisimman hyvin aineistoon. Vektoria β vastaa siis virhetermit ε_i, joille pätee

$$\begin{aligned}
y_1 &= \beta_1 x_{11} + \cdots + \beta_K x_{K1} + \varepsilon_1 \\
y_2 &= \beta_1 x_{12} + \cdots + \beta_K x_{K2} + \varepsilon_2 \\
&\vdots \\
y_N &= \beta_1 x_{1N} + \cdots + \beta_K x_{KN} + \varepsilon_N.
\end{aligned}$$

Merkitsemällä y:llä vektoria $(y_1, \dots, y_N)$, ε:lla vektoria $(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_N)$, ja X:llä matriisia, jonka riveinä ovat vektorit x^i voimme kirjoittaa

$$y = X\beta + \varepsilon.$$

Haetaan vektori β minimoimalla virheiden neliösumma, eli otetaan kohdefuntioksi

$$f(\beta) = \varepsilon \cdot \varepsilon = (y - X\beta)^\top (y - X\beta) = y \cdot y - 2y^\top X\beta + \beta^\top X^\top X\beta$$

. Kyseessä on β:n suhteen neliöllinen funktio, jonka gradientti on

$$\nabla f(\beta) = -2X^\top y + 2X^\top X\beta.$$

Oletetaan, että $X^\top X$ on kääntyvä. Tällöin kohdefunktiolla on kriittinen piste $\beta^* = (X^\top X)^{-1} X^\top y$.

Koska kohdefunktio on neliöllinen, sen Hessin matriisi on

$$D^2 f(x) = 2X^\top X.$$

Tämä matriisi on (selvästi) positiivisemidefiniitti. Kun lisäksi oletetaan, että $(X^\top X)^{-1}$ on kääntyvä, niin matriisi on itseasiassa positiividefiniitti. Kriittinen piste on siis minimi.

Luku 3

Yhtälörajoitetut tehtävät

3.1 Kaksiulotteinen yhtälörajoitettu tehtävä

Tarkastelaan kahden muuttujan optimointitehtävää, jossa on yhtälörajoite mukana. Huomaa, että tehtävä ei ole kovin hyvin asetettu, jos rajoitteita on yhtä paljon tai enemmän kuin muuttujia. Yhtälörajoitusten tapauksessa tulemme aina olettamaan, että rajoitteita on vähemmän kuin tehtävässä on optimoitavia muuttujia.

Tehtävä on siis $\max f(x_1, x_2)$ s.e. $h(x_1, x_2) = 0$. Voimme tehdä geometrisen havainnon, että optimipisteessä yhtälörajoite on f:n tasa-arvokäyrän tangentti. Muussa tapauksessa voisimme kulkea rajoitetta pitkin siten, että samalla parannamme funktion arvoja. Tämä geometrinen tulos voidaan kirjoittaa muodossa

$$\nabla f(x^*) = \mu \nabla h(x^*) \tag{3.1}$$

jollakin $\mu \in \mathbb{R}$. Huom. $\nabla f(x^*)$ kertoo funktion f jyrkimmän kasvusuunnan. Kasvusuuntia ovat myös kaikki suunnat d joille pätee $d^\top \nabla f(x^*) > 0$. Kasvusuunta tarkoittaa sitä, että $f(x^* + \lambda d) > f(x^*)$ tarpeeksi pienillä λ. Pisteessä x^* ei voida liikkua rajoitekäyrää pitkin kasvusuuntiin, koska muuten x^* ei voisi olla lokaali maksimi.

Määritellään Lagrangen funktio $L(x_1, x_2, \mu) = f(x_1, x_2) - \mu h(x_1, x_2)$, missä μ on rajoitteen $h(x_1, x_2) = 0$ Lagrangen kerroin. Ehto (3.1), tehtävän ensimmäisen kertaluvun välttämätön ehto, voidaan nyt kirjoittaa muodossa $\nabla_x L(x_1, x_2, \mu) = \mathbf{0}$.

Esimerkki 3.1.1. Ratkaistaan ensimmäisen kertaluvun ehdon avulla tehtävä, jossa kohdefunktio on $f(x_1, x_2) = x_1 x_2$ ja rajoite määräytyy funktiosta $h(x_1, x_2) = x_1 + 4x_2 - 16$. Voit pohtia mikä on tehtävän geometrinen tulkinta. Lagrangen funktio on

$$L(x_1, x_2, \mu) = x_1 x_2 - \mu(x_1 + 4x_2 - 16).$$

Optimissa $x^* = (x_1^*, x_2^*)$ löytyy μ siten, että

$$\nabla_x L(x_1^*, x_2^*, \mu) = \mathbf{0} \iff \nabla f(x^*) = \mu \nabla h(x^*).$$

Tämä ehto saadaan muotoon:

$$\partial L/\partial x_1 = x_2^* - \mu = 0,$$
$$\partial L/\partial x_1 = x_1^* - 4\mu = 0.$$

Eliminoidaan μ ensimmäisestä yhtälöistä, jolloin saadaan $\mu = x_2^*$, ja sijoitetaan alempaan: $x_1^* = 4x_2^*$. Sijoitetaan saatu x_1^* rajoiteyhtälöön: $(4x_2^*) + 4x_2^* - 16 = 0$, jonka ratkaisu on $x_2^* = 2$ ja tällöin $x_1^* = 8$, eli ensimmäisen kertaluvun ehdot toteutuvat pisteessä $x^* = (8, 2)$.

Yleensä, kun ensimmäisen kertaluvun ehtoja ratkaistaan, ei ole tarpeen erikseen käyttää yläindeksiä $*$ optimoitaville muuttujille korostamaan sitä, että haetaan optimia.

3.2 Ensimmäisen kertaluvun ehdot

Siirrytään seuraavaksi tarkastelemaan yleistä n:nnän muuttujan yhtälörajoitettua tehtävää. Kuten edellä havaittiin, optimipisteessä x^* näyttäisi löytyvän μ siten että

$$\partial L(x^*, \mu)/\partial x_i = 0 \text{ kaikilla } i = 1, \ldots, n,$$

ja samalla x^* on tietysti oltava käypä, eli $h(x^*) = 0$. Huomaa, että rajoitteen $h(x^*) = 0$ voitaisi kirjoittaa myös muodossa $\partial L(x^*, \mu)/\partial\mu = 0$. Joskus ensimmäisen kertaluvun ehdot ilmaistaan, niin, että vaaditaan Lagranden funtion kaikkien osittaisderivaattojen olevan yhtä kuin nolla. Kerroin μ on rajoitteen Lagrangen kerroin ja se voi saada mitä tahansa reaaliarvoja. Jos $\mu = 0$, niin silloin x^* on funktion f kriittinen piste. Ehdot eivät sulje pois sitä mahdollisuutta, että x^* toteuttaa ehdon $h(x^*) = \mathbf{0}$ ja samalla $\nabla f(x^*) = \mathbf{0}$.

Kyseessä on yhtälörajoitetun tehtävän ensimmäisen kertaluvun välttämätön ehto lokaalille optimille (“foc”). Siis jos x^* optimaalinen, niin ehto on voimassa, mutta se voi toteutua myös muissakin kuin optimaalisissa pisteissä.

Pohditaan vielä sitä, että mitä oletuksia tähän teoriaan tarvitaan differentioituvuuden lisäksi. Tarkastelemalla taas kahden muuttujan tapauksen geometriaa havaitsemme, että ensimmäisen kertaluvun ehto ei toimi jos sattuu käymään niin, että $\nabla h(x_1^*, x_2^*) = \mathbf{0}$. Esimerkiksi jos oletetaan, että $h(x_1, x_2) = x_1^3 - x_2^3$ (tasossa suora $x_1 = x_2$, mutta $\nabla h(\mathbf{0}) = \mathbf{0}$), ja $f(x_1, x_2) = -(x_1 - 1)^2 - (x_2 + 1)^2$. Havaitsemme, että optimi on selvästi origo, mutta optimaalisuusehto ei toteudu. Tämän takia ensimmäisen kertaluvun ehto edellyttää sitä, että $\nabla h(x^*) \neq \mathbf{0}$.

Kun rajoitteita on enemmän kuin yksi, vaatimus $\nabla h(x^*) \neq \mathbf{0}$ korvataan ehdolla, että Jacobin matriisin $Dh(x^*)$ on oltava täyttä astetta. Tätä kutsutaan ei-degeneroituneisuus kvalifikaatioksi rajoitteille (NDCQ, non-degeneracy constraint qualification). Huomaa, että rajoitteet voidaan kirjoittaa muodossa $h(x) = \mathbf{0}$, missä $h : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}^m$. Kirjallisuudessa esiintyy myös muita ns. constraint qualification ehtoja, mutta niitä ei käsitellä tällä kurssilla.

Seuraava tulos sanoo, että ensimmäisen kertaluvun välttämätön optimaalisuusehto, on se, että Lagrangen funktion osittaisderivaatat häviävät ja piste on käypä. Lagrangen funktio on

$$L(x,\mu) = f(x) - \mu_1 h_1(x) - \ldots - \mu_m h_m(x),$$

kun yhtälörajoitteita on m kappaletta. Lagrangen funktion argumenttina oleva μ on vektori, jonka komponentteina on Lagrangen kertoimet μ_1, ..., μ_m. Kuten kahden muuttujan tapauksessa, nämä kertoimet voivat saada mitä hyvänsä reaalilukuarvoja.

Lause 3.2.1. *Oletetaan, että $f : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}$ ja $h : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}^m$ ovat jatkuvasti derivoituvia funktioita ja x^* on optimi (lokaali minimi tai maksimi) tehtävälle* $\max f(x)$ *siten, että $h(x) = \mathbf{0}$. Oletetaan myös, että $Dh(x^*)$ on täyttä astetta. Tällöin löytyy Lagrangen kertoimet $\mu = (\mu_1, \ldots, \mu_m)$ siten, että $\partial L(x^*, \mu)/\partial x_i = 0$ kaikilla $i = 1, \ldots, n$.*

Huomaa, että ehto $\partial L(x^*, \mu)/\partial x_i = 0$ kaikilla $i = 1, \ldots, n$, voidaan lausua myös muodossa $\nabla_x L(x^*, \mu) = \mathbf{0}$. Aukikirjoitettuna tämä on

$$\nabla f(x^*) - \mu_1 \nabla h_1(x^*) - \ldots - \nabla h_m(x^*) = \mathbf{0}.$$

Todistus. Koska ensimmäisen kertaluvun ehdot ovat aivan keskeisessä asemassa optimoinnissa esitetään tulokselle eräs todistus.

Oletetaan, että x^* on lokaali maksimi ja $f(x^*) = c$. Vastaava päättely voidaan tehdä myös lokaalille minimille.

Tarkastellaan yhtälöryhmää

$$\begin{aligned} f(x) - c &= \varepsilon \\ h(x) &= \mathbf{0}. \end{aligned}$$

Merkitään kuvausta $(f(x) - c, h(x))$ lyhyesti funktiolla $F(x)$. Jos F olisi surjektio x^*:n jossakin ympäristössä, niin löytäisimme parille $(\varepsilon, \mathbf{0})$ alkukuvan, kunhan ε on riittävän pieni positiivinen luku. Tämä olisi kuitenkin ristiriidassa sen kanssa, että x^* on lokaali optimi.

Kuvaus F on surjektio x^*:n ympäristössä erityisesti silloin, kun yhtälöryhmä $F(x) = (\varepsilon, \mathbf{0})$ määrittää implisiittifunktion $x(\varepsilon)$. Implisiittifunktioteoreeman mukaan $x(\varepsilon)$ löytyy, kun $DF(x^*)$ on täyttä astetta. Matriisin $DF(x^*)$ rivit muodostuvat vektoreista $\nabla f(x^*)^\top$, $\nabla h_1(x^*)^\top$, ..., $\nabla h_m(x^*)^\top$.

Koska F ei voi olla surjektio x:n ympäristössä, implisiittifunktiolauseen oletus $DF(x^*)$:n täydestä asteesta ei voi päteä. Siis vektoreiden $\nabla f(x^*)$, $\nabla h_1(x^*)$, ..., $\nabla h_m(x^*)$, tulee olla linearisesti riippuvia, eli

$$\alpha_0 \nabla f(x^*) + \alpha_1 \nabla h_1(x^*) + \ldots + \alpha_m \nabla h_m(x^*) = \mathbf{0} \tag{3.2}$$

ja ainakin jokin kertoimista α_i, $i = 0, 1, \ldots, n$,, poikkeaa nollasta. Jos $\alpha_0 = 0$, niin huomaamme, että myös $\alpha_1 = 0$, $i > 0$, koska oletimme ei-degeneroituneisuus kvalifikaation.

Näin ollen $\alpha_0 \neq 0$. Saamme siis kaavasta (3.2) jakamalla puolittain α_0:lla, että ensimmäisen kertaluvun ehto pätee x^*:ssä Lagrangen kertoimmille $\mu_i = -\alpha_i/\alpha_0$, $i = 1, \ldots, n$. □

Sellaisia (x, μ)-pisteitä, jotka toteuttavat ehdot $\partial L(x^*, \mu)/\partial x_i = 0$ kaikilla i ja $h(x^*) = \mathbf{0}$ sanotaan Lagrangen funktion kriittisiksi pisteiksi. Rajoitetun optimointitehtävän ratkaisemiseksi voidaan siis etsiä Lagrangen funktion funktion kriittiset pisteet. Kun nämä pisteet on löydetty voidaan yrittää päätellä ovatko ne minimejä maksimeja vai jotain muuta. Kaikki Lagrangen funktion kriittiset pisteet eivät aina ole optimipisteitä.

3.2.1 Ehtojen soveltaminen

Käydään läpi keittokirjatyylisesti miten ensimmäisen kertaluvun ehtoja voi käyttää ratkaisun hakemisessa optimointitehtäville. Ensimmäisen kertaluvun ehtojen ratkaisemista kutsutaan kutsutaan joskus Lagrangen menetelmäksi (*Lagrange method, the Lagrangian multiplier method*).

Ensimmäinen menettely on vain suoraviivaisesti etsiä kaikki kriittiset pisteet Lagrangen funktiolle:

1. laske kohdefunktion arvo kussakin niistä ja valitse paras TAI
2. päättele kriittisistä pisteistä paras muulla tavoin
3. huom. periaatteessa Dh:n täysi aste tulee myös tarkistaa.

Yleensä voidaan ratkaista ensin ehdosta $\nabla_x L(x, \mu) = \mathbf{0}$ muuttujat x kertoimien μ suhteen, eli $x(\mu)$. Tämän jälkeen kerroinvektori μ voidaan ratkaista yhtälöryhmästä $h(x(\mu)) = \mathbf{0}$. Periaatteessa ei kuitenkaan ole merkitystä, missä järjestyksessä tuntemattomat muuttujat x ja μ haetaan.

Toinen menettely on se, että mahdollinen optimipiste päätellään geometrisesti tai taloudellisella intuitiolla. Tämän jälkeen saaatu valistunut arvaus sijoitetaan ensimmäisen kertaluvun ehtoihin. Jos ehdot toteutuvat piste on luultavasti optimi. Huom. koska kyseessä on "vain" välttämätön ehto, Lagrangen funktion kriittiset pisteet (jopa paras niistä) ovat vasta kandidaatteja optimiksi

Esimerkki 3.2.1. Olkoon maksimoitavana kohdefunktio $f(x) = -(x_1 - 1)^2 - (x_2 - 1)^2$ ja rajoiteyhtälö $h(x) = x_1^2 + x_2^2 - 8$. Tehtävä voidaan tulkita geometrisesti, niin että minimoidaan etäisyys pisteestä $(1, 1)$ ympyrälle $h(x) = 0$. Geometrinen päättely sanoisi että ratkaisu on $(2, 2)$. Kirjoitetaan ensimmäisen kertaluvun ehto: rajoiteyhtälön on toteuduttava ja

$$
\begin{aligned}
-2(x_1 - 1) - 2\mu x_1 &= 0, \\
-2(x_2 - 1) - 2\mu x_2 &= 0.
\end{aligned}
$$

Valitsemalla $\mu = -1/2$ havaitaan, että ehdot toteutuvat pisteessä $(2, 2)$.

Haetaan vielä Lagrangen funktion kaikki kriittiset pisteet tässä esimerkissä. Ensimmäisen kertaluvun ehdoista $\nabla_x L(x, \mu) = \mathbf{0}$ saadaan nyt $x_1 = 1/(1 + \mu)$ ja $x_2 = 1/(1 + \mu)$.

Sijoitetaan nämä rajoiteyhtälöön, jolloin saadaan μ:lle yhtälö

$$\frac{1}{(1+\mu)^2} + \frac{1}{(1+\mu)^2} = 8.$$

Sieventämällä saamme toisen asteen yhtälön $(1+\mu)^2 = 1/4$, mistä seuraa, että $1+\mu = \pm(1/2)$, eli $\mu = -1/2$ tai $\mu = -3/2$. Ensimmäistä Lagrangen kerrointa vastaa yllä oleva ratkaisu ja toista pari $(x_1, x_2) = (-2, -2)$. Jälkimmäinen piste on tehtävän minimi, eli pisteen $(1, 1)$ suurin etäisyys ympyrän kaarelle.

Esimerkki 3.2.2. Tarkastellaan kuluttajaa, jolla hyötyfunktio (Cobb-Douglas hyötyfunktio) $U(x_1, x_2) = x_1^a x_2^{1-a}$ ja budjettirajoite $h(x) = 0$, missä $h(x_1, x_2) = p_1x_1 + p_2x_2 - I$. Johdetaan tehtävän ratkaisu p:n ja I:n funktiona, eli kysyntäfunktio! Lagrangen funktio on $L(x, \mu) = x_1^a x_2^{1-a} - \mu(p_1x_1 + p_2x_2 - I)$. Huom. ei-degeneroituneisuus ehto toteutuu kun $p \neq \mathbf{0}$.

Ensimmäisen kertaluvun ehto on budjettirajoite ja

$$\begin{aligned} a x_1^{a-1} x_2^{1-a} - \mu p_1 &= 0 \\ (1-a) x_1^a x_2^{-a} - \mu p_2 &= 0. \end{aligned}$$

Näistä yhtälöistä (eliminoimalla μ toisesta ja sijoittamalla toiseen) saadaan

$$(1-a)(x_1/x_2)^a - a(x_1/x_2)^{a-1}(p_2/p_1) = 0,$$

ja hieman sievennettynä $p_1(1-a) - p_2a(x_1/x_2)^{-1} = 0$ ja edelleen $p_1x_1(1-a) - p_2x_2a = 0$. Huom. tässä oletetaan että $x_1, x_2 > 0$ optimissa. Ratkaistavana on lineaarinen yhtälöpari, jossa toinen yhtälö on budjettirajoite ja toinen on edellä saatu yhtälö. Budjettirajoitteesta saadaan $p_1x_1 = I - p_2x_2$ ja sijoitetaan tämä toiseen yhtälöön, jolloin saadaan $x_2 = (1-a)I/p_2$ ja edelleen $x_1 = aI/p_1$.

Esimerkki 3.2.3. Tarkastellaan tehtävää, jossa kohdefunktio on $f(x_1, x_2, x_3) = x_1x_2x_3$ ja rajoitteet määräytyvät funktioista $h_1(x_1, x_2, x_3) = x_1^2 + x_2^2 - 1$ ja $h_2(x_1, x_2, x_3) = x_1 + x_3 - 1$.

Tutkitaan ensin toteutuuko ei-degeneroituneisuusehto että Dh on täyttä astetta. Lasketaan siis Jacobin matriisi:

$$Dh(x_1, x_2, x_3) = \begin{pmatrix} 2x_1 & 2x_2 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Tämän aste on 2 aina kun $x_1 \neq 0$ tai $x_2 \neq 0$.

Muodostetaan seuraavaksi Lagrangen funktio:

$$L(x, \mu) = x_1x_2x_3 - \mu_1(x_1^2 + x_2^2 - 1) - \mu_2(x_1 + x_3 - 1).$$

Ensimmäisen kertaluvun ehdot ovat rajoiteyhtälöt ja

$$\begin{aligned} \partial L/\partial x_1 = &\quad x_2x_3 - 2\mu_1 x_1 - \mu_2 &= 0 \\ \partial L/\partial x_2 = &\quad x_1x_3 - 2\mu_1 x_2 &= 0 \\ \partial L/\partial x_3 = &\quad x_1x_2 - \mu_2 &= 0. \end{aligned}$$

Yhtälörajoitteet mukaan lukien ratkaistavana on yhtälöryhmä, jossa on 5 yhtälöä ja 5 tuntematonta (yleisesti tuntemattomia ja yhtälöitä on $n + m$). Ratkaistaan yhtälöryhmä seuraavasti

1. eliminoidaan ensin μ_2 kolmannesta, koska tämä näyttäisi onnistuvan kaikkein helpoiten, $\mu_2 = x_1x_2$
2. eliminoidaan μ_1 toisesta (tämäkin näyttää melko helpolta), $\mu_1 = x_1x_3/(2x_2)$
3. sijoitetaan μ_1 ja μ_2 ensimmäiseen yhtälöön (kaikkialle missä niitä esiintyy paitsi niihin yhtälöihin, joista ne saatiin)
4. kolme ensimmäistä yhtälöä johtavat siis yhtälöön $x_2x_3-2[x_1x_3/(2x_2)]x_1-x_1x_2 = 0$, eli sievennettynä
$$x_2^2x_3 - x_1^2x_3 - x_1x_2^2 = 0$$
5. käyttämättä on vielä rajoiteyhtälöt, niistä saadaan $x_2^2 = 1 - x_1^2$ ja $x_3 = 1 - x_1$ ja nämä voidaan sijoittaa edellä saatuun yhtälöön
6. saadaan optimaaliselle x_1 yhtälö
$$(1 - x_1^2)(1 - x_1) - x_1^2(1 - x_1) - x_1(1 - x_1^2) = 0,$$
joka on kolmatta astetta
7. yksi yhtälön juurista on $x_1 = 1$, kun $x_1 \neq 1$ yhtälö voidaan jakaa puolittain $(x_1 - 1)$:llä jolloin jäljelle jää neliöllinen yhtälö (sellaisethan ratkeaa näppärästi!)
8. neliöllisen yhtälön juuriksi saadaan $(-1 \pm \sqrt{13})/6$
9. yhteensä saadaan viisi ratkaisukandidaattia (x_2 ja x_3 voidaan ratkaista kun x_1 tunnetaan):
$x = (1, 0, 0)$ ja $x \approx (0.4343, \pm 0.9008, 0.5657)$ ja $x \approx (-0.7676, \pm 0.6409, 1.7676)$
10. Sijoittamalla kohdefunktioon havaitaan, että maksimi saavutetaan pisteessä $x \approx (-0.7676, -0.6409, 1.7676)$.

3.2.2 Esimerkki: Kustannusfunktion johtaminen

Yritys valmistaa yhtä tuotetta n:stä tuotannontekijästä/panoksesta. Esitetään panosten määrät vektorilla $x \in \mathbb{R}^n$. Tyypillinen tapaus taloustieteen malleissa on $x = (k, l)$, missä k on fyysinen pääoma ja l työpanos. Kuvataan tuotettua määrää muuttujalla y. Teknologia määrittää tuotantomahdollisuuksien joukon, eli mahdolliset (y, x) parit, eli ns. tuotantojoukon. Jos käytössä on panokset x niin tuotoksena saadaan enintään määrä $f(x)$ lopputuotetta. Funktiota $f(x)$ kutsutaan tuotantofunktioksi.

Oletetaan, että yritys pyrkii tuottamaan annetun määrän y minimoimalla kustannukset. Olkoon panosten yksikköhinnat $w_1, \dots, w_n$. Kustannus panosten x käyttämisestä on $w \cdot x = \sum_i w_i x_i$. Yrityksen kustannusten minimointitehtävä on tuottaaa määrä y mahdollisimman kustannustehokkaasti:

$$\min_x w \cdot x, \text{ s.e. } y = f(x), \ x \geq \mathbf{0}.$$

Muuttujat w ja y ovat eksogeenisia ja x on endogeeninen.

Olkoon $z(y, w)$ kustannusten minimointitehtävän ratkaiseva panosten käyttö. Taloustieteessä tätä kutsutaan ehdolliseksi tuotannontekijöiden kysynnäksi (conditional factor demand). Kohdefuntion optimaalinen arvo on $C(y, w) = w \cdot z(y, w)$ puolestaan on yrityksen kustannusfunktio.

Esimerkki 3.2.4. Oletetaan $f(k, l) = \sqrt{kl}$ ja $w = (w_k, w_l)$. Oletetaan myös, että optimissa $k, l > 0$. Ensimmäisen kertaluvun ehto antaa yhtälöt

$$\begin{aligned} w_k &= \mu \partial \sqrt{kl} / \partial k = (\mu/2)(\sqrt{l/k}), \\ w_l &= \mu \partial \sqrt{kl} / \partial l = (\mu/2)/(\sqrt{k/l}), \\ \sqrt{kl} &= y. \end{aligned}$$

Havaitaan, että $l/k = 4w_k^2/\mu^2$ ja $k/l = 4w_l^2/\mu^2$, mistä saadaan $\mu^2 = 4w_k w_l$ ja edelleen $l/k = w_k/w_l$. Ehdon $\sqrt{kl} = y$ avulla saadaan $k = (\sqrt{w_l/w_k})y$ ja $l = (\sqrt{w_k/w_l})y$.

Luku 4

Herkkyysanalyysiä

Taloustietelijää kiinnostaa usein se miten optimointitehtävän ratkaisu riippuu eksogeenisista muuttujista. Esimerkiksi miten kuluttajan optimi muuttuu, kun tulot kasvavat. Tällaista analyysiä sanotaan herkkyysanalyysiksi (*comparative statics*).

Tarkastellaan optimointitehtäviä, joissa maksimoidaan funktiota $f(x, a)$ yhtälörajoitteella $h(x, a) = \mathbf{0}$, missä vektori a on eksogeeninen. Optimointitehtävän ratkaisu x riippuu eksogeenisista muuttujista. Olettaen, että ratkaisu on yksikäsitteinen se on funktio $x(a)$. Voimme nyt muotoilla kysymyksen ratkaisun herkkyydestä a:n muutoksista, niin, että kyse on joko siitä miten $x(a)$ muuttuu a:n muuttuessa tai siitä miten $f(x(a), a)$ muuttuu. Funktiota $f(x(a), a)$ kutsutaan joskus arvofunktioksi (*value function*). Osoittautuu, että Lagrangen kertoimet kuvaavat kohdefunktion (tai arvofunktion) muutosta, kun eksogeenisia parametreja muutetaan.

4.1 Lagrangen kertoimien tulkinta

Tarkastellaan aluksi kahden muuttujan tehtävää $f(x_1, x_2)$ rajoitteella $h(x_1, x_2) = a$, missä $a \in \mathbb{R}$ on eksogeeninen muuttuja. Ajatellaan, että ratkaisu on a:n funktio. Toisin sanottuna optimi on funktio $x(a)$ ja optimia vastaava rajoitteen Lagrangen kerroin on funktio $\mu(a)$. Piste $x(a)$ on Lagrangen funktion $L(x, \mu; a) = f(x) - \mu[h(x) - a]$ kriittinen piste kun Lagrangen kerroin on $\mu(a)$.

Tehtävä voidaan tulkita niin, että $h(x) = a$ kuvaa resurssirajoitetta, missä a on käytössä oleva resurssin määrä. Herkkyysanalyysissä tutkitaan miten resurssin muutos vaikuttaa kohdefunktioon optimissa. Tutkittavana on siis $f(x(a))$:n muutos, eli $df(x(a))/da$, joka siis kuvaa esim. tuoton muutosta suhteessa resurssin muutokseen.

Oletetaan, että kaikki funktiot ovat derivoituvia ja lasketaan ketjusäännöllä

$$df(x(a))/da = \left[\frac{\partial f(x(a))}{\partial x_1}\right]\frac{dx_1(a)}{da} + \left[\frac{\partial f(x(a))}{\partial x_2}\right]\frac{dx_2(a)}{da}.$$

Matriisimuodossa tämä voitaisi kirjoittaa $[D_a x(a)]^\top \nabla_x f(x(a))$ (alaindeksi viittaa tässä muuttujaan/vektoriin jonka suhteen derivoidaan).

Yllä olevassa derivoinnissa ei vielä ole hyödynnetty informaatiota siitä, että $x(a)$ on optimaalinen ja $h(x(a)) = a$. Kirjoitetaan ensimmäisen kertaluvun ehdot

$$\begin{aligned}
\frac{\partial f(x(a))}{\partial x_1} - \mu(a)\frac{\partial h(x(a))}{\partial x_1} &= 0 \\
\frac{\partial f(x(a))}{\partial x_2} - \mu(a)\frac{\partial h(x(a))}{\partial x_2} &= 0 \\
h(x(a)) &= a
\end{aligned}$$

Kaksi ensimmäistä yhtälöä olisivat vektorimerkinnöin
$\nabla_x f(x(a)) - [D_x h(x(a))]^\top \mu(a) = \mathbf{0}$.

Voimme nyt havaita, että f:n osittaisderivaatat optimissa $x(a)$ voidaan lausua h:n osittaisderivaattojen avulla:

$$\frac{\partial f(x(a))}{\partial x_i} = \mu(a)\frac{\partial h(x(a))}{\partial x_i},\ i = 1, 2,$$

eli vektorimuodossa $\nabla_x f(x(a)) = [D_x h(x(a))]^\top \mu(a)$. Sijoittamalla osittaisderivaatat kokonaisderivaatan lausekkeeseen saadaan

$$df(x(a))/da = \mu(a)\sum_i \left[\frac{\partial h(x(a))}{\partial x_i}\right]\left[\frac{dx_i(a)}{da}\right].$$

Summattavana oleva lauseke yllä olevassa kaavassa on $dh(x(a))/da$ ja tämä on 1 koska $h(x(a)) = a$ (oikean puolen derivaatta on 1)! Lopputuloksena saamme, että $df(x(a))/da = \mu(a)$. Tämä tulos pätee yleisesti kun $x \in \mathbb{R}^n$ ja $a \in \mathbb{R}^m$. Voit kokeilla miten tuloksen voi johtaa käyttämällä edellä esitettyjä vektorimerkintöjä.

Lause 4.1.1. *Oletetaan, että $x(a)$ ratkaisee tehtävän* $\max f(x)$ *s.e.* $h(x) = a$*, missä $h : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}^m$, ja että $x(a)$ on differentioituva. Oletetaan myös, että ei-degeneroituvuus kvalifikaatio pätee rajoitteille. Tällöin $df(x(a))/da_i = \mu_i(a)$.*

Yllä oleva lause pätee luonnollisesti silloin, kun ensimmäisen kertaluvun ehdot ovat voimassa. Joten ei-degeneroituneisuus kvalifikaatio on oletettava. Lisäksi on oletettava, että $x(a)$ on differentioituva. Edellä esitetty tulos on varsin merkittävä. Se kertoo, että f:n muutoksen a:n pienille poikkeamille saa Lagrangen kertoimista. Lagrangen kertoimet voidaan tulkita *varjohintoina* resurssirajoitteelle. Palataan tähän kohta.

Esimerkki 4.1.1. Oletetaan, että kohdefunktio on $f(x_1, x_2) = x_1^2 x_2$ ja rajoitteena on $h(x_1, x_2) = 2x_1^2 + x_2^2 - a = 0$. Ratkaistaan tehtävä eliminoimalla toinen muuttuja rajoitteesta ja sijoitetaan tämä kohdefunktioon, jolloin saadaan rajoittamaton optimointitehtävä. Näin voidaan yleisemminkin ratkoa yhtälörajoitettuja tehtäviä. Tämä tekniikka ei kuitenkaan aina yksinkertaista ratkaisemista, koska muuttujien eliminointi voi olla hankalaa.

Eliminoidaan x_1^2, eli $x_1^2 = (a - x_2^2)/2$ ja sijoitetaan kohdefunktioon, jolloin maksimoitavana on $x_2(a - x_2^2)/2$. Asetetaan derivaatta nollaksi $a - 3x_2^2 = 0$, eli $x_2 = \pm\sqrt{a/3}$ ja $x_1 = \pm\sqrt{a/3}$, optimi on $x = (\sqrt{a/3}, \sqrt{a/3})$. Eliminointimenettelyn eräs ongelma on se, että Lagrangen kerroin pitää erikseen ratkaista, jos herkkyyttä halutaan tutkia. Haetaan nyt Lagrangen kerroin $x(a)$:lle : $\partial f(x)/\partial x_1 = 2x_1x_2$ ja $\partial h(x)/\partial x_1 = 4x_1$, joten $\mu(a) = x_2(a)/2 = \sqrt{a/12}$.

Kokeillaan miten hyvin herkkyystarkastelu toimii kun $a_1 = 3$ ja $a_2 = 3.3$, eli a kasvaa 0.3 yksikköä. Teorian perusteella

$$f(x(a_2)) - f(x(a_1)) \approx \mu(a_1)[a_2 - a_1].$$

Nyt kohdefunktion arvojen muutos on $f(x(a_2)) - f(x(a_1)) \approx 0.1537$. Käyttämällä Lagrangen kerrointa $\mu(a_1) = 0.5$, saamme muutokselle approksimaation $\mu(a_1)(a_2 - a_1) = 0.3 \cdot 0.5 = 0.15$. Ero on edellä saatuun tarkempaa arvioon on kolmannessa desimaalissa.

Esimerkki 4.1.2. Tuotetta tuotetaan kahdesta raaka-aineesta. Olkoon käytettävät raaka-ainemäärät x_1 ja x_2. Tuotantofunktio on $x_1^\alpha x_2^\beta$ ja raaka-aineiden yksikkökustannukset ovat c_1 ja c_2. Lopputuotteen hinta on p. Kohdefunktion on voitto, eli tuotot miinus kulut: $px_1^\alpha x_2^\beta - c_1x_1 - c_2x_2$.

Oletetaan, että viranomaiset asettavat tuotteen koostumukselle rajoitteen $x_1 = x_2$. Ajatellaan tilannetta, jossa yritys haluasi lisätä raaka-ainetta 1 tuotteeseen. Kohta nähdään mitä ehtoja tämä vaatimus asettaa eksogeenisille muuttujille. Matemaattisesti ilmaistuna yritys kohtaisi mielummin rajoitteen $x_1 = x_2 + a$, $a > 0$ kuin alkuperäisen rajoitteen.

Arvioidaan seuraavaksi kuinka paljon yrityksen kannattaisi enintään maksaa viranomaiselle (tai investoida lobbaukseen) resurssirajoitteen muuttamisesta muotoon $x_1 = x_2 + a$. Ratkaistaan tehtävä tekemättä sijoitusta $x_1 = x_2$ kohdefunktioon (vaikka tämä olisi houkuttelevaa). Lagrangen kertoimien sisältämä informaatio on usein niin kiinnostavaa, että jopa “turhan” tuntuiset rajoitteet kannattaa huomioida analyysissä. Siis muuttujien eliminoinnin sijaan ratkaistaan Lagrangen funktion kriittiset pisteet, koska tällöin saadaan myös Lagrangen kertoimet.

Ensimmäisen kertaluvun ehdot ovat:

$$\begin{aligned} \alpha p x_1^{\alpha-1} x_2^\beta - c_1 - \mu &= 0 \\ \beta p x_1^\alpha x_2^{\beta-1} - c_2 + \mu &= 0 \\ x_1 &= x_2. \end{aligned}$$

Sijoitetaan $x_2 = x_1$ kahteen muuhun ehtoon ja eliminoidaan toisesta μ, jolloin saadaan

$$\alpha p x_1^{\alpha+\beta-1} + \beta p x_1^{\alpha+\beta-1} - c_1 - c_2 = 0.$$

Tämän ratkaisu on

$$x_1 = x_2 = [(c_1 + c_2)/(p(\alpha + \beta))]^{1/(\alpha+\beta-1)}.$$

Lagrangen kertoimeksi saadaan

$$\mu = (\alpha c_2 - \beta c_1)/(\alpha + \beta).$$

Kun $\alpha c_2 > \beta c_1$, niin yritys haluaisi lisätä raaka-ainetta 1. Kun a on pieni niin yrityksen kannattaisi maksaa enintään $a\mu$ rajoitteen muuttamisesta, μ siis kuvaa rajoitteen "hintaa". Juurin tämän takia Lagrangen kertoimia kutsutaan varjohinnoiksi.

4.2 Verhokäyräteoreema

Tarkastellaan seuraavaksi rajoittamatonta tehtävää $\max_x f(x, a)$, missä $a \in \mathbb{R}$ on eksogeeninen. Tehdään nyt herkkyysanalyysiä kohdefunktion optimaaliselle arvolle, kun a muuttuu. Haetaan siis kokonaisderivaattaa $df(x(a), a)/da$. Seuraavaa tulosta kutsutaan verhokäyräteoreemaksi. Sen mukaan kohdefunktion muutos on sama kuin sen osittaisderivaatta a:n suhteen.

Lause 4.2.1. *Oletetaan, että ratkaisu $x(a)$ on differentioituva. Tällöin $df(x(a), a)/da = \partial f(x(a), a)/\partial a$*

Verhokäyräteoreema (*envelope theorem*) on paljon hyödyllisempi tulos kuin miltä äkkiseltään näyttäisi. Sen avulla kvalitatiivisia tuloksia herkkyydestä saadaan ratkaisematta optimaalista x:ää. Lisäksi osittaisderivaatta on hyvin helppo laskea, kun taas kokonaisderivaatta voi olla vaikeasti laskettavissa.

Esimerkki 4.2.1. Tarkastellaan kohdefunktiota $f(x, a) = -x^2 + 2ax + 4a^2$. Verhokäyräteoreemalla $\partial f(x(a), a)/\partial a = 2x + 8a$. Esimerkiksi kyseessä voisi olla kustannusfunktio, jossa $x > 0$ olisi tuotettava määrä ja $a > 0$ olisi kustannusfunktion parametri. Voisimme tässä tapauksessa päätellä että $df(x(a), a)/da > 0$ laskematta optimia tarkasti.

Tämän tehtävän optimi saadaan varsin suoraviivaisesti ensimmäisen kertaluvun ehdoista: $x(a) = a$. Kun sijoitetaa tämä kohdefunktioon saadaan $g(a) = f(x(a), a) = 5a^2$. Kun derivoidaan a:n suhteen saadaan $dg(a)/da = df(x(a), a)/da = 10a$. Havaitsemme, että tämä vastaa verhokäyräteoreeman tulosta $2x(a) + 8a$.

Esimerkki 4.2.2. Tarkastellaan yrityksen pitkän ja lyhyen aikavälin marginaalikustannuksia. Tätä tapausta tutkiessaan J. Viner ja hänen avustajansa Wong tulivat keksineeksi verhokäyräteoreeman.

Oletetaan, että yritys tuottaa määrän q minimoimalla kustannukset. Kustannukset riippuvat myös käytettävissä olevasta pääomasta K (esim. koneet). Kustannusfunktio on

$c(K, q)$. Pitkällä aikavälillä yritys valitsee pääoman siten että kustannukset minimoituvat, eli saadaan optimaalinen $K(q)$. Lyhyellä aikavälillä pääoma on kiinteä. Oletetaan että $c(K, q)$ kertoo lyhyen aikavälin optimikustannuksen.

Verhokäyräteoreeman mukaan pitkän aikavälin ja lyhyen aikavälin marginaalikustannukset ovat samat, sillä verhokäyräteoreemasta $dc(K(q), q)/dq = \partial c(K(q), q)/\partial q$. Tässä vaiheessa on syytä huomauttaa, että verhokäyräteoreema toimii yhtä lailla minimointi kuin maksimointitehtävillekin.

Kokeillaan tuotantofunktiolla $\sqrt{KL}$, missä L on työ. Oletetaan, että pääoman ja työn yksikkökustannukset ovat molemmat yksi. Tällöin kokonaiskustannus on $K + L$ ja lisäksi $\sqrt{KL} = q$. Jälkimmäisestä saadaan $L = q^2/K$, joten $c(K, q) = q^2/K + K$. Pitkän ajan optimi on $K(q) = q$ ja $c(K(q), q) = 2q$, eli $dc(K(q), q)/dq = 2$.

Piirtämällä kuvan havaitsemme, että funktion $c(K, q)$ graafi on $c(K(q), q)$:n yläpuolella paitsi kun $q = K$. Siis $c(K(q), q)$ muodostaa *verhokäyrän* funktion $c(K, q)$ kuvaajille. Pisteessä $q = K$ eo. funktioden tangentit ovat samat.

4.3 Yleinen verhokäyräteoria

Yhdistetaan seuraavaksi edellä esitetyt tulokset, eli verhokäyräteoria ja Lagrangen kertoimien tulkinta.

Tarkastellaan tapausta, jossa sekä kohdefunktio että rajoitteet riippuvat eksogeenisesta muuttujasta $a \in \mathbb{R}$. Yksinkertaisuuden vuoksi oletetaan, että eksogeenisia parametreja on vain yksi. Kohdefunktio ja yhtälörajoitteet ovat muotoa $f(x, a)$ ja $h(x, a)$. Oletetaan taas, että ratkaisu $x(a)$ ja Lagrangen kertoimet $\mu(a)$ ovat differentioituvia. Luonnollisesta tarvitaan myös oletus ei-degeneroituneisuudesta. Tällöin kohdefunktion kokonaisderivaatta, eli kokonaismuutos, saadaan laskemalla Lagrangen funktion osittaisderivaatta eksogeeniselle parametrille.

Lause 4.3.1. *$df(x(a), a)/da = \partial L(x(a), \mu(a), a)/\partial a$.*

Rajoittamattomalle tehtävälle kyseessä on verhokäyräteoreema. Jos parametrinen riippuvuus on vain rajoitteessa ja se on muotoa $h(x) = a$, niin saadaan edellä ollut tulkinta Lagrangen kertoimille.

Esimerkki 4.3.1. Johdetaan nk. Shephardin lemma. Tämä esimerkki on jatkoa luvun 3.2.2 kustannusfunktion johtamiselle. Yrityksen kustannuksen minuimointitehtävän ratkaisuna saatiin kustannusfunktio $C(y, w) = w \cdot z(y, w)$, missä $z(y, w)$ on optimaalinen panosten käyttö.

Tarkastellaan nyt mitä verhokäyräteoreema kertoo herkkyydestä w:lle. Optimaalisten kustannusten kokonaisderivaatta w_i:lle on Lagrangen funktion $w \cdot z - \mu(y - f(z))$ osittaisderivaatta w_i:n suhteen. Tämä osittaisderivaatta on sama kuin z_i. Näin saadaan tulos

$z_i(y,w) = \partial C(y,w)/\partial w_i$, $i = 1,\ldots,n$, jota kutsutaan mikrotalousteoriassa Shephardin lemmaksi.

4.4 Ratkaisujen derivoituvuus

Edellä olemme olettaneet, että ratkaisu parametriselle optimointitehtävlle on derivoituva parametrien suhteen. Tarkastellaan seuraavaksi $x(a)$ derivoituvuutta hieman tarkemmin.

Aloitetaan rajoittamatomasta tehtävästä $\max_x f(x,a)$. Välttämätön optimaalisuusehto on yhtälöryhmä

$$\partial f(x,a)/\partial x_i = 0, \quad i = 1,\ldots,n.$$

Merkitään tätä yhtälöryhmää lyhyesti $F(x,a) = \mathbf{0}$. Implisiittifunktiolauseen perusteella yhtälöryhmän ratkaisu $x(a)$ on derivoituva, jos F:n Jacobin matriisi x:n suhteen on kääntyvä. Kuvauksen F Jacobin matriisi x:n suhteen on $D_xF = D_x^2 f$, eli F:n Jacobin matriisi x:n suhteen on f:n Hessin matriisi. Implisiittifunktiolauseen oletukset toteutuvat kun f on kahdesti jatkuvasti differentiotuva (F jatk. differentioituva) ja $D_x^2 f$ on kääntyvä. Näillä olettamuksilla $x(a)$:sta tulee differentioituva.

Vastaava tarkastelu voidaan tehdä yhtälörajoitetulle tehtävälle. Ensimmäisen kertaluvun ehdot muodostavat yhtälöryhmän, jonka ratkaisuna saadaan $x(a)$ ja $\mu(a)$. Ensimmäisen kertaluvun ehdot voidaan kirjoittaa muodossa

$$\begin{aligned} \nabla_x L(x,\mu,a) &= \mathbf{0} \\ h(x,a) &= 0. \end{aligned}$$

Implisiittifunktiolauseen oletukset vaativat nyt että tämän yhtälöryhmän Jacobin matriisi (x,μ):n suhteen on kääntyvä. Tämä ehto takaa samalla myös ei-degeneroituvuus oletuksen voimassaolon. Merkitään ensimmäisen kertaluvun ehtoa $F(x,\mu,a) = \mathbf{0}$. Implisiittifunktiolauseen mukaan

$$D(x(a),\mu(a)) = -[D_{(x,\mu)}F(x,\mu,a)]^{-1} D_a F(x,\mu,a).$$

Esimerkki 4.4.1. Tarkastellaan kuluttajan teoriasta tuttua tehtävää: $\max U(x)$ rajoitteella $p \cdot x = I$. Tässä $x = (x_1,\ldots,x_n)$ ja $p = (p_1,\ldots,p_n)$ (pystyvektoreita). Tehtävä voidaan tulkita niin, että oletamme että kuluttaja käyttää optimissa koko budjettinsa ja optimaalisessa kulutuskorissa kaikkia tuotteita kulutetaan, eli $x_i > 0$ kaikilla i.

Välttämätön ehto on

$$\begin{aligned} \nabla U(x) - \mu p &= \mathbf{0} \\ I - p \cdot x &= 0. \end{aligned}$$

Ehdon toteuttavat $x(p,I)$, $\mu(p,I)$ ovat differentioituvia, kun matriisi

$$H(x,p) = \begin{pmatrix} D^2U(x) & -p \\ -p^\top & 0 \end{pmatrix}$$

on kääntyvä. H on ensimmäisen kertaluvun ehdon määräämän yhtälöryhmän Jacobin matriisi (x, μ):n suhteen. H on kääntyvä mm. silloin kun $D^2U(x)$ on negatiividefiniitti.

Spesifioidaan vielä logaritminen hyötyfunktio $U(x_1, x_2) = \ln x_1 + \ln x_2$ ja tutkitaan onko ratkaisu differentioituva eksogeenisten parametrien suhteen. Nyt ensimmäisen kertaluvun ehto on

$$\begin{aligned} 1/x_1 - \mu p_1 &= 0 \\ 1/x_2 - \mu p_2 &= 0 \\ I - p_1 x_1 - p_2 x_2 &= 0 \end{aligned}$$

ja

$$H(x, p) = \begin{pmatrix} -1/x_1^2 & 0 & -p_1 \\ 0 & -1/x_2^2 & -p_2 \\ -p_1 & -p_2 & 0 \end{pmatrix}.$$

Implisiittifunktiolauseen avulla voidaan laskea $(x(p, I), \mu(p, I))$:n Jacobin matriisi (p, I):n suhteen:

$$D_{(p,I)}\left(x(p, I), \mu(p, I)\right) = -[H(x, p)]^{-1} D_{(p,I)} F(x, \mu, p, I),$$

missä

$$D_{(p,I)} F(x, \mu, p, I) = \begin{pmatrix} -\mu & 0 & 0 \\ 0 & -\mu & 0 \\ -x_1 & -x_2 & 1 \end{pmatrix}$$

Esimerkiksi, kun $p = (2, 2)$ ja $I = 1$, niin $x_1 = x_2 = 1/4$ ja $\mu = 2$, implisiittifunktiolauseesta

$$D_{(p,I)}\left(x(p, I), \mu(p, I)\right) = -\begin{pmatrix} -16 & 0 & -2 \\ 0 & -16 & -2 \\ -2 & -2 & 0 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} -2 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 0 \\ -1/4 & -1/4 & 1 \end{pmatrix}$$

saadaan

$$D_{(p,I)}\left(x(p, I), \mu(p, I)\right) = \begin{pmatrix} -1/8 & 0 & 1/4 \\ 0 & -1/8 & 1/4 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}.$$

Huom. tuloksen voi tarkistaa laskemalla $x(p, I)$:n ja derivoimalla sitä.

Luku 5

Epäyhtälörajoitetut tehtävät

Tässä luvussa tarkastellaan epäyhtölörajoitettua tehtävää: maksimoi $f(x)$ ehdoilla $g_i(x) \leq 0$, $i = 1, \ldots, k$. Kuten aikaisemminkin kaikki tehtävässä esiintyvät funktiot ovat reaaliarvoisia $f, g_i : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}$, $i = 1, \ldots, k$. Tämän tyyppisissä tehtävissä käy yleensä niin, että optimipisteessä vain osa rajoitteista on aktiivisia (sitovia), eli vain joillakin i pätee $g_i(x) = 0$ ja lopuilla $g_i(x) < 0$. Keskeinen haaste näiden tehtävien ratkaisemisessa on usein juuri aktiivisten rajoitteiden löytäminen.

Ennen kuin edetään pidemmälle epäyhtälörajoitettujen tehtävien teoriaan pohditaan näiden tehtävien muuttamista yhtälörajoitetuiksi. On nimittäin niin, että epäyhtälörajoitteet voidaan aina muuttaa yhtälörajoitteiksi muuttujia lisäämällä. Esimerkiksi epäyhtälö $g(x) \leq 0$ voidaan kirjoittaa muodossa $g(x) + s^2 = 0$, missä $s \in \mathbb{R}$. Muuttujaa s kutsutaan slack-muuttujaksi (pelivaramuuttuja, alijäämämuuttuja). Jos epäyhtälörajoitteita on useita, jokaista vastaten tehtävään lisätään yksi slack-muuttuja. Tällöin saadaan tehtävä, jossa rajoitteet ovat muotoa $g_i(x) + s^2 = 0$, $i = 1, \ldots, k$ ja muuttujien $x \in \mathbb{R}^n$ lisäksi optimoitavina muuttujina on myös slack-muuttujat. Tehtävän diemensiot siis kasvavat slack-muuttujien verran. Tämän takia slack-muuttujien lisääminen ei yleensä helpoita tehtävien ratkaisua ainakaan käsin (vaan päinvastoin). Lähinnä kyseessä on keino johtaa ensimmäisen kertaluvun ehdot epäyhtälörajoitetulle tehtävälle. Näissä luentomuistiinpanoissa ensimmäisen kertaluvun ehtojen formaali johtaminen kuitenkin sivuutetaan.

5.1 Kahden muuttujan tapaus

Tarkastellaan tehtävää, jossa $n = 2$ ja $k = 1$, eli $\max f(x_1, x_2)$ ja $g(x_1, x_2) \leq 0$. Voimme jälleen tehdä muutamia geometrisia havaintoja:

1. jos optimissa $g(x) < 0$ niin rajoitteesta ei tarvitse välittää tässä pisteessä (ns. sisäpisteoptimi),
2. jos rajoite on aktiivinen geometria vastaa yhtälörajoitettua tapausta.

Oletetaan, että optimi on x^* ja $g(x^*) = 0$. Kuten yhtälörajoitetussa tapauksessa $\nabla f(x^*)$ ja $\nabla g(x^*)$ ovat yhdensuuntaiset, sillä muutoin löytyy käypä kasvusuunta, eli $d \neq 0$ siten, että $f(x^* + \lambda d) > f(x^*)$ ja $g(x^* + \lambda d) \leq 0$ tarpeeksi pienillä $\lambda > 0$. Kuten aikaisemmin on todettu, jos $\nabla f(x^*) \cdot d > 0$, niin d on kasvusuunta. Vastaavasti jos $\nabla g(x^*) \cdot d < 0$ niin d on käypäsuunta pisteessä x^*. Käypä kasvusuunta on suunta joka on samanaikaisesti kasvusuunta ja käypä suunta.

Erona yhtälörajoitettun tehtävän geometriaan on se, että gradientit $\nabla f(x^*)$ ja $\nabla g(x^*)$ osoittavat samaan suuntaan. Yhtälörajoitteen tapauksessa gradienttien oli oli oltava yhdensuuntaiset (saman suuntaiset tai vastakkaissuuntaiset). Matemaattisesti ilmaistuna $\nabla f(x^*) = \lambda \nabla g(x^*)$, missä $\lambda \geq 0$. Epäyhtälörajoitetussa tapauksessa rajoitteen kerroin λ (Lagrangen kerroin) ei siis voi olla negatiivinen.

Ensimmäisen kertaluvun ehto lokaalille maksimille voidaan lausua Lagrangen funktion avulla. Optimissa x^* pätee

$$\partial L(x^*, \lambda)/\partial x_i = 0,\ i = 1, 2$$

jollakin $\lambda \geq 0$ ja samalla x^*:n tulee olla käypä, eli $g(x^*) \leq 0$. Kuten yhtälörajoitteiden tapauksessa Lagrangen funktio on $L(x^*, \lambda) = f(x) - \lambda g(x)$, missä λ:aa kutsutaan rajoitteen Lagrangen kertoimeksi. Jos rajoite olisi muodossa $g(x) \leq b$ niin Lagrangen funktio olisi $L(x^*, \mu) = f(x) - \lambda[g(x) - b]$.

Jos optimi on sisäpisteessä, eli $g(x^*) < 0$ niin silloin ensimmäisen kertaluvun ehto toteutuu, kun valitaan $\lambda = 0$, eli $\nabla f(x^*) = \mathbf{0}$. Tämä on sama ensimmäisen kertaluvun ehto kuin rajoittamattomassa optimoinnissa. Kerroin λ voi poiketa nollasta vain, kun $g(x^*) = 0$. Tässäkin tapauksessa λ voi silti olla nolla. Joka tapauksessa optimissa joko $g(x^*) = 0$ tai $\lambda = 0$. Tämän voi kirjoittaa muodossa $\lambda \cdot g(x^*) = 0$, ja tätä ehtoa kutsutaan komplementaarisuusehdoksi (*complementary slackness*).

Kuten yhtälörajoitetussa tehtävässä, jos $\nabla g(x^*) = \mathbf{0}$ ja rajoite on aktiivinen, niin ensimmäisen kertaluvun ehto ei välttämättä toteudu. On jälleen vaadittava "constraint kvalifikaatio": jos rajoite on aktiivinen, niin silloin $\nabla g(x^*) \neq \mathbf{0}$.

Kootaan vielä havainnot eroista yhtälörajoitetun tehtävän ensimmäisen kertaluvun ehtoihin:

1. samannäköinen ehto gradienteille, mutta $\lambda \geq 0$,
2. complementary slackness ehto on uutta, joten ensimmäisen kertaluvun ehdot eivät enää ole yhtälöryhmä vaan nk. komplementaarisuusongelma (tietynlainen systeemi, jossa yhtälöitä ja epäyhtälöitä),
3. minimoinnin ja maksimoinnin tapauksessa ehdot ovat hieman erinäköiset toisin kuin yhtälörajoitetussa tapauksessa (palataan tähän myöhemmin).

Esimerkki 5.1.1. Tarkastellaan tehtävää

$$\max x_1 x_2 \ \text{ rajoitteella } \ x_1^2 + x_2^2 \leq 1.$$

Huomaa, että tehtävällä on geometrinen tulkinta kun $x_1, x_2 \geq 0$. Lagrangen funktio on

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

Ensimmäisen kertaluvun ehdot ovat:

$$\begin{aligned} \partial L/\partial x_1 = x_2 - 2\lambda x_1 = 0, \\ \partial L/\partial x_2 = x_1 - 2\lambda x_2 = 0, \\ \lambda(x_1^2 + x_2^2 - 1) = 0 \text{ (complementary slackness)} \\ \lambda \geq 0 \text{ (nk. duaalikäypyys)} \\ x_1^2 + x_2^2 \leq 1 \text{ (käypyys).} \end{aligned}$$

Lähdetään ratkaisemaan ehtoja kuten yhtälörajoitetussa tapauksessa. Ehdot $\partial L/\partial x_i = 0$, $i = 1, 2$, antavat $\lambda = x_2/(2x_1) = x_1/(2x_2)$, mistä seuraa $x_1^2 = x_2^2$. Tarkastellaan komplementaarisuusehdon mukaisesti tapaukset $\lambda = 0$ ja $\lambda > 0$. Jos $\lambda = 0$, niin $x_1 = x_2 = 0$ ja ensimmäisen kertaluvun ehdot toteutuvat. Jos taas $\lambda > 0$ niin epäyhtälörajoite on aktiivinen $x_1^2+x_2^2 = 1$, jolloin $x_1^2 = x_2^2 = 1/2$. Tästä saadaan neljä ratkaisukandidaattia x:lle. Ne ovat $(\pm 1/\sqrt{2}, \pm 1/\sqrt{2})$ (kaikki plus-miinus kombinaatiot). Koska vaaditaan $\lambda > 0$, niin osa ratkaisukandidaateista voidaan sulkea pois. Jäljelle jää, että optimi on joko $x = (1/\sqrt{2}, 1/\sqrt{2})$ tai $x = -(1/\sqrt{2}, 1/\sqrt{2})$.

5.1.1 Ensimmäisen kertaluvun ehdot usean muuttujan tapauksessa

Oletetaan, nyt että meillä on n muuttujaa ja k rajoitetta. Toisin kuin yhtälörajoitetussa tehtävässä, epäyhtälörajoitetussa tehtävässä rajoitteita voi olla miten paljon tahansa.

Tehtävä on $\max f(x)$ rajoitteilla $g_i(x) \leq 0$, $i = 1, \ldots, k$. Lagrangen funktio voidaan määritellä totuttuun tapaan

$$L(x, \lambda) = f(x) - \sum_{i=1}^{k} \lambda_i g_i(x),$$

ja $\lambda = (\lambda_1, \ldots, \lambda_k)$. Ensimmäisen kertaluvun ehdot tehtävälle on esitetty alla olevassa lauseessa.

Lause 5.1.1. *Oletetaan, että x^* on tehtävän optimiratkaisu (lokaali maksimi), rajoitteet $i = 1, \ldots, k_0$ ovat aktiivisia ja loput eivät ole, ja aktiivisia rajoitteita vastaava Jacobin matriisi on täyttä astetta. Tällöin löytyy Lagrangen kertoimet siten että*

1. $$\frac{\partial L(x^*, \lambda)}{\partial x_i} = 0 \text{ kaikilla } i = 1, \ldots, n,$$
2. $\lambda_i g_i(x^*) = 0$ *kaikilla* $i = 1 \ldots, k$, *ja*
3. $\lambda_i \geq 0$ *kaikilla* $i = 1, \ldots, k$.

Kyseessä on välttämätön optimaalisuusehto (ei riittävä). Huomaa, että ehdoissa vaaditaan myös x^*:n käypyys, eli $g_i(x^*) \leq 0$ kaikilla $i = 1, \ldots, k$, mikä voidaan kirjoittaa myös muodossa $g(x^*) \leq \mathbf{0}$, missä $g = (g_1, \ldots, g_k)$. Komplementaarisuusehto (complementary slackness) puolestaan voidaan ilmaista matemaattisesti eri tavoin:

1. kuten edellä,
2. $g_i(x^*) < 0 \Rightarrow \lambda_i = 0$, tai
3. $\sum_{i=1}^{k} \lambda_i g_i(x^*) = 0$.

Ensimmäisen kertaluvun ehdoissa oleva ei-degeneroituneisuusehto (NDCQ) koskee Jacobin matriisia

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial g_1(x^*)}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial g_1(x^*)}{\partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial g_{k_0}(x^*)}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial g_{k_0}(x^*)}{\partial x_n} \end{pmatrix}.$$

Tämän matriisin on oltava täyttä astetta. Aktiivisia rajoitteita voi olla miten monta hyvänsä optimissa. Jos niitä kuitenkin on enemmän kuin tehtävässä on muuttjia, niin tällöin aktiivsten rajoitteiden gradienteista tulee löytyä n lineaarisesti riippumatonta. Huomautettakoon vielä, että jos aktiivisia rajoitteita on enemmän kuin tehtävässä on dimensioita niin osa rajoitteista on siinä mielessä redundantteja, että niiden Lagrangen kertoimeksi tulee nolla.

Ensimmäisen kertaluvun ehdoissa on olevilla yhtälöillä on seuraavat nimitykset:

1. Lagrangen funktion optimaalisuus (L:n gradientti x:n suhteen nolla, ensimäinen ehto Lauseessa 5.1.1),
2. komplementaarisuusehto (toinen ehto Lauseessa 5.1.1),
3. duaalikäypyys ($\lambda_i \geq 0$, eli kolmas ehto Laueseessa 5.1.1). Huom. Lagrangen kertoimia kutsutaan joskus myös duaalimuuttujiksi,
4. (primaali)käypyys, eli $g(x^*) \leq 0$.

Esimerkki 5.1.2. Etsitään ratkaisu tehtävälle

$$\max x_1 x_2 x_3 \text{ rajoitteilla } x_1 + x_2 + x_3 \leq 1 \text{ ja } x_i \geq 0, \; i = 1, 2, 3.$$

Tämä tehtävä muistuttaa edellisen esimerkin kuluttajan tehtävää. Kirjoitetaan "$\geq$"-ehdot muodossa $-x_i \leq 0$. Jo tässä vaiheessa voidaan päätellä, että optimissa $x_1 + x_2 + x_3 \leq 1$ on aktiivinen ja $x_i > 0 \; \forall i$. Ratkaistaan kuitenkin kokeeksi kaikki mahdolliset pisteet jotka toteuttavat ensimmäisen kertaluvun ehdot. Numeroidaan rajoitteet Lagrangenkertoimia vastaten. Määritellään siis Lagrangen funktio

$$\begin{aligned} L(x_1, x_2, x_3, \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4) =& x_1 x_2 x_3 - \lambda_1(x_1 + x_2 + x_3 - 1) + \\ &+ \lambda_2 x_1 + \lambda_3 x_2 + \lambda_4 x_3. \end{aligned}$$

Tarkistetaan aluksi ei-degeneroituneisuusehto. Rajoitefunktion (g:n) Jacobin matriisi on

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Tämän matriisin aste on kolme, sillä enintään kolme rajoitteista voi olla samaan aikaan aktiivisina. Ei-degeneroituneisuusehdon on näin ollen oltava voimassa myös optimissa.

Ensimmäisen kertaluvun ehdot ovat

$$\begin{aligned}
\partial L/\partial x_1 = x_2x_3 - \lambda_1 + \lambda_2 &= 0 \\
\partial L/\partial x_2 = x_1x_3 - \lambda_1 + \lambda_3 &= 0 \\
\partial L/\partial x_3 = x_1x_2 - \lambda_1 + \lambda_4 &= 0 \\
\sum_i x_i &\leq 1 \\
x_i &\geq 0 \; \forall i \\
\lambda_1 \left[(\sum_i x_i) - 1 \right] - \sum_{i=1}^{3} \lambda_{i+1} x_i &= 0 \\
\lambda_i &\geq 0 \forall i.
\end{aligned}$$

Tarkasteltavana on nyt kaikki mahdolliset kombinaatiot aktiivisia rajoitteita, eli yhdistelmät joissa osa Lagrangen kertoimista on nolla. Aloitetaan tapauksesta $\lambda_1 = 0$, jolloin on oltava $x_2x_3 = x_1x_3 = x_1x_2 = 0$ ja $\lambda_i = 0$ kaikilla i (kolme ensimmäistä yhtälöä ehdoissa). Mahdollisia ratkaisuja ovat kaikki sellaiset vektorit x, joissa kaksi komponenttia on nollia ja yksi on välillä $[0, 1]$, näitä ratkaisuja vastaten $f(x) = 0$.

Oletetaan seuraavaksi, että $\lambda_1 > 0$. Tarkastellaan mitkä muut rajoitteet voivat olla aktiivisia 1:n ollessa aktiivinen. Rajoitteet on nyt numeroitu kuten Lagrangen kertoimet.

Jos $x_1 = 0$, niin "$\nabla_x L = \mathbf{0}$" antaa, että $\lambda_3 = \lambda_4 = \lambda_1 > 0$. Komplementaarisuusehdon mukaan $x_2 = x_3 = 0$, jolloin taas rajoite 1 ei voi olla aktiivinen. Vastaavasti mikään muukaan rajoitteista $x_i \geq 0$ ei voi olla aktiivinen samalla kun rajoite 1 on aktiivinen. Voidaan päätellä, että jos 1 on aktiivinen niin muut eivät ole. Tällöin $\lambda_2 = \lambda_3 = \lambda_4 = 0$ mistä seuraa $x_2x_3 = x_1x_3 = x_1x_2$ ja edelleen $x_i = 1/3 \; \forall i$ ja $\lambda_1 = 1/9$. Kohdefunktioon sijoittamalla havaitaan, että optimi näyttäisi olevan saatu piste $x = (1/3, 1/3, 1/3)$. Tähän olisi päädytty argumentoimalla aivan aluksi, että ei-negatiivisuusrajoitteet eivät voi olla aktiivisia ja jäljelle jäävä rajoite on aktiivinen.

5.1.2 Aktiivisten rajoitteiden päätteleminen

Monissa tapauksissa voidaan päätellä, että jotkin epäyhtälörajoitteet ovat optimissa aktiivisia. Tällöin epäyhtälörajoitteen voi käsitellä yhtälörajoitteena, eli sen voi olettaa aktiiviseksi, kun ratkaisee ensimmäisen kertaluvun ehtoja. Ennen kuin alkaa ratkoa ensimmäisen kertaluvun ehtoja, kannattaa hetki miettiä voiko osan aktiivisista rajoitteista päätellä etukäteen. Jos ensimmäisen kertaluvun ehdoista saa, että rajoitetta vastaava Lagrangenkerroin onkin negatiivinen, päätelmä rajoitteen aktiivisuudesta on mennyt pieleen.

Esimerkki 5.1.3. Kuluttajan teoriassa tarkastellaan tehtävää

$$\max U(x) \text{ rajoitteilla } p_1x_1 + \ldots + p_nx_n \leq I \text{ ja } x_i \geq 0, \; i = 1, \ldots, n.$$

Kun U on kasvava kaikkien argumenttiensa suhteen, niin budjettirajoitteen voi päätellä olevan aktiivinen optimissa. Kuluttajan teoriassa on usein myös $U(x) = 0$ kun $x_i = 0$ jollakin i ja muutoin $U(x) > 0$, mistä voi päätellä, että optimissa $x_i > 0$ kaikilla i.

5.1.3 Lagrangen kertoimien tulkinta

Yhtälörajoitteelle Lagrangen kerroin voitiin tulkita varjohintana, entä epäyhtälörajoitteille? Epäyhtälörajoitetulle tapaukselle tulkinta on sama mikäli aktiiviset rajoitteet eivät muutu, jos parametreja muutetaan vähän. Muotoillaan tämä täsmällisemmin.

Tarkastellaan tehtävää

$$\max_x f(x) \text{ s.e. } g(x) \leq a,$$

missä $g : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}^m$ ja $a \in \mathbb{R}^m$. Oletetaan, että $x(a)$ on tehtävän optimi. Jos aktiiviset rajoitteet eivät muutu jossakin a:n ympäristössä niin silloin $x(a)$:ta vastaavat Lagrangen kertoimet $\lambda(a)$ voidaan tulkita varjohintoina, eli

$$\frac{df(x(a), a)}{da_i} = \lambda_i(a) \text{ kaikilla } i = 1. \dots, m.$$

Esimerkki 5.1.4. Tarkastellaan tehtävää

$$\max x_1 + x_2 \text{ rajoitteilla } x_1^2 + x_2^2 \leq a \quad \text{ja } x_2 \leq 1,$$

missä $a > 0$ on eksogeeninen muuttuja. Mitä tapahtuu, kun $a = 2$? Kannattaa piirtää kuva.

5.2 Minimointitehtävät

Ensimmäisen kertaluvun ehdot epäyhtälörajoitetulle tehtävälle muuttuvat, kun minimoidaan, tai kun rajoite käsitellään muodossa suurempaa kuin nolla ("$\geq$"-muodossa). Ehdot voidaan kirjoittaa kuten maksimoinnin tapauksessa yhdellä muutoksella: kaikkien $\leq$ rajoitteiden Lagrangen kertoimien merkki vaihtuu. Edellä mainitussa esimerkissä esimerkissä optimissa vaaditaan $\lambda_1 \leq 0$. Tämä voidaan päätellä kirjoittamalla alkuperäinen tehtävä muodossa $\max -f(x)$ ja kääntämällä kaikki "$\geq$"-rajoitteet "$\leq$"-rajoitteiksi.

Tarkastellaan esimerkinomaisesti tehtävää $\min f(x)$ s.e. $g_1(x) \leq 0$ ja $g_2(x) \geq 0$. Tämä voidaan muuttaa standardimuotoon

$$\max -f(x) \text{ s.e. } g_1(x) \leq 0, \ -g_2(x) \leq 0.$$

Ensimmäisen keraluvun ehtojen mukaan löytyy $\hat{\lambda}_1, \hat{\lambda}_2 \geq 0$ siten, että

$$-\frac{\partial f(x)}{\partial x_i} - \hat{\lambda}_1 \frac{\partial g_1(x)}{\partial x_i} + \hat{\lambda}_2 \frac{\partial g_2(x)}{\partial x_i} = 0$$

kaikilla $i = 1, \ldots, 2$. Jos muodostamme Lagrangen funktion

$$L(x, \lambda) = f(x) - \lambda_1 g_1(x) - \lambda_2 g_2(x)$$

niin huomaamme, että optimissa on toteuduttava $\nabla_x L(x, \lambda) = \mathbf{0}$ Lagrangen kertoimilla $\lambda_1 = -\hat{\lambda}_1 \leq 0$ ja $\lambda_2 = \hat{\lambda}_2$. Toisin sanottuna "$\leq$"-epäyhtälön merkki vaihtui.

Vastaava päättely voidaan kuin yllä voidaan suorittaa maksimointitehtävälle

$$\max f(x) \text{ s.e. } g(x) \geq 0.$$

Havaitsemme, että jos kirjoitamme Lagrangen funktion $L(x, \lambda) = f(x) - \mu g(x)$, niin Lagrangen kertoimen on oltava negatiivinen eikä positiivinen optimissa.

Määrittelemällä Lagrangen funktion tehtävätyypistä riippumatta aina muodossa $L(x, \lambda) = f(x) + \sum_i \lambda_i g_i(x)$ saamme Lagrangen kertoimille merkkisäännöt

	$g_i(x) \leq 0$	$g_i(x) \geq 0$
$\min f(x)$	$\lambda_i \leq 0$	$\lambda_i \geq 0$
$\max f(x)$	$\lambda_i \geq 0$	$\lambda_i \leq 0.$

Erilaisten merkkisääntöjen opettelu eri tehtävätyypeille on jokseenkin turhaa. Kannattaa opetella ehdot maksimointitehtävälle "standardimuodossa", jota näissä muistiinpanoissa käytetään. Tarvittaessa kaikki muut tehtävät voidaan muuttaa tähän muotoon, jolloin voi soveltaa standardimuotoisen tehtävän ehtoja.

Esimerkki 5.2.1. Tarkastellaan portfoliotehtävää, jossa investoijalla on käytössään budjetti I, jonka voi sijoittaa n:ään eri rahoitusinstrumenttiin. Instrumenttien odotetut tuotot ovat $r_1, \ldots, r_n > 0$. Jos x_i, $i = 1, \ldots, n$, määrät on investoitu eri instrumentteihin, niin koko salkun odotettu tuotto on $r \cdot x = \sum_i r_i x_i$. Salkun varianssi on $x \cdot V x = \sum_i \sum_j \rho_{ij} x_i x_j$, missä ρ_{ij} on instrumenttien i ja j välinen kovarianssi. Matriisi V on kovarianssimatriisi. Sen diagonaalialkiot ρ_{ii} ovat instrumenttien varianssit ja diagonaalin ulkopuolella on kovariansseja ρ_{ij}.

Oletetaan, että tehtävänä on valita varianssin minimoiva salkku (portfolio9 annetulla tuottovaatimuksella. Tuottovaatimus voidaan kirjoittaa epäyhtälörajoitteena $r \cdot x \geq m$, missä m on odotetun tuoton alaraja, joka portfoliolta vaaditaan. Tehtävä on

$$\begin{aligned}
&\min x \cdot Vx \\
&\text{s.e.} \sum_i x_i \leq I, \ \text{(budjettirajoite)}, \\
&r \cdot x \geq m \ \text{(tuottovaatimus)}, \\
&x_i \geq 0 \text{ kaikilla } i \ \text{(ei-negatiivisuusrajoitteet)}.
\end{aligned}$$

Merkitään e:llä vektoria jossa on vain ykkösiä, jolloin budjettirajoite voidaan kirjoittaa muodossa $e \cdot x = I$.

Tehdään muutamia oletuksia, jotta tehtävä ratkeaisi ensimmäisen kertaluvun ehtojen avulla. Oletetaan, että V kääntyvä, ja että optimissa $x_i > 0$, jolloin näiden rajoitteiden Lagrangen kertoimet $\lambda_3, \lambda_4, \ldots, \lambda_{n+2} = 0$. Oletetaan, myös, että tuottovaatimus on sellainen, että käypä joukko ei ole tyhjä. Lisäksi oletetaan, että budjettirajoite ja tuottovaatimusrajoite ovat optimissa aktiivisia.

Tutkitaan seuraavaksi ensimmäisen kertaluvun ehtojen avulla miten ratkaisu riippuu I:stä ja m:stä. Ratkaistaan tehtävää niin pitkälle kuin tämän selvittäminen vaatii. Lagrangen funktio on Lagrangen funktio $L(x, \lambda) = x \cdot Vx - \lambda_1(e \cdot x - I) + \lambda_2(r \cdot x - m)$. Ensimmäisen kertaluvun ehdot ovat

1. Lagrangen funktion optimaalisuus $\nabla_x L(x, \lambda) = \mathbf{0}$ ja $\lambda_1, \lambda_2 \leq 0$ (rajoite "2" käännettiin "$\leq$"-rajoitteeksi)
2. käypyys ja
3. komplementaarisuusehto.

Yhtälöryhmä $\nabla_x L(x, \lambda) = \mathbf{0}$ voidaan kirjoittaa muodossa $2Vx - \lambda_1 e + \lambda_2 r = \mathbf{0}$. Tästä saadaan

$$x = \frac{\lambda_1}{2} V^{-1} e - \frac{\lambda_2}{2} V^{-1} r$$

Lagrangen kertoimet saadaan ratkaistua sijoittamalla edellä saatu x rajoitteisiin:

$$\begin{aligned} e \cdot x = [e \cdot V^{-1} e]\lambda_1/2 - [e \cdot V^{-1} r]\lambda_2/2 = a\lambda_1 - b\lambda_2 \quad &= \quad I, \\ r \cdot x = [r \cdot V^{-1} e]\lambda_1/2 - [r \cdot V^{-1} r]\lambda_2/2 = b\lambda_1 - c\lambda_2 \quad &= \quad m. \end{aligned}$$

Tuloksena saadaan $\lambda_1 = (bm - cI)/(b^2 - ca)$ ja $\lambda_2 = (am - bI)/(b^2 - ca)$.

Lagrangen kertoimet riippuvat luonnollisesti tehtävän eksogeenisista muuttujista. Vaatimalla että $\lambda_1, \lambda_2 \leq 0$ saamme ehtoja eksogeenisille muuttujille.

Koska Lagrangen kertoimet ovat lineaarisia funktioita m:n ja I:n suhteen, voimme päätellä, että ratkaisuna saatava x on myös lineaarinen, eli muotoa $x(I, m) = v_1 m + v_2 I$, missä v_1, ja v_2 ovat vektoreita jotka riippuvat V:stä ja r:stä.

Luku 6

Yleinen epälineaarinen tehtävä

6.1 Ensimmäisen kertaluvun ehdot

Tarkastellaan yleinen epälineaarista tehtävää, jossa voi olla sekä yhtälö- että epäyhtälörajoitteita. Optimointitehtävä on siis:

$$\max f(x) \text{ rajoitteilla } h_1(x) = 0, \ldots, h_m(x) = 0 \text{ ja } g_1(x), \ldots, g_k(x) \leq 0.$$

Muotoillaan seuraavaksi ensimmäisen kertaluvun ehdot tällaisille tehtäville.

Määritellään taas Lagrangen funktio

$$L(x, \lambda, \mu) = f(x) - \sum_i \lambda_i g_i(x) - \sum_j \mu_j h_j(x).$$

Ensimmäisen kertaluvun välttämättömät optimaalisuusehdot, jotka tunnetaan myös nimellä Karush-Kuhn-Tucker ehdot (KKT-ehdot), voidaan lausua seuraavasti.

Lause 6.1.1. *Oletetaan, että kaikki tehtävässä esiintyvät funktiot ovat differentioituvia ja aktiivisten epäyhtälörajoitteiden ja yhtälörajoitteiden perusteella muodostettava Jacobin matriisi on täyttä astetta (ei-degeneroituneisuus) lokaalissa maksimissa x^*. Tällöin löytyy Lagrangen kertoimet siten että*

$$\begin{aligned}
\frac{\partial L(x^*, \lambda, \mu)}{\partial x_i} &= 0 \ \forall i = 1, \ldots, n \\
\lambda_i g_i(x^*) &= 0 \ \forall i = 1, \ldots, k \\
g_i(x^*) &\leq 0 \ \forall i = 1, \ldots, k \\
h_i(x^*) &= 0 \ \forall i = 1, \ldots, m \\
\lambda_i &\geq 0 \ \forall i = 1, \ldots, k
\end{aligned}$$

Voimme tehdä muutaman havainnon ensimmäisen kertaluvun ehdoista. Kyseessä on jälleen välttämätön optimaalisuusehto, joka voi toteutua myös ei-optimaalisissa pisteissä. Yllä olevassa muotoilussa on yhdistetty aikaisemmat tulokset tehtäville, joissa vain yhtälö- tai epäyhtälörajoitteita. Yhtälö- ja epäyhtälörajoitetut tapaukset, kuten rajoittamatonkin, ovat erikoistapauksia yllä olevasta tuloksesta.

Jos k_0 ensimmäistä epäyhtälörajoitetta ovat aktiivisia, niin silloin Lauseessa 6.1.1 oleva ei-degeneroituneisuusehto koskee matriisia

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial g_1(x^*)}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial g_1(x^*)}{\partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial g_{k_0}(x^*)}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial g_{k_0}(x^*)}{\partial x_n} \\ \frac{\partial h_1(x^*)}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial h_1(x^*)}{\partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial h_m(x^*)}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial h_m(x^*)}{\partial x_n} \end{pmatrix}.$$

Kuten aikaisemminkin ehdot koostuvat elementeistä, joita sanotaan Lagrangen funktion optimaalisuudeksi, komplementaarisuusehdoksi, käypyysehdoiksi ja duaalikäypyydeksi. Ehtojen ratkaiseminen tapahtuu samoin kuin tapauksessa, jossa on vain epäyhtälörajoitteita (komplementaarisuusehtojen läpikäynti). Komplementaarisuusehto tarkoittaa jälleen sitä, että Lagrangen kertoimet epäyhtälörajoitteille voivat poiketa nollasta vain aktiivisille rajoitteille.

Minimointitehtävän tapauksessa "$\leq$"-epäyhtälörajoitteiden Lagrangen kertoimet vaihtavat merkkiä. Ja aivan kuten aikaisemmin, merkkisääntöjä ei kannata opetella erikseen erityyppisille tehtäville, koska tehtävät voidaan aina palauttaa standardimuotoon.

Lagrangen kertoimien herkkyystulkinta on sama kuin epäyhtälörajoitetuille tehtäville. Jos aktiiviset rajoitteet eivät muutu parametrien muuttuessa varjohintatulkinta toimii.

Esimerkki 6.1.1. Tarkastellaan tehtävää

$$\max x_1 - x_2^2 \text{ rajoitteilla } x_1^2 + x_2^2 = 4 \text{ ja } x_1, x_2 \geq 0.$$

Lagrangen funktio on

$$L(x, \lambda, \mu) = x_1 - x_2^2 + \lambda_1 x_1 + \lambda_2 x_2 - \mu(x_1^2 + x_2^2 - 4).$$

Ensimmäisen kertaluvun välttämättömät ehdot ovat:

$$\begin{aligned} \partial L/\partial x_1 = 1 + \lambda_1 - 2\mu x_1 &= 0 \\ \partial L/\partial x_2 = -2x_2 + \lambda_2 - 2\mu x_2 &= 0 \\ x_1^2 + x_2^2 &= 4 \\ x_i &\geq 0 \; i = 1, 2 \\ \lambda_i x_i &= 0 \; i = 1, 2 \\ \lambda_i &\geq 0 \; i = 1, 2 \end{aligned}$$

Päätellään seuraavaksi mitkä epäyhtälörajoittet voivat olla aktiivisia samaan aikaan, eli mitkä Lagrangen kertoimista voivat olla nollia samaan aikaan.

Selvästikään molemmat epäyhtälörajoitteet eivät voi olla aktiivisia samaan aikaan. Jos olisi $\lambda_1 = \lambda_2 = 0$ (esim. kun kumpikaan epäyhtälörajoite ei ole aktiivinen) ehdosta $\partial L/\partial x_2 = 0$ saadaan $\mu = -1$. Tästä taas seura $x_1 = -1/2$, eli ei-käypä piste, tai $x_2 = 0$, jolloin $x_1 = 2$ ja $\mu = 1/4$.

Voiko olla muita ratkaisuja kuin $(x_1, x_2, \lambda_1, \lambda_2, \mu) = (2, 0, 0, 0, 1/4)$? Jos olisi niin silloin $x_2 > 0$ ja $\lambda_2 = 0$. Ehtojen perusteella olisi oltava $\mu = -1$ mikä johtaa ei-käypään x_1:een, eli ei voi olla muita ratkaisuja.

Voit pohtia miten ratkaisukandidaatti $(2, 0)$ löytyy päättelemällä esim. geometrisesti.

6.2 Ehtojen riittävyys

Ensimmäisen kertaluvun ehdot ovat välttämättömät: ne toteutuvat optimipisteessä, kun ei-degeneroituvuus olettamus pätee. Kuten olemme havainneet ehdot voivat toteutua myös muissa pisteissä kuin optimissa. Seuraavaksi tarkastelemme kysymystä siitä milloin voidaan olla varmoja siitä, että ensimmäisen kertaluvun ehdot toteuttava piste todella on (lokaalisti) optimaalinen.

Kerrataan vielä lyhyesti toisen kertaluvun riittävä ehto rajoittamattomassa optimoinnissa. Jos $\nabla f(x) = \mathbf{0}$ ja $D^2 f(x)$ on negatiividefiniitti niin silloin x on lokaali maksimi (minimille pos. definiittisyys). Tarkoituksena on yleistää toisten derivaattojen avulla tapahtuva tarkastelu rajoitettuun optimointiin.

6.2.1 Toisen kertaluvun riittävät ehdot

Seuraava tulos antaa toisen kertaluvun riittävät ehdot lokaalille maksimille. Riittävyys tarkoittaa sitä, että jos kyseiset ehdot toteutuvat ensimmäisten kertaluvun ehtojen lisäksi, piste on lokaali maksimi.

Lause 6.2.1. *Ensimmäisen kertaluvun ehdot toteuttava piste x on optimaalinen (lokaali maksimi), kun Lagrangen funktion Hessin matriisi x:n suhteen $D_x^2 L(x, \lambda, \mu)$ on negatiividefiniitti joukossa*

$$\begin{aligned} C = \{ & v \neq \mathbf{0} : \nabla g_i(x) \cdot v = 0, i = 1, \ldots k_0, \\ & \nabla g_i(x) \cdot v \leq 0, \ i = k_0 + 1, \ldots, k_1, \\ & Dh(x)v = \mathbf{0}\}, \end{aligned}$$

missä k_1 ensimmäistä epäyhtälörajoitetta oletetaan aktiivisiksi ja näistä k_0:n ensimmäisen Lagrangen kertoimet ovat aidosti positiivisia.

Yllä olevassa tuloksessa luonnollisesti oletetaan, että Lagrangen kerroinvektorit λ ja μ ovat ne kertoimet, joilla ensimmäisen kertaluvun ehdot toteutuvat pisteessä x vastaten. Lisäksi oletetaan, että kaikki tehtävässä esiintyvät funktiot ovat kahdesti jatkuvasti differentioituvia. Hessin matriisin negatiividefiniittisyys joukossa C tarkoittaa sitä, että $v^T D_x^2 L(x, \lambda, \mu)v < 0$ kaikilla $v \in C$.

Lauseessa 6.2.1 esiintyvä joukko C saadaan, kun aktiiviset epäyhtälörajoitteet ja yhtälörajoitteet linearisoidaan. Esimerkiksi linearisoimalla $g : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}$ pisteen x ympäristössä, saadaan $g(x + \lambda v) \approx g(x) + \lambda \nabla g(x) \cdot v = \lambda \nabla g(x) \cdot v$, $\lambda > 0$. Kun vaaditaan, että x:stä voidaan liikkua vain käypiin suuntiin, saadaan $\nabla g(x) \cdot v \leq 0$. Olettamalla, että rajoite pysyy aktiivisena x:n ympäristössä, saadaan $\nabla g(x) \cdot v = 0$. Tämä edellyttää, että rajoitetta vastaava Lagrangen kertoimet on aidosti positiivinen. Yhtälörajoitetulle tehtävälle C voidaan tulkita yhtälörajoitteiden määräämä tangenttijoukkona.

Joskus voi käydä niin, että toisen kertaluvun ehto ei toteudu siksi koska $C = \emptyset$. Piste voi kuitenkin tällöin olla maksimi. Tapaus $C = \emptyset$ ei ole kovin harvinainen. Aina kun pisteessä x on aktiviisia rajoitteita vähintään yhtä monta kuin muuttujia ja ei-degeneroituneisuusehto pätee, niin joukosta C tulee tyhjä.

Aivan kuten rajoittamattomille tehtävillekin, myös rajoitetuille on ns. toisen kertaluvun välttämätön ehto: maksimissa $D_x^2 L$ on negatiivisemidefiniitti kaikilla $v \in C$ (kun $C \neq \emptyset$). Negatiivi**semi**definiittisyydestä ei kuitenkaan seuraa optimaalisuus. Käytännössä toisen kertaluvun välttämättötön ehto ei ole kovin tarpeellisinen toisin kuin toisen kertaluvun riittävä ehto.

Toisen kertaluvun ehdosta esiintyy useita variaatioita. Alla on esitetty kaksi muotoilua, jotka takaavat ensimmäisen kertaluvun ehdot toteuttavan pisteen optimaalisuuden.

1. Jos $D_x^2 L(x, \lambda, \mu)$ on negatiividefiniitti kaikilla $v \neq \mathbf{0}$, niin x on lokaali maksimi.
2. Jos λ ja μ ovat pistettä x^* vastaavat Lagrangen kertoimet ensimmäisen kertaluvun ehdoissa ja $D_x^2 L(x, \lambda, \mu)$ on negatiividefiniitti kaikilla $v \neq \mathbf{0}$ ja kaikilla käyvillä x, ja kun käypä joukko on konveksi (tästä lisää seuraavassa luvussa), niin piste x^* on globaali maksimi.

Todistetaan yllä olevista toisen kertaluvun ehtojen erikoistapauksista ensimmäinen.

Todistus. Koska $\nabla_x L(x, \lambda, \mu) = \mathbf{0}$ ja $D_x^2 L(x, \lambda, \mu)$ os negatiividefiniitti, on piste x funktion $L(x, \lambda, \mu)$ lokaali maksimi x:n suhteen maksimoitaessa, eli $L(x, \lambda, \mu) > L(y, \lambda, \mu)$ kun y kuuluu x:n tarpeeksi pieneen ympäristöön. Huomaa, että optimaalisuus seuraa rajoittamattoman optimoinnin toisen kertaluvun riittävistä ehdoista. Toisaalta havaitsemme, että $L(x, \lambda, \mu) = f(x)$. Tämä johtuu siitä, että oletamme ensimmäisen kertaluvun ehdot x:ssä. Näiden ehtojen komplementaarisuusehdosta seuraa, että $\sum_i \lambda_i g_i(x) = 0$, eli tämä termi Lagrangen funktiosta pisteessä x häviää. Koska x on käypä pätee $h(x) = \mathbf{0}$, joten myös termi $\sum_i \mu_i h_i(x)$ häviää ja jäljelle jää vain $f(x)$.

Toisaalta voimme päätellä siitä, että $\lambda_i \geq 0$ ja $g_i(x) \leq 0$, että $-\lambda_i g_i(x) \geq 0$, mistä seuraa $f(y) \leq L(y, \lambda, \mu)$, kaikilla käyvillä y pisteen x umpäristössä. Huomaa, että yhtälörajoitteet takaavat sen, että $h(y) = \mathbf{0}$, jolloin termi $\sum_i \lambda_i h_i(y) = 0$.

Yhditämällä edellä saadut tulokset samme

$$f(y) \leq L(y, \lambda, \mu) < L(x, \lambda, \mu) = f(x)$$

kaikilla käyvillä pisteillä y jossakin pisteen x ympäristössä. Näin ollen x on tehtävän lokaali maksimi. □

Periaatteessa minimointitehtäville pätee samanlainen toisen kertaluvun ehto, kun minimointitehtävä on ensin muutettu maksimoinniksi asettamalla kohdefunktioksi $-f(x)$. Tällöin Lagragen funktion Hessin matriisin negatiividefiniittisyydestä seuraa, että piste on $-f$:n lokaalimaksimi, eli f:n lokaali minimi. Toisen kertaluvun ehdot voisi muotoilla myös niin, että minimointitehtävälle vaadittaisi Lagrangen funktion Hessin matriisin $D_x^2 L(x, \lambda, \mu)$ positiividefiniittisyys joukossa C. Tämä kuitenkin edellyttää sitä, että muistaa vaihtaa Lagrangen kertoimien merkit epäyhtälörajoitteille. Kaikkein yksinkertaisinta on siis minimoinnin tapauksessa muuttaa tehtävä maksimointitehtäväksi.

Epäyhtälörajoitetulle tehtävälle samat pisteet eivät (yleensä) toteuta minimointitehtävän ensimmäisen kertaluvun ehtoja kuin maksimointitehtävän. Tämä johtuu siitä että Lagrangen kertoimien merkit vaihtuvat minimoinnin ja maksimoinnin tapauksessa. Yhtälörajoitetuille tehtäville tilanne on helpompi. Sekä minipisteet että maksimipisteet toteuttavat aivan samannäköiset ensimmäisen kertaluvun ehdot. Näin ollen myös lokaalien minimien päättely Lagrangen funktion Hessin matriisin avulla onnistuu. Jos $D_x^2 L(x, \mu)$ on positiividefiniitti kun $v \in C$ niin kyseessä lokaali minimi.

Esimerkki 6.2.1. Tarkastellaan tehtävää

$$\max \ln x_1 + \ln x_2 + \ln x_3 \text{ rajoitteella } x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 \leq 3.$$

Luonnollisesti on oletettava $x_i > 0$ Ensimmäisen kertaluvun ehdotovat:

$$\begin{aligned}
1/x_1 - 2\lambda x_1 &= 0 \\
1/x_2 - 2\lambda x_2 &= 0 \\
1/x_3 - 2\lambda x_3 &= 0 \\
\lambda(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 - 3) &= 0 \\
\lambda &\geq 0
\end{aligned}$$

Tehtävä näyttäisi olevan symmetrinen kaikkien muuttujien suhteen joten luultavasti optimissa $x_1 = x_2 = x_3$, jolloin kaikkien muuttujien on oltava 1 ja $\lambda = 1/2$. Kohdefunktion Hessin matriisi on

$$\begin{pmatrix} -1/x_1^2 & 0 & 0 \\ 0 & -1/x_2^2 & 0 \\ 0 & 0 & -1/x_3^2 \end{pmatrix}.$$

Tämä näyttäisi olevan negatiividefiniitti. Rajoitefunktion h Hessin matriisi on

$$\begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}.$$

Kun kerrotaan tämä vakiolla $(-\lambda)$ saadaan mitä ilmeisimmin negatiividefiniitti matriisi.

Edellä olevan perusteella $D_x^2 L$ on negatiividefiniitti (kaikilla v) ja kaikilla x (kun $x_i > 0$). Saatu ratkaisukandidaatti on siten globaali optimi.

Esimerkki 6.2.2. Tarkastellaan aikaisemmin esitettyä portfoliotehtävää

$$\min x^T V x \text{ s.e. } \sum x_i \leq I \text{ ja } r \cdot x \geq m.$$

Lagrangen funktion Hessin matriisi on $D_x^2 L = D_x^2 f = V + V^T = 2V$ (sillä $V = V^T$). Onko V positiivideﬁniitti? Ainakin positiivisemideﬁnitti, sillä $x^T V x$ on portfolion varianssi (≥ 0). Tämä tehtävä on lineaaris-neliöllinen, eli kohdefunktio on neliöllinen ja rajoitteet ovat lineaarisia. Tällöin Hessin matriisin positiivisemideﬁniittisyys on riittävä ehto minimille.

6.2.2 Definiittisyyden tutkiminen

Symmetrinen matriisi A on negatiidefiniitti, jos sen johtavien pääminoreiden determinantit vaihtavat merkkiä; $|A_1| < 0$, $|A_2| > 0$, $|A_3| < 0$ jne. (tässä indeksi on minorin kertaluku). Tätä voidaan suoraan soveltaa, kun tutkitaan toisen kertaluvun ehtoja; tarkistetaan, että $D_x^2 L$:n on negatiivideﬁniitti (kaikilla v). Tällöin toisen kertaluvun ehdot toteutuvat. Lauseessa 6.2.1 oleva vaatimus $D_x^2 L$:n deﬁniittisyydestä joukossa C on hieman hankalampi asia tutkia. Tämä edellyttää ns. reunustetun Hessin matriisin tutkimista.

Käydään läpi, mitä reunustetuilla Hessin matriiseilla ja niiden definiittisyydellä tarkoitetaan. Oletetaan yksinkertaisuuden vuoksi, että tehtävässä on vain yhtälörajoitteita. Tällöin reunustettu Hessin matriisi on

$$H = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & Dh(x) \\ Dh(x)^T & D_x^2 L(x, \mu) \end{pmatrix}$$

Jos $h : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}^m$ niin on tutkittava $(n-m)$:n suurimman kertaluvun pääminorin determinantit. Jos determinanttien merkit vaihtelevat siten että $\det(H)$ merkki on sama kuin $(-1)^n$:n merkki ja $(n-m)$ päädeterminanttien merkit vaihtelevat, niin $D_x^2 L(x, \mu)$ on negatiivideﬁniitti joukossa C.

Jos esimerkiksi $n = 2$ ja $m = 1$, niin tällöin riittää tutkia vain reunustetun Hessin matriisin determinantti ($n - m$=1 suurin pääminori). Jos se on positiivinen niin $D_x^2 L(x, \mu)$ on negatiivideﬁniitti.

Esimerkki 6.2.3. Oletetaan, että Lagrangen funktion Hessin matriisi H on

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Ja rajoitteiden Jacobin matriisi

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -9 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Reunustettu Hessin matriisi on tällöin

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & -9 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & -9 & 0 & -1 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 2 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & -1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Koska $n = 4$ ja $m = 2$ tämän definiittisyyden tutkiminen edellyttää kahden suurimman pääminorin laskemista, eli on laskettava matriisin itsensä determinantti (suurin pääminori) ja sen matriisin determinantti, joka saadaan yllä olevasta matriisista, kun siitä poistetaan viimeinen rivi ja sarake. Tässä esimerkissä matriisin determinantti on 24 (ensimmäinen pääminori) ja toiseksi suurin pääminori on

$$\det \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & -9 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & -9 & 0 & -1 & 2 \\ 1 & 0 & 0 & 2 & 1 \end{pmatrix} = 77.$$

Molemmat minorit ovat positiivisia. Tällöin reunustettu Hessin matriisi on positiividefiniitti. Jos kokeilet mitä tapahtuu, kun korvaat H:n matriisilla $-H$ ja suoritat tarkastelun uudestaan, huomaat että suurin pääminori on jälleen 24 ja toiseksi suurin -77. Minorit siis vaihtavat merkkiä ja suurimman merkki on sama kuin $(-1)^4 = +1$, joten reunustettu Hessin matriisi on negatiividefiniitti.

6.2.3 Toisen kertaluvun ehtojen testaaminen

Oletetaan, että ensimmäisen kertaluvun ehdoista on saatu ratkaisuna kandidaatti (tai useita) optimiksi. Käydään läpi keittokirjatyyppisesti miten toisen kertaluvun ehdot kannattaa tutkia.

Aloita tarkastelu pohtimalla vaikuttaisiko siltä, että D^2L olisi negatiividefiniitti kaikilla v. Tähän pohdintaa ei ole syytä panostaa kohtuuttoman paljon. Esim. ei ole syytä alkaa suoraan laskeskella pääminoreiden determinanttia D^L:lle.

1. koska D^2f on osa D^2L:ää, aloitetaan tarkastelu D^2f:stä
2. jos näyttää siltä että D^2f ei ole negatiividefiniitti, niin tuskin on D^2L:kään (kaikilla v)
3. jos D^2f näyttäisi olevan negatiividefiniitti, niin tee sama pohdinta rajoitteille
4. jos päädyt siihen, että rajoitteiden Hessin matriisit voisivat olla positiividefiniittejä (negatiividefiniittejä) niille rajoitteille joiden kerroin on positiivinen (negatiivinen) niin yritä osoittaa, että myös D^2L on negatiividefiniitti kaikilla v. Tässä vaiheessa voi ruveta käymään läpi Lagrangen funktion Hessin matriisin pääminoreiden determinantteja.

Jos edellisen vaiheen pohdinta ei tuota tulosta, siirry tarkastelemaan reunustetun Hessin matriisin definiittisyyttä. Reunustetun Hessin matriisin definiittisyystarkasteluun ei usein suoraan ole tarvetta, joten siihen ei kannata ryhtyä ellei se näytä aivan välttämättömältä. Vaihtoehtoisesti voit tutkia D^2L:n definiittisyyttä joukossa C suoraan määritelmän perusteella. Tällön voi eliminoida osan muuttujista (v) tangenttitason määritelmästä. Sijoittaa muiden muuttujien suhteen eliminoidut muuttujat D^2L:n lausekkeeseen ja katso voisiko tämän jälkeen definiittisyydestä sanoa jotain.

Huom. optimoinnissa on muitakin riittäviä ehtoja kuin toisen kertaluvun ehdot. Toisen kertaluvun ehdot ovat usein melko työläät tutkia, joten on parempi ensin katsoa olisiko tehtävän rakenteessa jotain sellaista, jonka avulla optimaalisuus olisi helpompi todeta. Tähän palataan konkaavien tehtävien yhteydessä.

Esimerkki 6.2.4. Olkoon ratkaistavana tehtävä

$$\max x_1^2 x_2 \text{ rajoitteella } 2x_1^2 + x_2^2 = 3.$$

Ensimmäisen kertaluvun ehdosta saadaan kuusi kandidaattia optimiksi:

$$(x_1, x_2, \mu) = \begin{cases} (0, \pm\sqrt{3}, 0) \\ (\pm 1, 1, 1/2) \\ (\pm 1, -1, -1/2). \end{cases}$$

Pisteiden $x = (0, \pm\sqrt{3})$ optimaalisuudesta voidaan päätellä suoraan jotain. Kun $x_2 \geq 0$ ($x_2 \leq 0$) niin kohdefunktio on vähintään (enintään) nolla. Tämän perusteella voidaan sanoa, että $x = (0, \sqrt{3})$ on lokaali minimi ja $x = (0, -\sqrt{3})$ on lokaali maksimi. Muille pisteille ei vaikuta mitenkään ilmeiseltä ovatko ne lokaaleja minimejä vai maksimeja.

Lasketaan Hessin matriisi kohdefunktiolle:

$$\begin{pmatrix} 2x_2 & 2x_1 \\ 2x_1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Ensimmäisen asteen johtava pääminori on $2x_2$ ja toisen asteen johtava pääminori on matriisin determinantti $-4x_1^2 \leq 0$. Hessin matriisi $D^2(x_1^2 x_2)$ vaikuttaisi olevan indefiniitti. Ainakaan matriisi ei ole positiividefiniitti, eikä negatiividefiniitti. Tässä vaiheessa voisimme jo todeta, että matriisista D^2L ei välttämättä tule positiivi- tai negatiividefiniittiä kaikilla $v \neq \mathbf{0}$. Voisimme siis siirtyä tutkimaan reunustettua Hessin matriisia. Tarkastellaan kuitenkin seuraavaksi rajoitetteen Hessin matriisia vielä erikseen.

Rajoitteen määräävän funktion Hessin matriisi on

$$\begin{pmatrix} 4 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}.$$

Tämä on positiividefiniitti matriisi koska diagonaalilla on posiitivisa alkioita. Voimme esimerkiksi päätellä, että matriisista D^2L tulee negatiividefiniitti, kun rajoitteen Lagrangen kerroin on positiivinen.

Tarkastellaan seuraavaksi Lagrangen funktion reunustettua Hessin matriisia. Pisteissä $x = (\pm 1, -1)$ saadaan

$$D_x^2 L = \begin{pmatrix} 0 & \pm 2 \\ \pm 2 & 1 \end{pmatrix},$$

jonka definiittisyydestä ei pysty sanomaan juuri mitään silmämääräisesti. Harjaantuneempi saatta huomata, että matriisi on indefiniitti. Reunustettu Hessin matriisi on

$$\begin{pmatrix} 0 & \pm 4 & -2 \\ \pm 4 & 0 & \pm 2 \\ -2 & \pm 2 & 1 \end{pmatrix}.$$

Jos muuttujia n ja rajoitteita m niin on tarkasteltava $n-m$ suurinta pääminoria. Tässä tapauksessa $n=2$ ja $m=1$, eli riittää tarkastella vain edellä saadun matriisin determinanttia ja se on -48. Tästä voidaan päätellä että $D_x^2 L$ on positiividefinitti rajoitteiden määräämässä tangenttijoukossa, joten pisteet ovat lokaaleja minimejä. Vastaavasti pisteet $(x_1, x_2, u) = (\pm 1, 1, 1/2)$ ovat lokaaleja maksimeja.

Voit vielä pohtia miten vastaava tarkastelu muuttuu jos rajoitteena olisikin ollut $2x_1^2 + x_2^2 \leq 3$.

Esimerkki 6.2.5. Olkoon tehtävänä

$$\begin{aligned} &\max x_1^2 + x_1 + 4x_2^2 \\ &\text{s.e. } 2x_1 + 2x_2 = 1 \\ &x_1, x_2 \geq 0. \end{aligned}$$

Tavoitteena on maksimoida kohdefunktio tason positiivisessa neljänneksessä, jonka rajaa suora (ensimmäinen rajoite). Kohdefunktio on kasvava molempien muuttujien suhteen, joten voimme päätellä, että optimissa ensimmäinen rajoite on aktiivinen. Näin ollen ratkaisu on joko sellainen, että vain ensimmäinen rajoite on aktiivinen ja $x_1, x_2 > 0$, tai ensimmäinen rajoite on aktiivinen ja joko $x_1 = 0$ tai $x_2 = 0$. Tarkastellaan seuraavaksi nämä kolme tapausta.

Oletetaan aluksi, että $sx_1 + 2x_2 = 1$ ja $x_1, x_2 > 0$. Lagrangen funktion optimaalisuus antaa

$$\begin{aligned} 2x_1 - 2\lambda_1 &= 0 \\ 8x_2 - 2\lambda_1 &= 0. \end{aligned}$$

Saamme, että $x^1 = (\lambda_1 - 1/2, \lambda_1/4)$. Kun sijoitetaan tämä rajoitteeseen löydetään $\lambda_1 = 4/5$, jolloin $x^1 = (7/10, 1/5)$. Tutkitaan seuraavaksi toisen kertaluvun ehtoa. Kohdefunktion Hessin matriisi on

$$D^2 f(x) = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 8 \end{pmatrix},$$

joka on selvästi positiividefiniitti. Tämän matriisi on luonnollisesti positiividefiniitti myös joukossa C. Näin ollen piste x^1 ei ole tehtävän maksimi. Se ei myöskään ole minimi, koska on selvää että tästä pisteestä voidaan liikkua käypään laskusuuntaan.

Tutkitaan seuraavaksi mitä tapahtuu jos $x_1 = 0$ tai $x_2 = 0$ samalla, kun ensimmäinen rajoite on aktiivinen. Jos $x_1 = 0$ niin rajoitesuoran yhtälöstä saadaan $x_2 = 1/2$. Merkitään

$x^2 = (0, 1/2)$. Lagrangen funktion optimaalisuus antaa yhtälöt

$$\begin{aligned} 1 - 2\lambda_1 + \lambda_2 &= 0 \\ 4 - 2\lambda_1 &= 0. \end{aligned}$$

Saamme Lagrangen kertoimiksi $\lambda_1 = 2$ ja $\lambda_2 = 3$. Tässä pisteessä käy niin, että $C = \emptyset$, joten toisen kertaluvun ehtoja ei voida tutkia. Sama tapahtuu myös toisessa nurkkapisteessä $x^3 = (1/2, 0)$. Nämä pisteet ovat molemmat lokaaleja maksimeja geometrian perusteella.

Esimerkki 6.2.6. Tehtävänä on maksimoida $x^2y^2z^2$ rajoitteella $x^2 + y^2 + z^2 = 3$. Ensimmäisen kertaluvun ehdot toteutuvat, kun $(x, y, z) = (1, 1, 1)$ ja rajoitteen Lagrangen kerroin on $\mu = 1$. Tarkastellaan toisen kertaluvun ehdot reunustetun Hessin matriisin avulla. Reunustettu Hessin matriisi on

$$\begin{pmatrix} 0 & 2x & 2y & 2z \\ 2x & 2y^2z^2 - 2\mu & 4xyz^2 & 4xy^2z \\ 2y & 4xyz^2 & 2x^2z^2 - 2 & 4x^2yz \\ 2z & 4xy^2z & 4x^2yz & 2x^2y^2 - 2\mu \end{pmatrix}$$

Pisteessä $x = (1, 1, 1)$ ja $\mu = 1$ tämä on

$$\begin{pmatrix} 0 & 2 & 2 & 2 \\ 2 & 0 & 4 & 4 \\ 2 & 4 & 0 & 4 \\ 2 & 4 & 4 & 0 \end{pmatrix}.$$

Koska $n = 3$ ja $m = 1$, riittää tutkia yllä olevan matriisin determinantti (suurin pääminori) ja toiseksi suurin pääminori

$$\det \begin{pmatrix} 0 & 2 & 2 \\ 2 & 0 & 4 \\ 2 & 4 & 0 \end{pmatrix}.$$

Ensimmäinen on $m_1 = -192$ ja jälkimmäinen $m_2 = 32$. Determinantit vaihtavat merkkiä. Koska m_1:n merkki on sama kuin $(-1)^3$:n voimme päätellä, että kyseessä on tehtävän maksimi.

Luku 7

Konkaavit optimointitehtävät

7.1 Konveksit joukot

Konveksit joukot ovat tärkeässä asemassa optimoinnissa. Kun käypä joukko on konveksi ja kohdefunktio on konkaavi, niin ensimmäisen kertaluvun ehdot toteuttavat pisteet ovat globaaleja optimeja. Perehdytään seuraavaksi siihen mitä ovat konveksit joukot.

Määäritelmä 7.1.1. $X \subset \mathbb{R}^n$ on konveksi jos $\lambda x + (1-\lambda)y \in X$ kaikilla $x, y \in X$ ja $\lambda \in [0,1]$.

Vektoria $\lambda x + (1-\lambda)y$ sanotaan x:n ja y:n konveksiksi kombinaatioksi. Yleisemmin konveksilla kombinaatiolla voidaan tarkoittaa mitä tahansa seuraavanlaista painotettua summaa joukosta vektoreita:

$$\sum_{i=1}^{m} \lambda_i x^i,$$

missä $x^i \in X$, $i = 1, \ldots, m$, $\sum_i \lambda_i = 1$ ja $\lambda_i \geq 0$ kaikilla $i = 1, \ldots, m$. Konveksi joukko voidaan myös määritellä niin, että minkä hyvänsä joukon X alkioista muodostetun konveksin kombinaation on kuuluttava joukkoon X.

Listataan joitakin esimerkkejä konvekseista joukoista.

Esimerkki 7.1.1. Hypertasot ovat konvekseja, eli pisteet jotka toteuttavat yhtälön $p \cdot x = c$ muodostavat konveksin joukon. Käydään lyhyesti läpi todistus, sille että hypertasot ovat konvekseja. Otetaan kaksi pistettä x^1 ja x^2, jotka toteuttavat hypertason yhtälön ja osoitetaan, että näiden konveksi kombinaatio toteuttaa myös hypertason yhtälön. Sijoitetaan $\lambda x^1 + (1-\lambda)x^2$ yhtälöön $p \cdot x = c$:

$$p \cdot \left[\lambda x^1 + (1-\lambda)x^2\right] = \lambda p \cdot x^1 + (1-\lambda)p \cdot x^2 = \lambda c + (1-\lambda)c = c,$$

joten konveksi kombinaatio toteuttaa hypertason yhtälön. Tämä todistaa hypertason konveksisuuden. Konveksisuustodistukset ovat tyypillisesti tämän kaltaisia.

Suljetut ja avoimet puoliavaruudet ovat konvekseja; $p \cdot x \leq c$, $p \cdot x \geq c$, (myös $p \cdot x < c$, $p \cdot x > c$).

Ellipsoidit, pisteet jotka toteuttavat $x \cdot Vx \leq c$ (V pos.def.), ovat konvekseja joukkoja.

Lineaarisen yhtälöryhmän ratkaisujen joukko on konveksi.

Joukot $\{x\}$, $\emptyset$ ja $\mathbb{R}^n$. ovat konvekseja.

Seuraavat operaatiot säilyttävät konveksisuuden:

1. konveksien joukkojen leikkaus on konveksi, eli
$$X_1 \cap X_2 = \{x : x \in X_1 \text{ ja } x \in X_2\}$$
on konveksi kun X_1 ja X_1 ovat konvekseja, itse asiassa mielivaltaiset leikkaukset $\cap_{\alpha \in I} X_\alpha$ konvekseista joukoista tuottavat konveksin joukon,
2. lineaarinen kuvaus konveksista joukosta on konveksi,
3. konveksien joukkojen karteesinen tulo on konveksi.

Seuraavissa esimerkeissä hyödynnetään sitä, että konveksien joukkojen leikkaukset ovat konvekseja, kun perustellaan joukon konveksisuus. Jälkimmäinen esimerkki demonstroi sitä miten optimointehtävän käyvän joukon konveksisuus voidaan perustella.

Esimerkki 7.1.2. Polyhedronit, eli puoliavaruuksien leikkaukset, ovat konvekseja. Tämä seuraa suoraan siitä, että konveksien joukkojen leikkaukset ovat konvekseja.

Esimerkki 7.1.3. Tarkastellaan kuluttajan tehtävän käypää joukko, eli kuluttajan budjettijoukkoa. Tehtävän rajoitteet ovat $p \cdot x \leq I$, ja $x_1, \ldots, x_n \geq 0$. Jokainen näistä rajoitteista voidaan tulkita suljettuna puoliavaruutena. Suljetut puoliavaruudet ovat konvekseja. Käypä joukko on näiden leikkaus

$$\{x \in \mathbb{R}^n : p \cdot x \leq I\} \cap \{x \in \mathbb{R}^n : x_1 \geq 0\} \cap \ldots \cap \{x \in \mathbb{R}^n : x_n \geq 0\}.$$

Koska kyseessä on konveksien joukkojen leikkaus on kuluttajan budjettijoukon

$$\{x \in \mathbb{R}^n : p \cdot x \leq I,\ x_i \geq 0,\ i = 1, \ldots, n\}$$

oltava konveksi.

Todistetaan seuraavaksi esimerkinomaisesti, että kahden konveksin joukon leikkaus on konveksi. Todistus on tyypillinen konveksisuustodistus: otetaan kaksi pistettä joukosta ja näytetään oletusten avulla että näiden konveksi kombnaatio kuuluu myös kyseiseen joukkoon.

Esimerkki 7.1.4. Olkoon X_1 ja X_2 kaksi konveksia joukkoa. Näytetään, että $X_1 \cap X_2$ on myös konveksi. Otetaan mielivaltaiset vektorit $x^1, x^2 \in X_1 \cap X_2$, eli $x^1, x^2 \in X_1$ ja $x^1, x^2 \in X_2$. Muodostetan vektoreista x^1 ja x^2 konveksi kombinaatio: $x^\lambda = \lambda x^1 + (1-\lambda)x^2$, missä $\lambda \in [0, 1]$. Koska $x^1, x^2 \in X_i$, $i = 1, 2$, ja joukot X_1 ja X_2 ovat konvekseja, saamme $x^\lambda \in X_i$, $i = 1, 2$. Tämä tarkoittaa sitä, että $x^\lambda \in X_1 \cap X_2$.

7.2 Konkaavit funktiot

Määritellään seuraavaksi konkaavit funktiot. Olkoon $X \subseteq \mathbb{R}^n$ konveksi joukko.

Määäritelmä 7.2.1. Funktio $f : X \mapsto \mathbb{R}$ on konkaavi jos

$$f(\lambda x + (1-\lambda)y) \geq \lambda f(x) + (1-\lambda)f(y) \; \forall x, y \in X, \; \lambda \in [0,1].$$

Funktio on aidosti konkaavi jos

$$f(\lambda x + (1-\lambda)y) > \lambda f(x) + (1-\lambda)f(y) \; \forall x, y \in X, \; x \neq y, \; \lambda \in (0,1).$$

Jos $-f$ on (aidosti) konkaavi niin f on (aidosti) konveksi funktio

Konkaavit funktiot ovat siis sellaisia funktioita, joiden kuvaajat ovat alaspäin kuperia. Kun piirretään jana pisteestä $(x^1, f(x^1))$ mihin hyvänsä toiseen pisteeseen $(x^2, f(x^2))$, kulkee funktion f kuvaaja välillä x^1:stä x^2:een tämän janan yläpuolella (piirrä kuva). Konvekseille funktiolle tilanne on päin vastainen; funktion kuvaaja kulkee pisteiden välisen janan alapuolella. Konkaavit funktiot ovat tärkeitä maksimointitehtävien kohdefunktioina, kun taas konveksit funktiot ovat tärkeitä minimointitehtävien kohdefunktioina. Koska kaikki konkaaveja funktioita koskevat tulokset saadaan myös konvekseille funktioille, rajoitutaan seuraavaksi lähinnä konkaaveihin funktioihin.

Konkaavisuuden tutkiminen onnistuu useinmmiten funktion toisia derivaattoja tutkimalla.

Lause 7.2.1. *Jos $D^2 f(x)$ on negatiivisemidefiniitti kaikilla $x \in X$ niin f on konkaavi. Funktio on aidosti konkaavi, jos $D^2 f(x)$ on negatiividefinitti kaikilla $x \in X$.*

Huomaa, että vastaavasti voidaan perustella myös funktion konveksisuus. Jos $D^2 f(x)$ on positiivisemidefiniitti kaikilla $x \in X$, niin f on konveksi. Konkaaveilla funktioilla on myös seuraavat ominaisuudet, joita tosin tällä kurssilla ei juuri hyödynnetä:

1. funktion kuvaaja tangettisuoran/tason alapuolella, funktio on konkaavi jos ja vain jos

$$f(y) - f(x) \leq \nabla f(x) \cdot (y - x) \; \forall x, y \in X, \tag{7.1}$$

2. gradientti on "monotoninen":

$$[\nabla f(x) - \nabla f(y)] \cdot (x - y) \leq 0 \; \forall x, y \in X.$$

Listataan seuraavaksi esimerkkejä konkaaveista funktioista.

Esimerkki 7.2.1. Logaritmifunktio $\ln(x)$ on aidosti konkaavi, kun $x > 0$. Funktion toinen derivaatta on $D^2 f(x) = -1/x^2 < 0$ kaikilla $x > 0$.

Eksponenttifunktio on konveksi, eli funktio $-e^x$ on aidosti konkaavi. Tämän voi jälleen perustella toisen derivaatan merkin avulla.

Funktiot x^α ovat konkaaveja, kun $\alpha \in [0,1]$. Myös $-|x|^p$ on konkaavi, kun $p \geq 1$.

Funktio $f(x) = \min\{x_1, \ldots, x_n\}$ on esimerkki ei-differentioituvasta konkaavista funktiosta. Tässä tapauksessa konkaavisuus on perusteltava suoraan määritelmästä:

$$
\begin{aligned}
&f(\lambda x^1 + (1-\lambda)x^2) = \min\{\lambda x_1^1 + (1-\lambda)x_1^2, \ldots, \lambda x_n^1 + (1-\lambda)x_n^2\} \\
&\geq \min\{\lambda x_1^1 + (1-\lambda)f(x^2), \ldots, \lambda x_n^1 + (1-\lambda)f(x^2)\} = \min\{\lambda x_1^1, \ldots, \lambda x_n^1\} + (1-\lambda)f(x^2) \\
&= \lambda f(x^1) + (1-\lambda)f(x^2).
\end{aligned}
$$

Lineaarinen (affiini) funktio $c \cdot x + b$ on sekä konveksi, että konkaavi.

Neliömuoto $x \cdot Vx$ on konkaavi, kun V on negatiivisemidefiniitti. Tämä voidaan osoittaa tarkistamalla ehto (7.1). Nyt $\nabla f(x) = (V + V^\top)x$, jolloin saadaan $\nabla f(x)^\top (y-x) = x^\top V(y-x) + (y-x)^\top Vx$, huom. $(y-x)^\top Vx = x^\top V^\top (y-x)$. Ehto (7.1) saadaan sievennettyä muotoon $(x-y)^\top V(x-y) \leq 0$, joka pätee kaikilla $x, y \in \mathbb{R}^n$ jos ja vain jos V on negatiivisemidefiniitti.

Optimoinnissa esiintyvät kohdefunktiot ovat usein yhdistelmiä konkaaveista funktioista. Tällöin konkaavisuus voidaan usein perustella, sillä että operaatiot, jolla kohdefunktio on muodostettu säilyttävät konkaavisuuden. Listataan seuraavaksi merkittävimmät operaatiot jotka säilyttävät konkaavisuuden:

1. positiivisesti painotettu summa $\sum w_i f_i(x)$, $w_i \geq 0$, konkaaveista funktioista on konkaavi,
2. minimi $g(x) = \min_{\alpha \in A} f(x, \alpha)$, on konkaavi, kun $f(x, \alpha)$ on konkaavi kaikilla $\alpha \in A$,
3. yhdistetty funktio $f(x) = h(g(x))$, $g = (g_1, \ldots, g_m) : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}^m$, $h : \mathbb{R}^m \mapsto \mathbb{R}$, f on konkaavi seuraavissa tapauksissa
   (a) kun h on konkaavi, ei-vähenevä ja g_i on konkaavi kaikilla i,
   (b) kun h on konkaavi, ei-kasvava ja g_i on konveksi kaikilla i,
   (c) kun h on konkaavi ja g on lineaarinen/affiini ($g(x) = Ax + b$).

Yllä olevat tulokset voidaan luonnollisesti muotoilla myös konvekseille funktioille lähtien siitä, että f on konveksi jos ja vain jos $-f$ on konkaavi. Voit kokeilla millaisia ominaisuuksia saat johdettua sijoittamalla f:n tilalle $-f$:n yllä olevassa listassa.

Otetaan seuraavaksi pari esimerkkiä siitä miten yllä olevia operaatiota voi hyödyntää konkaavisuustarkasteluissa.

Esimerkki 7.2.2. Funktio $f(x) = x \cdot Vx + c \cdot x + b$ on konkaavien funktioiden summa, kun V on negatiivisemidefiniitti. Siten f on konkaavi.

Logaritmimuunnos, joka on varsin yleinen taloustieteessä, antaa konkaavista yhden muuttujan funktiosta muunnettuna konkaavin funktion. Tämä pätee, koska logaritmi on ei-vähenevä ja konkaavi.

Tarkastellaan funktioita $|x|^p$, $p \geq 1$. Kolmioepäyhtälön perusteella

$$|\lambda x^1 + (1-\lambda)x^2| \leq \lambda |x^1| + (1-\lambda)|x^2|,$$

kun $\lambda \in [0,1]$, joten $|x|$ on konveksi funktio. Funktio y^p on kasvava (ei-vähenevä) kun $y \geq 0$. Lisäksi y^p on konveksi ei-negatiivisilla y, sillä $D^2 y^p = p(p-1)y^{p-2} \geq 0$, kun $y \geq 0$. Yllä olevassa listassa kohta 3.a voidaan muotoilla konveksille funktiolle: $h(g)$ on konveksi, jos h on konveksi ja ei-vähenevä ja g on konveksi. Näin ollen $|x|^p$ on konveksi.

Käydään vielä läpi joitakin konkaavien funktioiden ominaisuuksia, ennen kuin siirrytään konkaaveihin optimointitehtäviin.

1. Konkaavin funktion ylätasojoukot
$$U(f;\alpha) = \{x \in X : f(x) \geq \alpha\},$$
$\alpha \in \mathbb{R}$, ovat konvekseja joukkoja. Vastaavasti konveksin funktion alatasojoukot
$$L(f;\alpha) = \{x \in X : f(x) \leq \alpha\},$$
$\alpha \in \mathbb{R}$, ovat konvekseja joukkoja.
2. Jos funktio on rajoitettu ($\exists M > 0$ s.e. $|f(x)| < M \ \forall x \in X$) niin konveksisuus on yhtä pitävää sen kanssa, että
$$f(\lambda x + (1-\lambda)y) \geq \lambda f(x) + (1-\lambda) f(y)$$
jollakin $\lambda \in (0,1)$.
3. Konkaavi funktio on jatkuva määrittelyjoukon sisäpisteissä (epäjatkuvuuksia voi tulla vain määrittelyjoukon X reunoilla).
4. Konkaavi funktio on differentioituva *melkein koko* määrittelyjoukossa (ei derivoituvuuspisteiden muodostaman joukon "tilavuus" on nolla).

Seuraavassa esimerkissä sovelletaan tulosta konkaaveiden funktioiden ylätasojoukkojen konvesisuudesta, kun näytetään, että annettu joukko on konveksi. Huom. funktion ylätasojoukko voi olla konveksi vaikka funktio ei olisi konkaavi.

Esimerkki 7.2.3. Näytetään, että joukko
$$S = \{x \in \mathbb{R}^2 : 5\sqrt{x_1} + 2\sqrt{x_2} \geq 4,\ x_1 + 3x_2 < 50,\ x_1, x_2 \geq 0\}$$
on konveksi. Kyseessä on kahden joukon leikkaus:
$$S = \{x \in \mathbb{R}^2 : 5\sqrt{x_1} + 2\sqrt{x_2} \geq 4\} \cap \{x \in \mathbb{R}^2 : x_1 + 3x_2 < 50\} \cap \{x \in \mathbb{R}^2 : x_1, x_2 \geq 0\}.$$
Funktio $f(x) = 5\sqrt{x_1} + 2\sqrt{x_2}$ on konkaavi (laske Hessin matriisi ja määritä sen definiittisyys). Joukko $\{x \in \mathbb{R}^2 : 5\sqrt{x_1} + 2\sqrt{x_2} \geq 4\}$ on ylätasojoukko $U(f;4)$. Koska kyseessä on konkaavin funktion ylätasojoukko, kyseessä on konveksi joukko. Joukko $\{x \in \mathbb{R}^2 : x_1 + 3x_2 < 50\}$ on hypertason määräämä avoin puoliavaruus, joten se on konveksi. Joukko $\{x \in \mathbb{R}^2 : x_1, x \geq 0\}$ on kahden suljetun puoliavaruuden leikkaus, joten se on konveksi joukko. Joukko S on konveksien joukkojen leikkaus, joten se on konveksi.

7.3 Konkaavia optimointia

Konkaavi optimointitehtävä on sellainen, jossa maksimoidaan konkaavia kohdefunktiota konveksissa joukossa, eli $\max_{x \in X} f(x)$, missä f konkaavi funktio ja X konveksi joukko.

Kuten olemme jo havainneet, käypä joukko määäräytyy yleensä rajoitteista. Kun rajoitteet määräytyvät konvekseista ja lineaarisista (tai affiineista) funktioista, niin käypä joukko on konveksi:

$$X = \{x \in \mathbb{R}^n : g(x) \leq \mathbf{0},\ h(x) = \mathbf{0}\}$$

on konveksi kun g_i, $i = 1, \ldots, k$, ovat konvekseja ja $h(x) = Ax + b$.

Optimointikirjallisuudessa tarkastellaan usein minimointitehtäviä. Tällöin puhutaan konvekseista tehtävistä, kun kohdefunktio on konveksi ja käypä joukko on konveksi joukko. Koska konkaavit ja konveksit tehtävät ovat muutettavissa toisikseen (korvaa $min f(x)$ operaatiolla $\max f(x)$ tai toisin päin) kutsutaan myös konkaaveja tehtäviä usein konvekseiksi optimointitehtäviksi.

Tärkeimmät konkaavia optimointia koskevat tulokset on listattu seuraavaan lauseeseen.

Lause 7.3.1. *Konkaavin tehtävän lokaali maksimi on tehtävän globaali maksimi. Ensimmäisen kertaluvut ehdot (mukaanlukien NDCQ) toteuttavat pisteet ovat tehtävän globaaleja optimeja.*

Todistus. Ensimmäinen tulos voidaan osoittaa vastaoletuksella. Oletetaan, että x^1 on lokaali optimi, joka ei ole globaali optimi. Tällöin löytyy x^2 siten, että $f(x^2) > f(x^1)$. Tästä ja konkaavisuudesta seuraa, että

$$\begin{aligned} f\left(\lambda x^1 + (1-\lambda)x^2\right) &= f\left(x^1 + (1-\lambda)(x^2 - x^1)\right) \geq \lambda f(x^1) + (1-\lambda) f(x^2) \\ &> \lambda f(x^1) + (1-\lambda) f(x^1) = f(x^1), \end{aligned}$$

kaikilla $\lambda \in (0, 1)$. Tällöin x^1 ei voi olla lokaali optimi koska sen jokaisessa ympäristössä on sitä parempia pisteitä.

Hahmotellaan vielä lyhyesti miten jälkimmäinen tulos voidaan todistaa, mutta sivuutetaan yksityiskohdat. Rajoittamattomalle tehtävälle tulos seuraa siitä, että konkaavi funktio kulkee sen kuvaajalle piirrettyjen tangenttisuorien alapuolella. Kuten toisen kertaluvun ehtoja tarkasteltaessa, voidaan osoittaa että ensimmäisen kertalun ehdot toteuttava piste on Lagrangen funktion globaali optimi, kun Lagrangen funktiota maksimoidaan ilman rajoitteita ja Lagrangen kertoimet kiinnitetään optimia vastaten. Loppu seuraa kuten toisen kertaluvun ehtojen tapauksessa. □

Yllä oleva tulos on hyvin hyödyllinen, sillä konkaaville tehtävälle ensimmäisen kertaluvun ehdot tuottavat globaalin optimin. Jos siis tehtävä voidaan osoittaa konkaaviksi, ei tarvitse tutkia toisen kertaluvun ehtoja. Tehtävän toteaminen konkaaviksi edellyttää sitä, että kohdefunktion näyttää konkaaviksi ja käyvän joukon konveksiksi. Kohdefunktion Konkaavisuuden tutkiminen tapahtuu usein helpoiten Hessin matriisin definiittisyyttä tarkastelemalla. Käyvän joukon konveksisuus voidaan perustella esimerkiksi, jos havaitaan että se on konveksien joukkojen leikkaus. Rajoittamattomassa tehtävässä käypä joukko on koko $\mathbb{R}^n$, joka on konveksi joukko. Rajoittamaton tehtävä on siis konkaavi, kun kohdefunktio on konkaavi ja tällöin ehto $\nabla f(x) = \mathbf{0}$ antaa tehtävälle globaalin optimin.

Esimerkki 7.3.1. Tarkastellaan tehtävää

$$\begin{aligned}&\max \ \sqrt{x_1} + 2\ln x_2\\ &\text{s.e. } x_1^2 + x_2^2 \le 4,\ x_1, x_2 \ge 0.\end{aligned}$$

Kohdefunktio $f(x_1, x_2)$ on kahden konkaavin funktion $f_1(x_1, x_2) = \sqrt{x_1}$ ja $f_2(x_1, x_2) = 2\ln x_2$ summa. Huomaa, että f_1 ja f_2 ovat konkaaveja nimenomaan muuttujien (x_1, x_2)-suhteen vaikka f_1 ei riipu x_2:sta ja f_2 ei riipu x_1:stä. Esimerkiksi f_1:n Hessin matriisi on

$$D^2 f_1(x_1, x_2) = \begin{pmatrix} -1/(4x_1^{3/2}) & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix}.$$

Tämä matriisi on selvästi negatiivisemidefiniitti (diagonaalimatriisi jossa diagonaalilla ei-positiiviset luvut), kun $x_1 \ge 0$, joten f_1 on konkaavi. Vastaavasti f_2 on konkaavi. Toinen vaihto päätellä funktion f konkaavisuus on laskea sen Hessin matriisi ja tutkia sen definiittisyyttä.

Funktio $g_1(x) = x_1^2 + x_2^2$ on konveksi. Rajoitteen $x_1^2 + x_2^2 \le 4$ toteuttavat pisteet ovat ne, jotka kuuluvat funktion g_1 alatasojoukkoon $L(g_1; 4)$. Tämä on konveksi joukko, koska g_1 on konveksi funktio. Rajoitteet $x_1, x_2 \ge 0$ määrittävät tasoon puoliavaruudet. Puoliavaruudet ovat konvekseja joukkoja. Käypä joukko on siis konveksien joukkojen leikkaus ja siten se on konveksi.

Olemme siis saaneet perusteltua sen, että yllä oleva tehtävä on konkaavi tehtävä. Ensimmäisen kartaluvun ehdot toteuttava piste on siten varmuudella tehtävän globaali optimi. Jääköön optimin löytäminen harjoitustehtäväksi.

Konkaaveille optimointitehtäville pätee myös seuraava ensimmäisen kertaluvun ehto: x^* on optimi jos ja vain jos

$$\nabla f(x^*) \cdot (x - x^*) \le 0 \ \forall x \in X. \tag{7.2}$$

Tätä ehtoa kutsutaan konkaavin optimoinnin variaatioepäyhtälöksi, mutta tällä kurssilla tätä ehtoa ei tulla soveltamaan mihinkään. Itse asiassa konkaaville tehtävälle ehto (7.2) on yhtäpitävä (ekvivalentti) ensimmäisen kertaluvun ehtojen kanssa

Se, että tehtävä on konkaavi ei takaa sitä, että tehtävällä ylipäätään olisi ratkaisu. Konkaavisuudesta ei myöskään seuraa se että ratkaisu olisi yksikäsitteinen. Tehtävän ratkaisujen, eli optimipisteiden joukko $\arg\max_{x\in X} f(x)$ konkaavissa tehtävässä on kuitenkin konveksi joukko. Yksikäsitteisyys on kuitenkin hyvin hyödyllinen ominaisuus, joka usein tarvitaan taloustieteen malleissa. Kun f on aidosti konkaavi niin tehtävän ratkaisu (jos sellainen on) on yksikäsitteinen.

Joskus tarvitaa ominaisuutta, että konkaavisuus periytyy arvofunktiolle. Tarkemmin sanottuna funktio $v(a) = \max_{x\in X(a)} f(x, a)$ on konkaavi kun f on konkaavi (x, a):n suhteen ja

$$X(a) = \{x \in \mathbb{R}^n : g_i(x, a) \le 0,\ i = 1, \ldots, k\},$$

missä g_i ovat konvekseja parin (x, a) suhteen. Huomaa, että siitä, että funktion on konkaavi parin molempien argumenttien suhteen yhdessä, eli (x, a):n suhteen, seuraa, että funktio on konkaavia x:n suhteen kun a on kiinnitetty ja konkaavi a:n suhteen x:n ollessa kiinnitetty. Siitä, että funktio on konkaavi erikseen argumenttiensa suhteen ei seuraa, että funktio olisi konkaavi molempien argumenttien suhteen yhdessä.

7.4 Esimerkkejä konkaaveista ja konvekseista tehtävistä

Tarkastellaan tehtäviä, joissa käypä joukko muodostuu lineaarisista rajoitteista ja kohdefunktio on lineaaris-neliöllinen:

$$\begin{aligned}&\max\ x \cdot Vx + r \cdot x\\ &\text{s.e. } p^i \cdot x \leq b_i,\ i = 1, \ldots, k,\\ &c^i \cdot x = d_i,\ i = 1, \ldots, m.\end{aligned}$$

Huomaa, että tyypilliset ei-negatiivisuusrajoitteet $x_i \geq 0$, ovat lineaarisia rajoitteita. Esim. $x_1 \geq 0$ voidaan kirjoittaa $(1, 0, \ldots, 0) \cdot x \geq 0$.

Lineaarisista rajoitteista määräytyvä käypä joukko on konveksi. Lineaaris-neliöllinen funktio puolestaan on konkaavi, kun V on negatiivisemidefiniitti. Minimointitehtävien tapauksessa vaaditaan V:n positiivisemidefiniittisyys ja tällöin tehtävä on konveksi. Esimerkiksi edellä käsitelty portfoliotehtävä on konveksi tehtävä. Alla pari muuta esimerkkiä.

Esimerkki 7.4.1. Pienimmän neliösumman tehtävät

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|Ax - b\|^2$$

ovat konvekseja.

Lineaariset tehtävät ($V = \mathbf{0}$) ovat konkaaveja sekä konvekseja.

Otetaan seuraavaksi esimerkki lineaarisesta tehtävästä.

Esimerkki 7.4.2. Olkoon allokoitavana n työntekijää n:nään eri tehtävään. Merkitään a_{ij}:llä tehtävän j suorittamiseen kuluvaa aikaa työntekijältä i. Tehtävänä on minimoida kokonaistyöaika

$$\min \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_{ij},$$

missä $0 \leq x_{ij} \leq 1$ ja muuttuja x_{ij} kertoo suorittaako työntekijä i tehtävää j. Spesifioidaan seuraavaksi tehtävän rajoitteet. Vakioidaan työpanos arvoon 1 (vastaten x_{ij}:n ylärajaa). Vaaditaan, että $\sum_i x_{ij} = 1$ kaikilla i, eli jokaisen työntekijän työpanos käytetään. Vaaditaan myös että $\sum_j x_{ij} = 1$ kaikilla j, eli yhden työntekijän panosta vastaava työmäärä käytetään tehtävään j, jolloin se tulee tehtyä. Tehtävällä on optimaalinen ratkaisu, jossa $x_{ij} = 0$ tai $x_{ij} = 1$. Se, miksi tällainen ratkaisu löytyy, johtuu siitä, että lineaarisella tehtävällä ratkaisu löytyy aina jostain käyvän alueen nurkasta, jos ratkaisu ylipäätään on olemassa.

Seuraava esimerkki on yrityksen teoriasta, missä konkaavisuus tyypillinen olettamus.

Esimerkki 7.4.3. Yritys käyttää lopputuotteen valmistamiseen n:ää tuotannontekijää (input). Merkitään x:llä vektoria, jonka komponentteina ovat yrityksen käyttämät määrät kutakin tuotannontekijää. Lopputuotteen määrä riippuu käytettävistä tuotannontekijöistä tuotantofunktion $f : \mathbb{R}^n_+ \mapsto \mathbb{R}_+ = \{y \in \mathbb{R} : y \geq 0\}$ mukaisesti. Oletetaan, että tämä on konkaavi ja kaikkien muuttujien suhteen kasvava tuotantofunktio. Tuotannosta aiheutuu kustannus ja tämä määräytyy kustannusfunktiosta $c : \mathbb{R}^n_+ \mapsto \mathbb{R}$. Tämä funktio oletetaan konveksiksi ja kasvavaksi kaikkien muuttujien suhteen.

Yrityksen voiton maksimointitehtävä on

$$\max_{x \geq \mathbf{0}} pf(x) - c(x),$$

missä $p > 0$ on tuotteen hinta (eksogeeninen).

Tämän tehtävän kohdefunktio on nyt konkaavi edellä tehtyjen olettamusten vallitessa. Lisäksi käypä joukko on konveksi. Tehtävä on siis konkaavi optimointitehtävä.

7.5 Kvasikonkaavit funktiot

Olettamus kohdefunktion konkaavisuudesta on taloustieteellisissä malleissa joskus aivan liian voimakas. Konkaavisuudella on esimerkiksi sellainen ominaisuus, että jos otamme monotonisen (kasvavan) muunnoksen konkaavista funktiosta tulos ei enää ole konkaavi, eli $h(f(x))$ ei ole konkaavi vaikka f olisi ja h olisi kasvava. Ominaisuutta joka säilyy monotonisissa muunnoksissa sanotaan ordinaaliseksi ominaisuudeksi. Erityisesti kuluttajan teoriassa ajatellaan, että kuluttaja osaa laittaa hyödykekorit paremmuus järjestykseen. Jos oletetaan, että tätä järjestystä kuvataan hyötyfunktiolla, niin on luonnollista olettaa, että kulutuskorien järjestys säilyy monotonisissa muunnoksissa hyötyfunktiosta. Hyötyfunktiota ei siis kannata olettaa konkaaviksi, koska (ordinaalisessa) hyötyteoriassa mikä tahansa monotoninen muunnos hyötyfunktiosta on aivan yhtä kelvollinen esitys kuluttajan preferensseille.

Konkaavisuuden sijaan luonteva olettamus, joka on mahdollisimman lähellä konkaavisuutta ja säilyy monotonisissa muunnoksissa, on kvasikonkaavisuus. Yleensä juuri hyötyfunktiot oletetaan teoreettisissa tarkasteluissa kvasikonkaaveiksi.

Määäritelmä 7.5.1. Olkoon $X \subseteq \mathbb{R}^n$ konveksi joukko. Funktio f on kvasikonkaavi, jos

$$f(\lambda x + (1 - \lambda)y) \geq \min\{f(x), f(y)\} \ \forall x, y \in X \text{ ja } \lambda \in [0, 1].$$

Kvasikonkaavisuus voidaan määritellä myös toisin. Edellä oleva määritelmä on yhtäpitävä sen kanssa, että $U(f, \alpha)$ on konveksi joukko kaikilla α. Kvasikonkaavisuuden lisäksi voidaan määritellä aidosti kvasikonkaavit funktiot; f on aidosti kvasikonkaavi, jos

$$f(\lambda x + (1 - \lambda)y) > \min\{f(x), f(y)\}, \ x \neq y, \ \lambda \in (0, 1).$$

Aivan vastaavasti kuten konkaavien ja konveksien funktioiden yhteydessä, jos $-f$ on kvasikonkaavi niin sanotaan, että f on kvasikonveksi.

Kvasikonkaavit ja kvasikonveksit funktiot ovat hyödyllisiä konkaavien ja konveksien tehtävien yhteydessä. Konkaavin tai konveksin tehtävän käyvän joukon on oltava konveksi joukko. Jos käypä joukko määräytyy epäyhtälörajoitteista $g_i(x) \leq a_1$, $i = 1, \dots, m$, niin käypä joukko on koveksi, kun g_i, $i = 1, \dots, m$, ovat kvasikonvekseja. Vastaavasti käypä joukko on konveksi jos rajoitteet ovat muotoa $g_i(x) \geq a_i$ ja funktiot g_i ovat kvasikonkaaveja.

Esimerkki 7.5.1. Oletetaan, että $U(x)$ on kvasikonkaavi. Tällöin tehtävä

$$\begin{aligned} &\min_x \ p \cdot x \\ &\text{s.e. } U(x) \geq u, \ x \geq \mathbf{0}, \end{aligned}$$

on konveksi tehtävä. Käypä joukko on ylätasojoukko funktiolle U ja kohdefunktio on konveksi.

Listataan seuraavaksi kvasikonkaavien funktioiden ominaisuuksia:

1. f differentioituva ja kvasikonkaavi avoimessa joukossa X jos ja vain jos $f(y) \geq f(x) \Rightarrow \nabla f(x) \cdot (y - x) \geq 0$
2. jos $y \cdot \nabla f(x) = 0 \Rightarrow y \cdot D^2 f(x) y \leq 0$ kaikilla $x, y \in X$, niin f on kvasikonkaavi (aidosti kvasikonkaaville funktiolle edellä "< 0")

Periatteessa yllä olevista tuloksista seuraa, että kvasikonkaavisuutta voi tutkia tarkastelemalla renustettua Hessin matriisia

$$\begin{pmatrix} 0 & \nabla f(x)^\top \\ \nabla f(x) & D^2 f(x) \end{pmatrix}.$$

Jos tämän matriisin $(n - 1)$ viimeistä johtavaa pääminoria vaihtavat merkkiä siten, että pienin on merkiltään positiivinen, niin tällöin f on kvasikonkaavi.

Esimerkki 7.5.2. Cobb-Douglas funktion $U(x, y) = x^a y^b$ reunustettu Hessin matriisi on

$$\begin{pmatrix} 0 & ax^{a-1}y^b & bx^a y^{b-1} \\ ax^{a-1}y^b & a(a-1)x^{a-2}y^b & abx^{a-1}y^{b-1} \\ bx^a y^{b-1} & abx^{a-1}y^{b-1} & b(b-1)x^a y^{b-2} \end{pmatrix}.$$

Tämän viimeinen pääminori $(n - 1 = 2 - 1 = 1)$ on matriisin determinantti

$$(ab + ab^2 + a^2 b) x^{3a-2} y^{3b-2} > 0,$$

kun $x, y, a, b > 0$, joten f on kvasikonkaavi.

Otetaan vielä pari esimerkkiä kvasikonkaaveista funktioista.

Esimerkki 7.5.3. CES (*constant elasticity of substitution*) hyötyfunktiot

$$U(x) = \left[\sum_i (\alpha_i x_i^r) \right]^{1/r},$$

ovat kvasikonkaaveja, kun $x \geq \mathbf{0}$, $\alpha_i > 0$, $i = 1, \ldots, n$, $r \leq 1$.

Sisäinen korkokanta (*internal rate of return*) on konkaavi funktio. Olkoon $x = (x_1, \ldots, x_n)$ kassavirrat periodeilta $1, \ldots, n$. Kassavirran x sisäinen korkokanta on $IRR(x) = \min_{x \in X} r$, missä

$$X = \left\{ x \in \mathbb{R}^n : r \geq 0, \ \sum_{k=0}^{n} (1+r)^{-k} x_k = 0 \right\}.$$

Kyseessä se korko, jolla investoinnin nettonykyarvo on nolla. Osoittautuu, että IRR on kvasikonkaavi joukossa

$$S = \left\{ x \in \mathbb{R}^n : x_0 < 0, \ \sum_{k=0}^{n} x_k > 0 \right\}.$$

7.5.1 Kvasikonkaavisuus ja muunnokset

Kuten jo tuli todettua edellä: monotoninen muunnos kvasikonkaavista funktiosta on kvasikonkaavi. Matemaattisesti ilmaistuna $f(x) = h(g(x))$ on kvasikonkaavi, kun $g : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}$ on kvasikonkaavi ja $h : \mathbb{R} \mapsto \mathbb{R}$ on kasvava. Erityisesti, jos funktio on monotoninen muunnos konkaavista funktiosta se on kvasikonkaavi. Lisäksi pätee myös, että jos monotoninen muunnos funktiosta on konkaavi, niin alkuperäinen funktio on kvasikonkaavi. Matemaattisesti: jos $h(f(x))$ on konkaavi ja h on kasvava funktio, tällöin f on kvasikonkaavi. Tärkeä erikoistapaus muunnoksesta h, joka toimii useissa taloustieteen sovelluksissa, on $h = \ln$. Funktioita, jotka saadaan muunnettua konkaaveiski logaritmimuunnoksella, sanotaan log-konkaaveiksi.

Esimerkki 7.5.4. Cobb-Douglas hyötyfunktiot $U(x) = x_1^{\alpha_1} \cdots x_n^{\alpha_n}$, kun $x \gg \mathbf{0}$ kaikilla $\alpha_i > 0$, $i = 1, \ldots, n$, ovat log-konkaaveja. Funktion logaritmimuunnos on

$$\alpha_1 \ln(x_1) + \alpha_2 \ln(x_2) + \ldots + \alpha_n \ln(x_n).$$

Tämä on konkaavi funktio koska logaritmifunktio on konkaavi. Näin ollen Cobb-Douglas funktio on log-konkaavi ja siten erityisesti kvasikonkaavi. Toisia derivaattoja tutkimalla selviää, että Cobb-Douglas funktiot ovat konkaaveja kun $\sum_i \alpha_i < 1$.

Optimointitehtävä, jossa kohdefunktio on log-konkaavi, voidaan ratkaista maksimoimalla $\ln(f(x))$ alkuperäisen kohdefunktion sijaan. Joskus, esimerkiksi Cobb-Douglas funktioille, tämä voi helpottaa tehtävän ratkaisemista.

Listataan vielä muita operaatiota, jotka säilyttävät kvasikonkaavisuuden:

1. minimi kvasikonkaavista funktiosta tuottaa minimoinnissa eksogeenisen parametrin suhteen kvasikonkaavin funktion: $g(x) = \min_y f(x, y)$ (f kvasikonkaavi x:n suhteen),
2. yhdistetty funktio $f(x) = h(Ax+b)$ on kvasikonkaavi, kun h on kvasikonkaavi (tässä $x \in \mathbb{R}^n$ ja $Ax + b \in \mathbb{R}^m$)
3. $f(x) = h(g(x))$ on kvasikonkaavi, kun $g = (g_1, \ldots, g_m) : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}^m$, $h : \mathbb{R}^m \mapsto \mathbb{R}$, ja
   (a) $m = 1$: h on kasvava ja g on kvasikonkaavi
   (b) kun h kvasikonkaavi ja $g(x) = Ax + b$.

7.5.2 Kvasikonkaavi optimointi

Tehtävä $\max_{x \in X} f(x)$ on kvasikonkaavi jos f on kvasikonkaavi ja X on konveksi joukko. Huomaa, että jos X määräytyy epäyhtälörajoitteista $g_i(x) \leq 0$, $i = 1, \ldots, k$, niin X on konveksi joukko silloin, kun funktiot g_i, $i = 1, \ldots, k$, ovat kvasikonvekseja.

Kvasikonkaaveilla tehtävillä on joitakin samoja ominaisuuksia kuin konkaaveilla tehtävillä. Kirjataan kuitenkin aluksi tärkeimmät erot:

1. kvasikonkaavilla tehtävällä voi olla lokaaleja optimeita, jotka eivät ole globaalisti optimaalisia,
2. pisteet, joissa gradientti häviää eivät välttämättä ole globaaleja optimeja.

Yllä olevat havainnot tarkoittavat sitä, että kvasikonkaavit optimointitehtävät eivät ole aivan yhtä hyvin käyttäytyviä kuin konveksit. Sekä mikä on samanlaista konkaaveissa ja kvasikonkaaveissa tehtävissä on, että molemmissa tehtävän globaalien optimien joukko on konveksi (voi olla tyhjä).

Listataan seuraavaksi optimaalisuustuloksia kvasikonkkaaveille tehtäville:

1. piste x on globaali maksimi, kun tehtävän kohdefunktio f on kvasikonkaavi ja $\nabla f(x) \cdot (y - x) < 0$ kaikilla $y \in X$, $y \neq x$, (X konveksi joukko),
2. jos f on aidosti kvasikonkaavi ja tehtävällä on ratkaisu niin se on yksikäsitteinen,
3. jos tiedetään, että $\nabla f(x) \neq \mathbf{0}$ käyvillä x, niin kvasikonkaavisuus takaa optimaalisuuden ensimmäisen kertaluvun ehdot toteuttavalle pisteelle .

Otetaan loppuun vielä pari esimerkkiä kvasikonkaaveista tehtävistä.

Esimerkki 7.5.5. Olkoon kohdefunktio $f(x) = x_1 x_2 x_3$, joka on kvasikonkaavi (itse asiassa log-konkaavi). Käypä joukko määräytyy rajoitteesta $x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 \leq 3$. Koska funktio $x_1^2 + x_2^2 + x_3^2$ on konveksi, käypä joukko on konveksi. Huom. konveksien (ja kvasikonveksien) funktioiden alatasojoukot ovat konvekseja. Käypä joukko on nyt tällainen alatasojoukko.

Optimissa $x = (1, 1, 1)$ ja kohdefunktion gradientti on tällöin $(1, 1, 1)$. Huomaa, että $\nabla f(\mathbf{0}) = \mathbf{0}$, piste $x = \mathbf{0}$ on kuitenkin minimi. Tämä on konkreettinen esimerkki siitä, että kvasikonkaaveille tehtäville ensimmäisen kertaluvun ehdot eivät ole riittävät (valitettavasti). Voimme havaita geometrian perusteella, että ehto $\nabla f(x) \cdot (y - x) < 0$ toteutuu, kun $y_1^2 + y_2^2 + y_3^3 \leq 3$. Tällöin edellä saatu x on globaali maksimi, eikä esimerkiksi toisen kertaluvun ehtoja tarvitse tutkia.

Esimerkki 7.5.6. Tarkastellaan jälleen kuluttajan tehtävää $\max_{x \in X} U(x)$, missä käypä joukko on

$$X = \{x \in \mathbb{R}^n : p \cdot x \leq I,\ x \geq \mathbf{0}\},$$

ja eksogeeniset muuttujat ovat: p on hintavektori ($p_i > 0\ \forall i$), ja I, joka on kuluttajan varallisuus. Käypä joukko on konveksi, koska rajoitteet ovat lineaarisia.

Jos hyötyfunktio on aidosti kvasikonkaavi, kasvava ja tehtävällä on ratkaisu, niin se on yksikäsitteinen ja globaalisti optimaalinen. Tehtävän ratkaisu on (Marshallin) kysyntäfunktio $\xi(p, I)$. Kun U on kasvava kaikkien argumenttiensa suhteen, niin $\xi_i(p, I) > 0$ kaikilla i.

Luku 8

Liite: Täydentävää materiaalia

8.1 Usean muuttujan funktion derivointi

Lineaarinen funktio $f : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}^m$ voidaan esittää muodossa $f(x) = (f_1(x), \ldots, f_m(x)) = Ax$, missä A on $m \times n$ matriisi, eli

$$\begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{m1} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}.$$

Jos tarkastelemme miten vektorin $y = (y_1, \ldots, y_m) = Ax$ komponentit muuttuvat, kun muutamme x:n komponenttia x_j määrän Δx_j ja pidämme muut vektorin x komponentit vakioina, havaitsemme, että y_i:n muutos on $a_{ij}\Delta x_j$. Tämä voidaan ilmaista myös siten että, $\Delta y_i/\Delta x_j = a_{ij}$. Lisäksi voimme havaita, että y_i:n muutos jaettuna x_j:n muutoksella ei riipu siitä mikä on tarkasteltava piste x, eikä siitä miten suuri tai pieni Δx_j on. Antamalla Δx_j:n olla mielivaltaisen pieni voimme päätellä, että $dy_i/dx_j = a_{ij}$. Osaamme siis periaatteessa derivoida lineaarisia monen muuttujan funktioita. Valitettavasti lineaariset mallit eivät ole läheskään aina soveliaita kuvaamaan taloudellisia tilanteita. Esimerkiksi niiden avulla ei voi kuvata laskevia rajatuotoja, ne voivat johtaa optimointitehtäviin, joilla ei ole ratkaisua, ja lisäksi lineaaristen optimointitehtävien ratkaisut eivät ole eksogeenisten parametrien suhteen jatkuvia.

Tarkastellaan seuraavaksi epälineaaristen funktioiden derivointia. Sellainen tarkastelu, jossa epälineaariselle mallille muodostetaan lineaarinen approksimaatio, jonkin kiinnostavan pisteen ympäristössä, on hyvin yleistä. Tämä johtuu siitä, että epälineaarisille malleille (yhtälöryhmille, optimoinititehtäville, tasapaino-onglemille) on vaikea löytää analyyttisiä ratkaisuja. Linearisoituja malleja puolestaan on helppo muodostaa ja analysoida.

Keskeinen sovellus differentiaalilaskennalle on herkkyysanalyysi, jossa tarkastellaan sitä miten jonkin mallin tulokset muuttuvat, kun mallin eksogeenisia parametreja muutetaan.

Kun muutokset ovat "pieniä", poikkeamat linearisoidusta mallista ovat pieniä. Analogiana: maapallo on pyöreä, mutta arkiaskareissa voidaan olettaa lineaarinen koordinaatisto.

8.1.1 Osittaisderivaatat ja gradientti

Tarkastellaan funktiota $f(x_1, x_2, \ldots, x_n) \in \mathbb{R}$. Oletetaan, että vain x_i:n arvot voivat muuttua muiden muuttujien x_j pysyessä vakioina. Tutkitaan miten funktion f arvot muuttuvat pisteessä $\hat{x} = (\hat{x}_1, \ldots, \hat{x}_n)$, kun komponenttia i muutetaan. Derivoidaan siis x_i:n suhteen:

$$\frac{\partial f(\hat{x})}{\partial x_i} = \lim_{h \to 0} \frac{f(\hat{x}_1, \ldots, \hat{x}_{i-1}, \hat{x}_i + h, \hat{x}_{i+1}, \ldots, \hat{x}_n) - f(\hat{x})}{h}.$$

Tämä on f:n osittaisderivaatta x_i:n suhteen pisteessä $\hat{x}$ olettaen, että raja-arvo on olemassa (riippumaton siitä miten h lähestyy nollaa). Huomaa, että osittaisderivaattaa koskee samat laskusäännöt kuin tavanomaista derivointia.

Esimerkki 8.1.1. Lasketaan funktion $f(x) = x_1 \ln x_2 + \sqrt{x_2 x_3}$ osittaisderivaatat pisteessä $\hat{x} = (1, 2, 1)$:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial f(\hat{x})}{\partial x_1} &= \ln(\hat{x}_2) = \ln(2) \\
\frac{\partial f(\hat{x})}{\partial x_2} &= \frac{\hat{x}_1}{\hat{x}_2} + \frac{1}{2}\hat{x}_2^{-1/2}\hat{x}_3^{1/2} = \frac{1}{2} + \frac{1}{2\sqrt{2}} \\
\frac{\partial f(\hat{x})}{\partial x_3} &= \frac{1}{2}\hat{x}_2^{1/2}\hat{x}_3^{-1/2} = \frac{\sqrt{2}}{2}.
\end{aligned}$$

Funktion osittaisderivaatat riippuvat luonnollisesti siitä missä pisteessä ne lasketaan, eli ne riippuvat $\hat{x}$:stä. Mikäli osittaisderivaatat ovat jatkuvia funktioita $\hat{x}$:stä sanotaan, että f on jatkuvasti differentioituva.

Pohditaan hetki miten tulisi määritellä derivaatta silloin, kun x:n komponenttien annetaan samanaikaisesti muuttua. Valitettavasti osittaisderivaatan määritelmä ei suoraan yleisty tähän tapaukseen, eli emme voi määritellä derivaattaa raja-arvona

$$\lim_{\Delta x \to \mathbf{0}} \frac{f(\hat{x} + \Delta x) - f(\hat{x})}{\Delta x}.$$

Huomaa, että yllä oleva lauseke on hölynpölyä, koska vektorin $f(\hat{x} + \Delta x) - f(\hat{x}) \in \mathbb{R}^m$ jakamista vektorilla $\Delta x \in \mathbb{R}^n$ ei ole määritelty. Ainoa järkevä tapa lähestyä usean muuttujan funtkion derivointia on ajatella derivaatta funktion lineaarisena approksimaationa.

Funktion $f : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}$ derivaatan pisteen $\hat{x}$ ympäristössä pitäisi olla lineaarinen funktio, joka esittää approksimaatiota sille miten funktion arvot muuttuvat kun annetaan x:n muuttua. Toisin sanottuna derivaatan tulisi olla lineaarikuvaus tällaisilta muutoksilta funktion arvojen muutoksiksi. Sanomme, että f:llä on derivaatta pisteessä $\hat{x}$, jos löytyy lineaarinen funktio (eli matriisi) $Df(\hat{x})$ siten, että kaikilla "pienillä"muutoksilla $\Delta x \in \mathbb{R}^n$ pätee

$$f(\hat{x} + \Delta x) = Df(\hat{x})\Delta x.$$

Koska f on reaaliarvoinen ja Δx on $\mathbb{R}^n$:nnän vektori on matriisin $Df(\hat{x})$ oltava $1 \times n$ matriisi, eli rivivektori. Voidaan osoittaa, että

$$Df(\hat{x}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f(\hat{x})}{\partial x_1} & \frac{\partial f(\hat{x})}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f(\hat{x})}{\partial x_n} \end{pmatrix}.$$

Usein on järkevää ajatella, että funktion osittaisderivatoista muodostuva vektori on $\mathbb{R}^n$:nnän vektori, eli pystyvektori. Tätä vektoria kutsutaan f:n gradientiksi pisteessä $\hat{x}$ ja merkitään

$$\nabla f(\hat{x}) = Df(\hat{x})^\top = \begin{pmatrix} \frac{\partial f(\hat{x})}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f(\hat{x})}{\partial x_2} \\ \vdots \\ \frac{\partial f(\hat{x})}{\partial x_n} \end{pmatrix}.$$

Gradienttimerkinnällä funktion muutoksen approksimaatio pisteessä $\hat{x}$ on

$$f(\hat{x} + \Delta x) = f(\hat{x}) + \nabla f(\hat{x})^\top \Delta x.$$

Edellä olleessa esimerkissä

$$\nabla f(\hat{x}) = \begin{pmatrix} \ln(2) \\ \frac{1}{2} + \frac{1}{2\sqrt{2}} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix}.$$

Gradienttivektori voidaan tulkita funktion nopeimman kasvun suuntana, eli jos tarkastelemme mihin suuntaan d, $\|d\| = 1$, lauseke

$$\lim_{\lambda \to 0, \lambda > 0} \frac{f(\hat{x} + \lambda d) - f(\hat{x})}{\lambda}$$

maksimoittuu, niin vastaus on $d = \nabla f(\hat{x}) / \|\nabla f(\hat{x})\|$. Tämä voidaan päätellä tutkimalla f:n muutoksen approksimaatiota

$$f(\hat{x} + \Delta x) - f(\hat{x}) \approx \nabla f(\hat{x}) \cdot \Delta x.$$

Lukion matematiikasta muistamme, että kahden vektorin välinen pistetulo on suurimmillaan kun vektorit ovat samansuuntaisia, eli termi $\nabla f(\hat{x}) \cdot \Delta x$ maksimoituu kun Δx on saman suuntainen kuin $\nabla f(\hat{x})$. Gradientin tulkinta nopeimman kasvun suuntana on optimoinnin kannalta hyödyllinen.

Oletimme, että pienillä x:n muutoksilla funktiolle on lineaarinen approksimaation $\hat{x}$:ssä. Seuraavassa luvussa asiaa tarkastellaan muodollisemmin ja määritellään tarkemmin mitä tarkoitetaan approksimaatiolla ja pienillä muutoksilla.

8.1.2 Yleinen tapaus ja Jacobin matriisi

Tarkastellaan nyt tapausta $f : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}^m$. Edellä esitetty määritelmä tapaukselle $m = 1$ yleistyy varsin suoraviivaisesti. Keskeinen idea on jälleen se, että haluamme muodostaa lineaarisen approksimaation funktiolle. Funktion muutoksen $f(\hat{x}+\Delta x)-f(\hat{x})$ luonteva lineaarinen approksimaatio on muotoa $Df(\hat{x})\Delta x$. Tällöin $Df(\hat{x})$ tulee olla lineaarikuvaus $\mathbb{R}^n$:ltä avaruudelle $\mathbb{R}^m$, eli $m \times n$ matriisi. Tätä matriisia kutsutaan funktion Jacobin matriisiksi pisteessä $\hat{x}$. Määritellään nyt tarkasti mitä tarkoitamme Jacobin matriisilla tai derivaatalla.

Määäritelmä 8.1.1. Funktio $f : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}^m$ on differentioituva pisteessä $\hat{x}$ jos löytyy lineaarikuvaus $Df(\hat{x})$ siten, että

$$\lim_{\Delta x \to \mathbf{0}} \frac{\|f(\hat{x}+\Delta x)-f(\hat{x})-Df(\hat{x})\Delta x\|}{\|\Delta x\|} = 0.$$

Yllä olevassa määritelmässä se, että Δx lähestyy nollaa tarkoittaa sitä, että kaikkien vektorin Δx komponenttien annetaan mennä kohti nollaa. Lisäksi komponentit saavat mennä nollaan mielivaltaisella tavalla. Esimerkiksi funktio $|x|$ ei ole derivoituva pisteessä $\hat{x}=0$. Jos valitaan $Df(0)=1$ ja tarkastellaan mitä tapahtuu, kun $\Delta x > 0$ menee nollaan havaitaan, että yllä olevan lausekkeen raja-arvo on nolla. Jos taas valitaan $Df(0)=-1$ ja oletetaan, että $\Delta x < 0$, niin jälleen raja-arvo on nolla. Tässä tapauksessa ei siis ole derivaattaa koska riippuen siitä miten nollaa lähestytään erotusosaamäärällä on eri raja-arvot.

Derivaatta voidaan tulkita approksimaationa, eli pisteen $\hat{x}$ lähellä $f(\hat{x}+\Delta x) \approx f(\hat{x}) + Df(\hat{x})\Delta x$. Joskus käytetään merkintää $f(\hat{x}+\Delta x) = f(\hat{x}) + Df(\hat{x})\Delta x + o(\|\Delta x\|)$, missä $o(\|\Delta x\|)$ on approksimaation virhetermi, jolle pätee $\|o(\|\Delta x\|)\|/\|\Delta x\| \to 0$, kun $\Delta x \to 0$.

Esimerkki 8.1.2. Olkoon $f(x) = Ax$, eli kyseessä on lineaarinen funktio. Jos lineaariselle funktiolle halutaan muodostaa lineaarinen approksimaatio, voimme olettaa, että tällöin $Df(x) = A$. Voit tarkistaa suoraan määritelmästä, että A toteuttaa derivaatan (Jacobin matriisin) määritelmän.

Käytännössä derivaatta tai Jacobin matriisi saadaan laskettua funktion osittaisderivaatoilla. Olkoon funktion f komponenttifunktiot $f_1, \ldots, f_m$, eli $f(x) = (f_1(x), \ldots, f_m(x))$. Voidaan osoittaa, että

$$Df(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1(\hat{x})}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1(\hat{x})}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_1(\hat{x})}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_2(\hat{x})}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2(\hat{x})}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_2(\hat{x})}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial f_m(\hat{x})}{\partial x_1} & \frac{\partial f_m(\hat{x})}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_m(\hat{x})}{\partial x_n} \end{pmatrix}.$$

Esimerkki 8.1.3. Olkoon funktion $f : \mathbb{R}^3 \mapsto \mathbb{R}^2$ komponettifunktiot $f_1(x,y,z) = x^2y + yz$ ja $f_2(x,y,z) = (y-z)/x$. Tällöin

$$Df(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1(x,y,x)}{\partial x} & \frac{\partial f_1(x,y,x)}{\partial y} & \frac{\partial f_1(x,y,x)}{\partial z} \\ \frac{\partial f_2(x,y,x)}{\partial x} & \frac{\partial f_2(x,y,x)}{\partial y} & \frac{\partial f_2(x,y,x)}{\partial z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2xy & x^2+z & y \\ -\frac{1}{x^2}(y-z) & \frac{1}{x} & -\frac{1}{x} \end{pmatrix}.$$

8.1.3 Hessin matriisi

Toisinaan halutaan muodostaa funktiolle $f : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}$ toisen asteen approksimaatio. Tämä tarkoittaa sitä, että funktion gradientti ajatellaan differentioituvana kuvauksena $\nabla f : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}^n$ ja sitä derivoidaan, eli se linearisoidaan. Funktion gradienttikuvauksen ollessa differentioituva sanotaan, että funktio on kahdesti differentioituva (pisteessä $\hat{x}$). Gradienttikuvauksen Jacobin matriisia puolestaan kutsutaan funktion Hessin matriisiksi ja sitää merkitään tällä kurssilla matriisilla $D^2 f(\hat{x})$. Hessin matriisille muodostettavalle approksimaatiolle pätee

$$f(\hat{x} + \Delta x) = f(\hat{x}) + \nabla f(\hat{x})\Delta x + \frac{1}{2}\Delta x^\top D^2 f(\hat{x})\Delta x + o(\|\Delta x\|^2),$$

missä virhetermille pätee $o(\|\Delta x\|^2)/\|\Delta x\|^2 \to 0$ kun $\Delta x \to \mathbf{0}$.

Esimerkki 8.1.4. Tarkastellaan funktiota $f(x) = x^\top A x$, missä A on $n \times n$ matriisi. Kyseessä on siis neliömuoto. Tämän funktion gradientti on

$$\nabla f(x) = Ax + A^\top x.$$

Jätettäköön tämän osoittaminen harjoitustehtäväksi. Hessin matriisi saadaan kun muodostetaan kuvaukselle $\nabla f(x)$ Jacobin matriisi, joten $D^2 f(x) = A + A^\top$. Huomaa, että jos A on symmetrinen, eli $A = A^\top$, niin silloin $D^2 f(x) = 2A$.

Edellä olevassa esimerkissä saatava Hessin matriisi on symmetrinen. Näin käy lähes kaikissa käytännön sovelluksissa. Nimittäin voidaan osoittaa, että jos toiset derivaatat ovat jatkuvia (eli funktio on kahdesti jatkuvasti differentioituva), niin silloin Hessin matriisi on symmetrinen.

8.1.4 Ketjusääntö

Tarkstellaan seuraavaksi yhdistetyn funktion derivointia monenmuuttujan tapauksessa. Otetaan yksinkertainen tapaus: kahden muuttujan funktio $f(x, y)$ ja oletetaan, että x ja y ovat muuttujan t funktioita. Mikä on nyt f:n muutos kun t muuttuu vähän? Muuttuja t vaikuttaa f:ään x:n ja y:n kautta, eli t:n muutos heijastuu näiden muuttujien muutoksena. Lisäksi $z = f(x, y)$ muuttuu kun x ja y muuttuvat ja näiden muuttujien vaikutukset voivat olla erilaiset. Jos vain x ja y muuttuisivat niin ensimmäisen kertaluvun approksimaation mukaan $\Delta z = (\partial f/\partial x)\Delta x + (\partial f/\partial y)\Delta y$. Tässä Δx ja Δy riippuvat t:n muutoksesta Δt. Jälleen ensimmäisen kertaluvun approksimaation perusteella $\Delta x = x'(t)\Delta t$ ja $\Delta y = y'(t)\Delta t$, eli $\Delta z = (\partial f/\partial x)x'(t)\Delta t + (\partial f/\partial y)y'(t)\Delta t$. Entä jos z olisi ollut useampi ulotteinen? Tällöin sama päättely olisi voitu tehtdä z:n (tai f:n) eri komponenteille. Entä jos t olisikn ollut useampi ulotteinen?

Edellä kuvattu tulos päteee yleisesti seuraavassa muodossa.

Lause 8.1.1. *Oletetaan, että $f : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}^m$ on differentioituva pisteessä x^0 ja $g : \mathbb{R}^k \mapsto \mathbb{R}^n$ on differentioituva pisteessä y^0 ja $y^0 = f(x^0)$. Tällöin funktion $F(x) = g(f(x))$:n derivaatta (x:n suhteen) pisteessä x^0 on $DF(x^0) = Dg(y^0)Df(x^0)$.*

Huomaa, että yllä oleva tulos kertoo, että yhdistetyn funktion derivaatta saadaan ulko- ja sisäfunktioiden (eli g:n ja f:n) Jacobin matriisien tulona.

Esimerkki 8.1.5. Olkoon $g(x, y) = x^3 + 2xy$ ja $f(t) = (t, t^2)$. Tällöin

$$Dg(x, y) = \begin{pmatrix} 3x^2 + 2y & 2x \end{pmatrix}$$

ja

$$Df(t) = \begin{pmatrix} 1 \\ 2t \end{pmatrix}.$$

Yhdistetyn funktion $g(f(t))$ derivaatta on

$$Dg(f(t)) = \begin{pmatrix} 3(t)^2 + 2(t^2) & 2(t) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 2t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5t^2 & 2t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 2t \end{pmatrix} = 9t^2.$$

Huomaa, että x:n paikalle tulee sijoittaa t ja y:n paikalle t^2.

Esimerkki 8.1.6. Olkoon $g(u, v) = (u + v, u^2, uv)$ ja $f(x, y) = (x^2 + y^2, xy)$. Lasketaan ensin funktioiden Jacobin matriisit:

$$Dg(u, v) = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 2u & 0 \\ v & u \end{pmatrix}$$

ja

$$Df(x, y) = \begin{pmatrix} 2x & 2y \\ y & x \end{pmatrix}.$$

Lasketaan seuraavaksi yhdistetyn funktion $g(f)$ Jacobin matriisi:

$$Dg(f(x, y)) = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 2(x^2 + y^2) & 0 \\ (xy) & (x^2 + y^2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2x & 2y \\ y & x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2x + y & 2y + x \\ 4x(x^2 + y^2) & 4y(x^2 + y^2) \\ 3x^2 y + y^3 & 3xy^2 + x^3 \end{pmatrix}.$$

8.2 Implisiittifunktiolause

On hyvin tyypillistä, että mallissa on sekä eksogeenisia, että endogeenisia muuttujia. Tällöin endogeeniset muuttujat tulevat riippumaan eksogeenisista muuttujista. Esimerkiksi optimointitehtävässä osa muttujista voi olla eksogeenisia, jolloin optimiratkaisu riippuu näistä muuttujista. Same koskee myös tasapainomalleja, joissa on tyypillisesti yhtälöryhmä endogeenisille muuttujille, jonka ratkaisu riippuu eksogeenisista muuttujista.

Tässä luvussa tarkastelemme yhtälöryhmiä, jossa on n yhtälöä, n endogeenista muuttujaa (tuntematonta) ja m eksogeenista muuttujaa (parametreja). Tällainen yhtälöryhmä voidaan esittää muodossa

$$f(x, y) = \mathbf{0},$$

missä $x \in \mathbb{R}^m$ ja $y \in \mathbb{R}^n$ ja $f : \mathbb{R}^{m+n} \mapsto \mathbb{R}^n$. Keskeinen kysymys, johon implisiittifunktiolause vastaa on se milloin yhtälöryhmälle löytyy sellainen ratkaisu, jossa y voidaan esittää eksogeenisten funktioiden avulla. Toinen kysymys, johon implisiittifunktiolause vastaa on, että mikä on y:n derivaatta (tai Jacobin matriisi) x:n suhteen. Tämän derivaatan hakeminen on tarpeellista, kun tehdään mallille herkkyysanalyysiä (*comparatve statics*), eli haetaan sitä miten y muuttuu eksogeenisten muuttujien muuttuessa.

8.2.1 Yhden muuttujan tapaus

Aloitetaan kaikkein yksinkertaisimmasta tapauksesta, missä tarkasteltavana on lineaarinen yhtälö ja $n = m = 1$:

$$bx + ay = 0.$$

Jos y on nyt endogeeninen muuttuja, niin voimme ratkaista y:n muuttujan x suhteen, eli funktion $y(x)$. Tällöin voimme olla kiinnostuneita siitä kuinka ratkaisuna saatu y muuttuu, kun parametria x muutetaan. Toisin sanottuna haluamme tietää mitä on $y'(x)$. Tässä esimerkissä saamme ratkaisun, eli funktion $y(x)$ eksplisiittisesti, eli suljetussa muodossa x:n suhteen: $y(x) = -bx/a$, kun $a \neq 0$.

Merkitään x:n muutosta Δx:llä ja y:n muutosta Δy:llä. Nyt Δx:n suuruinen muutos eksogeenisessa muttujassa aiheuttaa muutoksen $\Delta y = -b\Delta x/a$ suuruisen muutoksen endogeenisessa muuttujassa, eli

$$\frac{\Delta y}{\Delta x} = -\frac{b}{a}.$$

Kun Δx on pieni (infinitesimaalinen) saamme

$$\frac{dy}{dx} = -\frac{b}{a}.$$

Jos merkitsemme edellä olleen yhtälön vasenta puolta funktiolla $f(x, y)$, niin havaitsemme, että

$$\frac{dy}{dx} = -\frac{\frac{\partial f}{\partial x}}{\frac{\partial f}{\partial y}}.$$

Osoittautuu, että tämä tulos saadaan myös silloin, kun f on epälineaarinen, eikä funktiota $y(x)$ voida eksplisiittisesti lausua. Tulos yleistyy myös useamman muuttujan epälineaarisiin yhtälöryhmiin ja sitä kutsutaan implisiittifunktiolauseeksi. Nimitys tulee, siitä, että y määräytyy implisiittisesti x:n funktiona ja tämän funktion derivaatta voidaan lausua tuntematta y:n eksplisiittistä lauseketta.

Esimerkki 8.2.1. Tarkastellaan toista esimerkkiä, jossa $n = m = 1$ ja jossa yhtälönä on

$$f(y, x) = xy + \ln(xy + x) = 0.$$

Voimme havaita, että piste $(\hat{x}, \hat{y}) = (1, 0)$ toteuttaa yhtälön. Oletetaan, että pisteen $x = 1$ ympäristössä jokaista x:ää vastaa yksikäsitteinen $y(x)$ siten, että $y(1) = 0$ ja $f(y(x), x) = 0$. Oletetaan lisäksi, että y on derivoituva.

Sijoittamalla y:n lauseke f:ään saamme pisteen $x = 1$ ympäristössä

$$g(x) = f(x, y(x)) = xy(x) + \ln(xy(x) + x) = 0,$$

eli alkuperäinen yhtälö on supistunut pelkästään x:stä riippuvaksi yhtälöksi. Koska oletimme, että pari $(x, y(x))$ toteuttaa yhtälön, täytyy myös yhtälön vasemman puolen (kokonais)derivaatan x:n suhteen olla nolla, eli $g'(x) = 0$.

Lasketaan nyt mitä on $g'(x)$ yhdistetyn funktion ketjusäännöllä:

$$\begin{aligned} g'(x) &= \frac{\partial f(x,y)}{\partial y} y'(x) + \frac{\partial f(x,y)}{\partial x} \\ &= \left(x + \frac{x}{xy+x} \right) y'(x) + y(x) + \frac{y+1}{xy+x}. \end{aligned}$$

Asettamalla edellä saatu derivaatta nollaksi pistessä $(x, y(x)) = (1, 0)$ saamme yhtälön, josta voimme ratkaista derivaatan $y'(1)$:

$$y'(1) = -\frac{\frac{\partial f(1,0)}{\partial x}}{\frac{\partial f(1,0)}{\partial y}} = -\frac{1}{2}.$$

Huomaa, että tämä tulos pätee, kun $\partial f(1,0)/\partial y \neq 0$.

Edellä olevassa esimerkissä käytettiin ketjusääntöä johdettaessa lauseke $y'(x)$:lle olettaen että lötyy derivoituva funktio y siten, että $f(x, y(x)) = 0$ pisteen $(\hat{x}, \hat{y})$ ympäristössä. Seuraava tulos kertoo, että tällainen funktio todella on olemassa. Tulos on implisiittifunktioteoreema tapaukselle $n = m = 1$.

Lause 8.2.1. *Olkoon $f(x, y)$ jatkuvasti differentioituva pisteen $(\hat{x}, \hat{y})$ ympäristössä $N_\varepsilon(\hat{x}, \hat{y})$, jollakin $\varepsilon > 0$, ja $f(\hat{x}, \hat{y})) = 0$. Jos $\partial f(\hat{x}, \hat{y})/\partial y \neq 0$, niin tällöin löytyy $\delta > 0$ ja jatkuvasti differentioituva funktio $y : N_\delta(\hat{x} \mapsto \mathbb{R}$ siten, että*

1. $f(x, y(x)) = 0$,
2. $y(\hat{x}) = \hat{y}$,
3. $\frac{dy(\hat{x})}{dx} = -\frac{\frac{\partial f(\hat{x},\hat{y})}{\partial x}}{\frac{\partial f(\hat{x},\hat{y})}{\partial y}}$.

Yllä oleva tulos on merkittävä, sillä ei ole mitenkään selvää, että endogeeniset muuttujat voidaan ratkaista yksikäsitteisesti eksogeenisten suhteen jostakin annetusta yhtälöstä ja vieläpä niin, että ratkaisu on differentioituva funktio. Oleellisinta on kuitenkin se, että jos halutaan tietää tämän funktion muutoksen eksogeenisen muuttujan suhteen, niin emme lainkaan tarvitse kyseistä funktiota vaan derivaatta saadaan f:n osittaisderivaattojen avulla. Yllä olevan lauseen kolmas kohta voidaan lausua myös differentiaalien avulla:

$$dy = -\frac{\frac{\partial f(\hat{x},\hat{y})}{\partial x}}{\frac{\partial f(\hat{x},\hat{y})}{\partial y}} dx.$$

8.2.2 Yleinen tapaus

Lineaarialgebrassa opimme, että jos $f(x, y) = A(y - \hat{y}) + B(x - \hat{x})$, missä $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $y \in \mathbb{R}^n$, $B \in \mathbb{R}^{n \times m}$, $x \in \mathbb{R}^m$, niin voimme ratkaista y:n muuttujien x suhteen yhtälöryhmästä $f(x, y) = \mathbf{0}$, jolloin saamme $y(x) - \hat{y} = -A^{-1}B(x - \hat{x})$. Erityisesti voimme havaita, että

$$Dy(x) = -A^{-1}B,$$

kun A on kääntyvä matriisi. Jos merkitään vektorilla $dy = (dy_1, dy_2, \ldots, dy_n)$ funktion y muutosta kun x:n muutos on $dx = (dx_1, dx_2, \ldots, dx_m)$, niin voimme kirjoittaa tuloksen muodossa $dy = -A^{-1}Bdx$ tai

$$Ady = -Bdx$$

Tämä jälkimmäinen muotoilu voi toisinaan olla hyödyllinen. Voimme esimerkiksi laskea nyt kokonaisdifferentiaalin dy lausekkeen Cramerin säännöllä. Kokeillaan seuraavassa esimerkissä miten tämä onnistuu.

Esimerkki 8.2.2. Olkoon tarkasteltavana yhtälöpari

$$\begin{aligned} 2y_1 + y_2 + 3x &= 0 \\ y_1 - y_2 - x &= 0. \end{aligned}$$

Tämä voidaan esittää matriisimuodossa

$$\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 3 \\ -1 \end{pmatrix} x = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

eli

$$\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -3 \\ 1 \end{pmatrix} x.$$

Cramerin säännöllä

$$dy_1 = \frac{\det \begin{pmatrix} -3 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}}{\det \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}} dx = -\frac{2}{3} dx$$

ja

$$dy_2 = \frac{\det \begin{pmatrix} 2 & -3 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}}{\det \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}} dx = -\frac{5}{3} dx.$$

Oletetaan seuraavaksi, että tunnemme epälineaariselle yhtälöryhmälle ratkaisun $(\hat{x}, \hat{y})$, eli $f(\hat{x}, \hat{y}) = \mathbf{0}$. Linearisoidaan tämä yhtälöryhmä pisteen $(\hat{x}, \hat{y})$ ympäristössä, jolloin saamme

$$D_x f(\hat{x}, \hat{y})(x - \hat{x}) + D_y f(\hat{x}, \hat{y})(y - \hat{y}) = \mathbf{0}.$$

Tulkitsemalla $A = D_y f(\hat{x}, \hat{y})$ ja $B = D_x f(\hat{x}, \hat{y})$ saamme edellä esitetystä tuloksesta lineaarisille yhtälöryhmille, että

$$Dy(x) = -[D_y f(\hat{x}, \hat{y})]^{-1} D_x f(\hat{x}, \hat{y}),$$

olettaen että löytyy differentioituva funktio $y(x)$, jolle yhtälöryhmä toteutuu. Toisaalta tämän voi kirjoittaa myös muodossa $dy = -[D_y f(\hat{x}, \hat{y})]^{-1} D_x f(\hat{x}, \hat{y}) dx$.

Implisiittifunktiolause kertoo milloin löytyy derivoituva funktio y, joka ratkaisee yhtälöryhmän $f(x, y(x)) = \mathbf{0}$.

Lause 8.2.2. *Olkoon $f(x, y)$ jatkuvasti differentioituva pisteen $(\hat{x}, \hat{y}) \in \mathbb{R}^{m+n}$ ympäristössä $N_\varepsilon(\hat{x}, \hat{y})$, jollakin $\varepsilon > 0$, ja $f(\hat{x}, \hat{y}) = \mathbf{0}$. Jos $D_y f(\hat{x}, \hat{y})$ on ei-singulaarinen (täyttä astetta), niin tällöin löytyy $\delta > 0$ ja jatkuvasti differentioituva funktio $y : N_\delta(\hat{x}) \mapsto \mathbb{R}^n$ siten, että*

1. $f(x, y(x)) = \mathbf{0}$,
2. $y(\hat{x}) = \hat{y}$,
3. $Dy(x) = -[D_y f(\hat{x}, \hat{y})]^{-1} D_x f(\hat{x}, \hat{y})$.

Implisiittifunktiolauseessa on oleellista se, että y:n derivaatta voidaan laskea vaikka y:n eksplisiittinen lauseke ei olisi tiedossa. Tätä kutsutaan joskus implisiittiseksi differentioinniksi.

Tarkastellaan esimerkin avulla miten implisiittifunktiolausetta voi soveltaa.

Esimerkki 8.2.3. Olkoon

$$f(x, y) = \begin{pmatrix} f_1(x_1, x_2, y_1, y_2) \\ f_2(x_1, x_2, y_1, y_2) \end{pmatrix},$$

missä

$$\begin{aligned} f_1(x_1, x_2, y_1, y_2) &= y_1 y_2^2 - x_1 x_2 + x_2 + 1 \\ f_2(x_1, x_2, y_1, y_2) &= y_1 + x_1/y_2 + x_2 - 5. \end{aligned}$$

Tarkastellaan yhtälöparia pisteen $(\hat{x}_1, \hat{x}_2, \hat{y}_1, \hat{y}_2) = (2, 2, 1, 1)$ ympäristössä. Lasketaan seuraavaksi matriisit $D_y f(\hat{x}, \hat{y})$ ja $D_x f(\hat{x}, \hat{y})$:

$$D_y f(\hat{x}, \hat{y}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1(\hat{x},\hat{y})}{\partial y_1} & \frac{\partial f_1(\hat{x},\hat{y})}{\partial y_2} \\ \frac{\partial f_2(\hat{x},\hat{y})}{\partial y_1} & \frac{\partial f_2(\hat{x},\hat{y})}{\partial y_2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{y}_2^2 & 2\hat{y}_1\hat{y}_2 \\ 1 & -\frac{\hat{x}_1}{\hat{y}_2^2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 1 & -2 \end{pmatrix}$$

ja

$$D_x f(\hat{x}, \hat{y}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1(\hat{x},\hat{y})}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1(\hat{x},\hat{y})}{\partial x_2} \\ \frac{\partial f_2(\hat{x},\hat{y})}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2(\hat{x},\hat{y})}{\partial x_2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\hat{x}_2 & 1 - \hat{x}_1 \\ \frac{1}{\hat{y}_2} & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -2 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Voimme huomata laskemalla, että $\det[D_y f(\hat{x}, \hat{y})] = -4 \neq 0$, joten $D_y f(\hat{x}, \hat{y})$ on ei-singulaarinen. Tarkstellaan x_1:n muutoksen vaikutusta endogeenisiin muuttujiin (y), eli oletetaan että x_2 pysyy vakiona, eli $dx_2 = 0$. Kirjoitetaan auki

$$D_y f(\hat{x}, \hat{y})(dy1, dy_2) + D_x f(\hat{x}, \hat{y})(dx_1, 0) = (0, 0),$$

jolloin saadaan

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial f_1(\hat{x},\hat{y})}{\partial y_1} & \frac{\partial f_1(\hat{x},\hat{y})}{\partial y_2} \\ \frac{\partial f_2(\hat{x},\hat{y})}{\partial y_1} & \frac{\partial f_2(\hat{x},\hat{y})}{\partial y_2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} dy_1 \\ dy_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1(\hat{x},\hat{y})}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f_2(\hat{x},\hat{y})}{\partial x_1} \end{pmatrix} dx_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

eli

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 1 & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} dy_1 \\ dy_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -2 \\ 1 \end{pmatrix} dx_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Saamme Cramerin säännöllä

$$dy_1 = \frac{\det \begin{pmatrix} 2 & 2 \\ -1 & -2 \end{pmatrix}}{\det \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 1 & -2 \end{pmatrix}} dx_1 = \frac{1}{2} dx_1$$

ja

$$dy_2 = \frac{\det \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}}{\det \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 1 & -2 \end{pmatrix}} dx_1 = \frac{3}{4} dx_1.$$

Voimme siis sanoa miten käy muuttujille y_1 ja y_2 jos x_1:tä kasvatetaan hieman. Tällöin sekä y_1 ja y_2 kasvavat.

Entä voitaisiko muuttujat y_2 ja x_1 valita endogeenisiksi muuttujiksi? Vastaus selviää laskemalla determinantti matriisille $D_{(y_2,x_1)} f(\hat{x}, \hat{y})$.

8.3 Weierstrassin lause

Weierstrassin lause vastaa kysymykseen: “Milloin voidaan olla varmoja, että optimointitehtävällä on ratkaisu?” Kysymys on tärkeä minissa teoreettisissa tarkasteluissa. Esimerkiksi kuluttajan teoriassa saadaan kysyntäfunktio kuluttajan maksimointitehtävän ratkaisuna, jolloin voidaan kysyä, että millä ehdoilla kysyntäfunktio on olemassa. Palataan tähän lopuksi

Weierstrassin lauseen mukaan optimointitehtävällä on sekä minimi että maksimi, kun kohdefunktio on jatkuva ja käypä joukko on kompakti

Lause 8.3.1. *Tehtävällä* $\max_{x \in X} f(x)$ *on ratkaisu, kun* f *on jatkuva ja* X *on kompakti joukko.*

Kompakti $\mathbb{R}^n$:n osajoukko on suljettu ja rajoitettu. Joukko $X \subseteq \mathbb{R}^n$ on suljettu, jos se pitää sisällään kaikkien joukosta poimittujen suppenevien jonojen raja-arvot. Olkoon $\{x_k\}_{k=1}^{\infty} \subset X$ jono X:ssä, joka suppenee pisteeseen x, eli $\|x_k - x\| \to 0$ (merkitään $x_k \to x$), kun $k \to \infty$. Joukko X on suljettu jos $x_k \to x$ implikoi, että $x \in X$. Joukko X on rajoitettu, jos löytyy $M > 0$ siten, että $x \in X \Rightarrow \|x\| \leq M$

Suljettuja joukkoja saadaan optimoinnissa silloin, kun rajoitefunktiot ovat jatkuvia, eli jos $X = \{x \in \mathbb{R}^n : g(x) \leq \mathbf{0},\ h(x) = \mathbf{0}\}$ ja kuvaukset g ja h ovat jatkuvia niin X on suljettu.

Weierstrassin lauseesta on syytä huomata, että se koskee itse asiassa niin minimejä kuin maksimejakin, eli kompaktissa joukossa jatkuva funktio saavuttaa sekä miniminsä, että maksiminsa.

Eräänä Weierstrassin lauseen erikoistapauksena saadaan seuraava tulos.

Lause 8.3.2. *Kun X on suljettu, f jatkuva ja sen ylätasojoukot kompakteja, niin tehtävällä* $\max_{x \in X} f(x)$ *on ratkaisu.*

Esimerkki 8.3.1. Tarkastellaan lopuksi mikrotalousteorian kuluttajan tehtävää eräänä Weierstrassin lauseen sovelluksena. Kuluttajan tehtävässä käypä joukko on budjettijoukko

$$B = \{x \in \mathbb{R}^n : p \cdot x \leq I, x \geq \mathbf{0}\}.$$

Kyseinen joukko on kompakti Jos kuluttajan hyötyfunktio on jatkuva kaikilla $x \geq \mathbf{0}$, niin tehtävällä on ratkaisu. Tämä seuraa suoraan Weierstrassin lauseesta Tehtävänä on siis $\max U(x)$ s.e. $x \in B$. Ratkaisuna saadaan (Marshallin) kysyntäfunktio $\xi(p, I)$, mikäli ratkaisu on yksikäsitteinen.