Kapitola 4

Numerické metody optimalizace

V této kapitole se věnujeme výkladu základů konvexní analýzy v $\mathbb{R}^n$ a základním numerickým metodám pro hledání minima (lokálního minima) funkcí více proměnných. Na začátku uveďme dva příklady.

Příklad 12 *Prokládání křivek naměřenými daty:* Máme zadány hodnoty x_i, y_i $(i = 1, \ldots, r, x_1 < \ldots < x_r)$. Hledáme funkci $f = f(\alpha_1, \ldots, \alpha_n, x)$ závislou na konečně mnoha parametrech $\alpha_1, \ldots, \alpha_n$ tak, aby její hodnoty v x_i byly co nejblíže k y_i. Použijeme-li metodu nejmenších čtverců, je třeba minimalizovat funkci

$$J(\alpha_1, \ldots, \alpha_n) = \sum_{i=1}^{r} (f(\alpha_1, \ldots, \alpha_n, x_i) - y_i)^2.$$

Příklad 13 *Optimalizace tvaru radiátoru ústředního topení:* Snažíme se najít co nejvýhodnější tvar průřezu žebra. Tento tvar můžeme reprezentovat uzavřenou křivkou okolo počátku. Protože chceme, aby tato křivka byla symetrická, můžeme ji reprezentovat pomocí nezáporné funkce $p : [0, b] \to [0, +\infty)$. Tvar žebra pak vznikne doplněním grafu této funkce o části souměrně s ním sdružené podle počátku a obou os. Rozložení teploty T bude splňovat rovnici pro vedení tepla ve tvaru[1]

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(p(x)\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}x}\right) = a\sqrt{1 + \left(\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}x}\right)^2} \cdot T$$

s okrajovými podmínkami $T(0) = T_0$, $T(b) = T_b$, kde a je konstanta závisející na vlastnostech materiálu. Celkové množství tepla uvolněného do okolí je

$$I = 2\int_0^b kT\mathrm{d}x,$$

[1] Tento příklad má pouze ilustrovat, jak se složitější praktický problém převádí na standardní situaci hledání minima funkce několika proměnných

kde $k > 0$ je opět konstanta závisející na vlastnostech materiálu. Úkolem je najít funkci p takovou, aby hodnota funkcionálu $I(p)$ byla maximální, tedy aby hodnota $F(p) = -I(p)$ byla minimální. Přesněji řečeno, hledáme funkci $p^* \in C^1([0,b])$ tak, aby

$$F(p^*) = \min_{p \in C^1([0,b])} F(p)$$

a zároveň $p(b) = 0$, $p(0) = K > 0$ (K je zadáno) a $p > 0$ na $[0,b)$. Označíme-li U množinu všech takových funkcí (bez požadavku minimality), hledáme minimum funkce F na množině U. Takto formulovaná úloha spadá do odvětví matematiky zvaného *optimální řízení*. Pro použití numerických metod se musíme ještě omezit na nějakou množinu $\tilde{U} \subset U$ funkcí určenou konečně mnoha parametry $u_1, \ldots, u_n$. Každé takové n-tici parametrů přiřadíme funkci $p \in U$, k té vypočteme teplotu T, hodnoty $I(p)$ a $F(p)$ a položíme $\tilde{F}(u_1, \ldots, u_n) := F(p)$. Tím už jsme úlohu převedli na problém minimalizace funkce $\tilde{F} : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$.

V obou případech jsme dospěli k úloze minimalizovat reálnou funkci n proměnných. Je vidět, že tato úloha má řadu praktických aplikací. Podobně jako u diferenciálních rovnic explicitní vzorce pro minimalizaci funkcí v netriviálniche případech neexistují. Proto byly vyvinuty různé numerické minimalizační algoritmy.

4.1 Základy konvexní analýzy

V této části uvedeme některé základní pojmy a výsledky konvexní analýzy, které se využívají při numerickém hledání extrémů. V dalším bude U podmnožina $\mathbb{R}^n$ a J zobrazení U do $\mathbb{R}$. V dalším bude symbol $\|\cdot\|$ značit eukleidovskou normu v prostoru $\mathbb{R}^n$.

Definice 18 Hodnotu $J(\bar{u})$, $\bar{u} \in U$ nazveme (absolutním, globálním) *minimem* funkce J na U, jestliže nerovnost $J(u) \geq J(\bar{u})$ platí pro všechna $u \in U$. Bod $\bar{u}$ nazýváme *bod minima*, píšeme $J(\bar{u}) = \min_U J$ nebo $\bar{u} = \arg\min_U J$.

Hodnotu $J(\bar{u})$, $\bar{u} \in U$ nazveme *lokálním minimem* funkce J, jestliže existuje okolí $V(\bar{u})$ bodu $\bar{u}$ takové, že $J(\bar{u})$ je (globálním) minimem J na $U \cap V(\bar{u})$. Bod $\bar{u}$ se pak nazývá *bodem lokálního minima.*

Z matematické analýzy známe následující výsledek.

Věta 15 *Buď $U \subset \mathbb{R}^n$ omezená, uzavřená množina a $J : U \to \mathbb{R}$ spojitá funkce. Potom J nabývá na U minima.*

Definice 19 Nechť $U \subset \mathbb{R}^n$ je neomezená množina a $J : U \to \mathbb{R}$. Řekneme, že funkce J je *koercivní*, jestliže

$$\lim_{\substack{\|u\| \to \infty \\ u \in U}} J(u) = +\infty.$$

Věta 16 *Nechť $U \subset I\!R^n$ je neomezená, uzavřená množina. Buď $J : U \to I\!R$ spojitá a koercivní. Pak J nabývá na U minima.*
Důkaz: Nechť $a \in U$. Z podmínky koercivity vyplývá, že existuje takové $R > 0$, že

$$a \in B(0, R) \cap U \neq \emptyset, \quad \forall u \in U \setminus B(0, R) : J(u) \geq J(a) + \frac{\pi}{17},$$

kde $B(0, R)$ označuje uzavřenou kouli se středem v počátku a poloměrem R. Označíme-li $K = U \cap B(0, R)$, nabývá J na K podle minulé věty v nějakém bodě $\bar{u}$ minima. Pak je ale pro $u \in U \setminus B(0, R)$

$$J(u) \geq J(a) + \frac{\pi}{17} > J(a) \geq J(\bar{u})$$

a hodnota $J(\bar{u})$ je tedy minimem na celé množině U. □

Nechť $U \subset I\!R^n$ je otevřená, $J \in C^1(U)$. Pak pro každé $u \in U$, $\varphi \in I\!R^n$ existuje směrová derivace

$$J'(u, \varphi) = \lim_{\theta \to 0} \frac{J(u + \theta\varphi) - J(u)}{\theta}.$$

Její hodnota je rovna $\nabla J(u) \, . \, \varphi$, kde

$$\nabla J(u) = \mathrm{grad} J(u) = \left(\frac{\partial J}{\partial u_1}(u), \ldots, \frac{\partial J}{\partial u_n}(u) \right)^T$$

je *gradient* funkce J.

Připomeňme, že množinu $U \subset I\!R^n$ nazýváme *konvexní*, jestliže platí implikace

$$a, b \in U \implies a + \theta(b - a) \in U \quad \theta \in [0, 1].$$

Definice 20 Buď $U \subset I\!R^n$ konvexní množina. Řekneme, že $J : U \to I\!R$ je *konvexní funkce*, jestliže

$$J(u + \theta(v - u)) \leq J(u) + \theta(J(v) - J(u))$$

pro libovolné $u, v \in U$, $\theta \in [0, 1]$. Řekneme, že J je *ryze konvexní*, jestliže pro $u \neq v$, $\theta \in (0, 1)$ platí ostrá nerovnost.

Věta 17 *$U \subset I\!R^n$ buď otevřená konvexní množina, $J \in C^1(U)$. Pak*

(i) J je konvexní právě když $J(v) \geq J(u) + J'(u, v - u)$ pro každé $u, v \in U$;

(ii) J je ryze konvexní právě když $J(v) > J(u) + J'(u, v - u)$ pro každé $u, v \in U$, $u \neq v$.

Důkaz: Nechť je nejprve J konvexní na U. Tzn., že je-li $u, v \in U$, potom

$$J(u + \theta(v - u)) \leq J(u) + \theta(J(v) - J(u)), \qquad \forall \theta \in (0, 1).$$

Z toho plyne, že

$$J(v) - J(u) \geq \frac{J(u + \theta(v-u)) - J(u)}{\theta}, \qquad \forall \theta \in (0,1).$$

Nyní uvažujme $\theta \to 0+$. Pak

$$J(v) - J(u) \geq \lim_{\theta \to 0+} \frac{J(u + \theta(v-u)) - J(u)}{\theta} = J'(u, v-u).$$

Dokažme opačnou implikaci. Nechť je pro každé $u, v \in U$ splněna podmínka

$$J(v) \geq J(u) + J'(u, v-u).$$

Z toho plyne, že pro každé $\theta \in [0,1]$ platí

$$\begin{aligned} J(u) &\geq J(u + \theta(v-u)) - J'(u + \theta(v-u), \theta(v-u)) \\ &= J(u + \theta(v-u)) - \theta J'(u + \theta(v-u), v-u) \end{aligned}$$

a

$$\begin{aligned} J(v) &\geq J(u + \theta(v-u)) + J'(u + \theta(v-u), (1-\theta)(v-u)) \\ &= J(u + \theta(v-u)) + (1-\theta) J'(u + \theta(v-u), v-u). \end{aligned}$$

Přenásobením prvního vztahu členem $1-\theta$ a druhého θ a sečtením dostaneme

$$(1-\theta)J(u) + \theta J(v) \geq J(u + \theta(v-u)), \qquad \forall u, v \in U, \forall \theta \in [0,1].$$

Nyní budeme dokazovat tvrzení (ii). Nejprve nechť je

$$J(v) > J(u) + J'(u, v-u), \qquad \forall u, v \in U, u \neq v, \theta \in (0,1).$$

Stejným postupem jako jsme právě užili (uvažujeme-li ostré nerovnosti) dostaneme, že f je ryze konvexní.

Předpokládejme naopak, že f je ryze konvexní. Tudíž, funkce f je rovněž konvexní. Z definice ryzí konvexity funkce f vyplývá, že pro $\theta \in (0,1)$ a $u, v \in U$, $u \neq v$ máme

$$J(u + \theta(v-u)) < J(u) + \theta(J(v) - J(u)).$$

Odtud a z tvrzení (i) ihned plyne, že

$$\begin{aligned} J(v) - J(u) &> \frac{J(u + \theta(v-u)) - J(u)}{\theta} \\ &\geq \frac{J'(u, \theta(v-u))}{\theta} = J'(u, v-u), \end{aligned}$$

což jsme chtěli dokázat. $\square$

Věta 18 *$U \subset \mathbb{R}^n$ buď otevřená, $J \in C^1(U)$.*

(i) Je-li $\bar{u} \in U$ bodem lokálního minima, je $J'(\bar{u}, \varphi) = 0$ pro každé $\varphi \in \mathbb{R}^n$ (neboli $\nabla J(\bar{u}) = 0$).

(ii) Je-li navíc U konvexní, J konvexní, potom jsou následující tvrzení ekvivalentní:

1) $\bar{u}$ je bodem lokálního minima,

2) $\bar{u}$ je bodem minima,

3) $\nabla J(\bar{u}) = 0$.

(iii) Je-li navíc J ryze konvexní, má J na U nejvýše jeden bod minima.

Důkaz: Tvrzení (i) je známé z matematické analýzy. Pro důkaz (ii) předpokládejme, že U je konvexní, $J \in C^1(U)$ a J je konvexní. Z toho vyplývá, že

$$J(v) \geq J(\bar{u}) + J'(\bar{u}, v - \bar{u}) \quad \forall v \in U. \tag{4.1.1}$$

Jestliže $\bar{u}$ je bodem lokálního minima, potom $\nabla J(\bar{u}) = 0$ a $J'(\bar{u}, \varphi) = 0$ pro každé $\varphi \in \mathbb{R}^n$. Odtud a z (4.1.1) plyne, že $J(v) \geq J(\bar{u})$ pro všechna $v \in U$. Tudíž, $\bar{u} = \arg\min_U J$. Naopak, pokud $\nabla J(\bar{u}) = 0$, pak podle předchozího je $\bar{u}$ bodem minima.

Pro důkaz tvrzení (iii) předpokládejme, že J je ryze konvexní a má v U dva body minima $u_1 \neq u_2$. Potom ale z ryzí konvexity plyne, že

$$J(u_2) > J(u_1) + J'(u_1, u_2 - u_1),$$

přičemž $J'(u_1, u_2 - u_1) = 0$, protože u_1 je bod minima. To je ovšem spor. □

Definice 21 *Pokud $\nabla J(u) = 0$, potom bod u nazýváme stacionárním bodem funkce J.*

Nechť $U \subset \mathbb{R}^n$ je otevřená množina a nechť $J \in C^2(U)$. Pak má J totální diferenciál druhého řádu v libovolném bodě $u \in U$ a směrové derivace druhého řádu $J''(u, \varphi, \psi) = \varphi^T \mathbb{H}\,(u)\psi$ ve směrech $\varphi, \psi \in \mathbb{R}^n$, kde

$$\mathbb{H}\,(u) = \left(\frac{\partial^2 J}{\partial u_i \partial u_j}(u) \right)_{i,j=1}^n$$

je *Hessova matice* (která je symetrická). Pokud $u, v \in U$ a úsečka s krajními body u, v leží celá v množině U, potom platí Taylorův vzorec ve tvaru

$$J(v) = J(u) + J'(u, v - u) + \frac{1}{2} J''(u + \theta(v - u), v - u, v - u)$$

pro nějaké $\theta \in [0, 1]$. Použitím tohoto vzorce lze dokázat následující větu:

Věta 19 *Nechť $J : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, $J \in C^2$ a nechť existuje $\alpha > 0$ takové, že $J''(u, \varphi, \varphi) \geq \alpha \|\varphi\|^2$ pro všechna $u, \varphi \in \mathbb{R}^n$. Potom J je koercivní a ryze konvexní na $\mathbb{R}^n$.*