Kapitola 2

Optimalizace jako matematická úloha

U reálných funkcí rozlišujeme dva typy extrémů. Jsou to minimum a maximum. Každý z nich může mít povahu lokální nebo globální. Uveďme si přesné definice.

Definice 2.1.: *Nechť* $f : \mathcal{X} \to \mathbb{R}$*, kde* $\emptyset \neq \mathcal{X} \subset \mathbb{R}^{\mathsf{n}}$*. Řekneme, že funkce* f *má v bodě* $\mathbf{x}^* \in \mathcal{X}$

- **globální minimum***, jestliže*
$$\mathbf{x} \in \mathcal{X} \quad \Rightarrow \quad f(\mathbf{x}) \geq f(\mathbf{x}^*)\,; \tag{2.1}$$
- **lokální minimum***, jestliže existuje* $\delta > 0$ *takové, že*
$$\mathbf{x} \in \mathcal{X},\ |\mathbf{x} - \mathbf{x}^*| < \delta \quad \Rightarrow \quad f(\mathbf{x}) \geq f(\mathbf{x}^*)\,; \tag{2.2}$$
- **ostré globální minimum***, jestliže*
$$\mathbf{x} \in \mathcal{X},\ \mathbf{x} \neq \mathbf{x}^* \quad \Rightarrow \quad f(\mathbf{x}) > f(\mathbf{x}^*)\,; \tag{2.3}$$
- **ostré lokální minimum***, jestliže existuje* $\delta > 0$ *takové, že*
$$\mathbf{x} \in \mathcal{X},\ 0 < |\mathbf{x} - \mathbf{x}^*| < \delta \quad \Rightarrow \quad f(\mathbf{x}) > f(\mathbf{x}^*)\,; \tag{2.4}$$
- **globální maximum***, jestliže*
$$\mathbf{x} \in \mathcal{X} \quad \Rightarrow \quad f(\mathbf{x}) \leq f(\mathbf{x}^*)\,; \tag{2.5}$$
- **lokální maximum***, jestliže existuje* $\delta > 0$ *takové, že*
$$\mathbf{x} \in \mathcal{X},\ |\mathbf{x} - \mathbf{x}^*| < \delta \quad \Rightarrow \quad f(\mathbf{x}) \leq f(\mathbf{x}^*)\,; \tag{2.6}$$
- **ostré globální maximum***, jestliže*
$$\mathbf{x} \in \mathcal{X},\ \mathbf{x} \neq \mathbf{x}^* \quad \Rightarrow \quad f(\mathbf{x}) < f(\mathbf{x}^*)\,; \tag{2.7}$$
- **ostré lokální maximum***, jestliže existuje* $\delta > 0$ *takové, že*
$$\mathbf{x} \in \mathcal{X},\ 0 < |\mathbf{x} - \mathbf{x}^*| < \delta \quad \Rightarrow \quad f(\mathbf{x}) < f(\mathbf{x}^*)\,. \tag{2.8}$$

2.1 Funkce jedné proměnné

Nejdříve si připomeňme, jak hledat extrémy funkce jedné proměnné na zadané podmnožině reálné přímky. Opíráme se přitom o základní vlastnost derivace.

Věta 2.2.: *Nechť $f : D \to \mathbb{R}$, kde $D \subset \mathbb{R}$. Jestliže v bodě $x^* \in \mathsf{int}\,(D)$ existuje derivace $f'(x^*)$ a je různá od nuly, pak funkce f nemá v bodě x^* ani lokální maximum ani lokální minimum. ($\mathsf{int}\,(D)$ označuje vnitřek množiny D, viz definice 2.17.)*

Jinými slovy, pro funkci, která má všude derivace, je podmínka $f'(x^*) = 0$ **nutná** proto, aby mohla mít v bodě $x^* \in \mathsf{int}\,(D)$ lokální extrém. Tento fakt můžeme využít při hledání lokálních i globálních extrémů, jak ukazuje následující příklad.

Příklad 2.3.: Hledáme globální a lokální extrémy funkce $f(x) = 1/4x^4 - 5x^3 + 27x^2 - 40x$ na celé reálné přímce.

Nejdříve si uvědomme, že $f'(x) = x^3 - 15x^2 + 54x - 40 = (x-1)(x-4)(x-10)$.

Podle věty 2.2 jen body 1, 4 a 10 mohou být body lokálních nebo globálních extrémů. Pouze v nich je totiž derivace uvažované funkce nulová.

Podívejme se nyní na znaménko derivace. V intervalu $(-\infty, 1)$ je záporná, v intervalu $(1, 4)$ je kladná, v intervalu $(4, 10)$ je záporná a v intervalu $(10, +\infty)$ je kladná.

Pro uvažovanou funkci to znamená, že je klesající na $(-\infty, 1)$, rostoucí na $(1, 4)$, klesající na $(4, 10)$ a rostoucí na $(10, +\infty)$. To znamená, že body 1 a 10 jsou body lokálních minim a bod 4 je bod lokálního maxima. Mezi nimi budeme hledat globální extrémy.

Bod 10 je globálním minimem, neboť $f(1) = -17 - 3/4$ a $f(10) = -200$. Globální maximum funkce na celé reálné přímce nemá. Je to proto, že při velkých i malých hodnotách argumentu funkční hodnoty rostou nad všechny meze.

$\triangle$

Příklad 2.4.: Hledáme globální a lokální extrémy funkce $f(x) = 1/4x^4 - 5x^3 + 27x^2 - 40x$ na intervalu $[0, 20]$.

Použijeme-li výsledky z předchozího příkladu a spočteme-li, že $f(4) = 16$ a $f(20) = 10000$, pak zjišťujeme, že funkce má lokální minima v bodech 1 a 10, lokální maxima v bodech 4 a 20. Globální minimum má opět v bodě 10 a globální maximum je v bodě 20.

$\triangle$

Příklad 2.5.: Hledáme globální a lokální extrémy funkce $f(x) = 1/4x^4 - 5x^3 + 27x^2 - 40x$ na intervalu $(0, 20)$.

Použijeme-li výsledky z předchozího příkladu, pak zjišťujeme, že funkce má lokální minima v bodech 1 a 10, lokální maximum v bodě 4. Globální minimum má opět v bodě 10 a globální maximum funkce nemá, neboť funkční hodnoty blízko bodu 20 jsou větší nežli v bodě 4.

$\triangle$

Připomeňme si ještě jednu větu z matematické analýzy.

Věta 2.6. (Weierstrass): *Spojitá funkce jedné proměnné má na omezeném uzavřeném intervalu globální maximum i globální minimum.*

2.2 Funkce více proměnných

Podobně lze postupovat pro funkce více proměnných, zpravidla funkce na $\mathbb{R}^{\mathsf{n}}$. Tučnými písmeny budeme označovat vektory a matice, tj. $\mathbf{x} = (x_1, \ldots, x_{\mathsf{n}})^\top$ a $\mathbf{A} = (A_{i,j})_{i=1,j=1}^{I,J}$.

Věta 2.7.: *Nechť $f : D \to \mathbb{R}$, kde $D \subset \mathbb{R}^{\mathsf{n}}$. Jestliže v bodě $\mathbf{x}^* = (x_1^*, \ldots, x_{\mathsf{n}}^*)^\top \in \mathsf{int}\,(D)$ aspoň pro jeden index j, $1 \le j \le \mathsf{n}$, existuje nenulová parciální derivace $\frac{\partial f}{\partial x_j}(\mathbf{x}^*)$, pak f v bodě $\mathbf{x}^*$ nenabývá ani lokálního maxima ani lokálního minima.*

Definice 2.8.: *Nechť $f : D \to \mathbb{R}$, kde $D \subset \mathbb{R}^{\mathsf{n}}$. Pokud funkce f má v bodě $\mathbf{x} = (x_1, \ldots, x_{\mathsf{n}})^\top \in \mathsf{int}\,(D)$ všechny parciální derivace, pak definujeme v tomto bodě její* **gradient**

$$\nabla_x f\,(\mathbf{x}) = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}(\mathbf{x}), \frac{\partial f}{\partial x_2}(\mathbf{x}), \ldots, \frac{\partial f}{\partial x_{\mathsf{n}}}(\mathbf{x})\right)^\top .$$

Pokud funkce f má v bodě $\mathbf{x} = (x_1, \ldots, x_{\mathsf{n}})^\top \in \mathsf{int}\,(D)$ všechny druhé parciální derivace, pak definujeme v tomto bodě její **Hessian** *jako matici druhých parciálních derivací*

$$\nabla^2_{x,x} f\,(\mathbf{x}) = \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(\mathbf{x})\right)_{i=1,j=1}^{\mathsf{n},\mathsf{n}} .$$

Pro diferencovatelnou funkci můžeme větu 2.7 přepsat do tvaru

Věta 2.9.: *Nechť $f : D \to \mathbb{R}$, kde $D \subset \mathbb{R}^{\mathsf{n}}$. Jestliže v bodě $\mathbf{x}^* = (x_1^*, \ldots, x_{\mathsf{n}}^*)^\top \in \mathsf{int}\,(D)$ má funkce f gradient a $\nabla_x f\,(\mathbf{x}^*) \neq \mathbf{0}$, pak f v bodě $\mathbf{x}^*$ nenabývá ani lokálního maxima ani lokálního minima.*

Uveďme si ještě obecnou Weierstrassovu větu; porovnej s větou 2.6.

Věta 2.10. (Weierstrass): *Spojitá funkce $f : D \to \mathbb{R}$, kde $D \subset \mathbb{R}^{\mathsf{n}}$ je omezená uzavřená množina, nabývá na množině D svého globálního maxima i globálního minima.*

Omezíme se většinou na funkce, které mají derivace a pro které jsou lokální minima (maxima) globální. Poslední vlastnost mají zejména konvexní (konkávní) funkce.

2.3 Konvexní množiny

Nejdříve se musíme seznámit s konvexními množinami v konečně dimenzionálním Euklidově prostoru. Později využijeme řadu jejich vlastností.

Definice 2.11.: *Množina $\mathcal{X} \subset \mathbb{R}^{\mathsf{n}}$ se nazývá* **konvexní**, *jestliže s každými dvěma body obsahuje také všechny jejich* ***konvexní lineární kombinace***, *tj. pro každé $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathcal{X}$ a $\lambda \in (0,1)$ je $\lambda\mathbf{x} + (1-\lambda)\mathbf{y} \in \mathcal{X}$.*

Poznamenejme, že prázdná množina je z definice také konvexní.

Jako příklad konvexní množiny si můžeme uvést kruh, čtverec, obdélník, přímku, polopřímku, úsečku, atd. Množinami, které nejsou konvexní, jsou například kružnice, obvod čtverce, doplněk čtverce, doplněk kruhu, atd.

Definice 2.12.: *Budeme používat následující pojmenování:*

- **Nadrovina** *je množina, kterou lze zapsat jako $\{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{\mathsf{n}} : \mathbf{a}^\top\mathbf{x} = c\}$ pro vhodná $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^{\mathsf{n}}$, $c \in \mathbb{R}$, $\mathbf{a} \neq \mathbf{0}$.*
- **Uzavřený poloprostor** *je množina, kterou lze zapsat jako $\{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{\mathsf{n}} : \mathbf{a}^\top\mathbf{x} \ge c\}$ nebo jako $\{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{\mathsf{n}} : \mathbf{a}^\top\mathbf{x} \le c\}$ pro vhodná $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^{\mathsf{n}}$, $c \in \mathbb{R}$, $\mathbf{a} \neq \mathbf{0}$.*
- **Otevřený poloprostor** *je množina, kterou lze zapsat jako $\{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{\mathsf{n}} : \mathbf{a}^\top\mathbf{x} > c\}$ nebo jako $\{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{\mathsf{n}} : \mathbf{a}^\top\mathbf{x} < c\}$ pro vhodná $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^{\mathsf{n}}$, $c \in \mathbb{R}$, $\mathbf{a} \neq \mathbf{0}$.*

- **Konvexní polyedrická množina** *je množina, která je průnikem konečně mnoha uzavřených poloprostorů.*
- **Konvexní polyedr** *je omezená konvexní polyedrická množina.*

Velkou důležitost pro existenci optima úlohy mají kužele.

Definice 2.13.: *Budeme používat následující pojmenování:*

- **Kužel** *je množina $K \subset \mathbb{R}^n$, která obsahuje počátek, tj. $\mathbf{0} \in K$, a nezáporné násobky svých prvků, tj. $\forall\, \mathbf{x} \in K,\ \alpha \geq 0$ je také $\alpha\mathbf{x} \in K$.*
- **Konvexní kužel** *je zároveň kužel i konvexní množina.*
- **Konvexní polyedrický kužel** *je zároveň konvexní kužel i konvexní polyedrická množina.*

Některé množinové operace zachovávají konvexitu množin.

Lemma 2.14.: *Nechť $A \subset \mathbb{R}^n$ je konvexní množina a $\alpha \in \mathbb{R}$. Pak také $\alpha A = \{\alpha\mathbf{a} : \mathbf{a} \in A\}$ je konvexní množina.*

Důkaz: Uvažujme tři případy.

1. Když $A = \emptyset$, pak také $\alpha A = \emptyset$. Tvrzení platí, neboť $\emptyset$ je konvexní množina.
2. Když $A \neq \emptyset$ a $\alpha = 0$, pak $\alpha A = \{\mathbf{0}\}$, což je konvexní množina.
3. V případě $A \neq \emptyset$ a $\alpha \neq 0$ musíme ověřit konvexitu z definice konvexní množiny.
   Vezměme $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \alpha A$ a $0 < \lambda < 1$.
   Pak existují $\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta} \in A$ takové, že $\mathbf{x} = \alpha\boldsymbol{\xi}$ a $\mathbf{y} = \alpha\boldsymbol{\eta}$.
   Množina A je konvexní a tak $\lambda\boldsymbol{\xi} + (1-\lambda)\boldsymbol{\eta} \in A$.
   Pak však platí
   $$\lambda\mathbf{x} + (1-\lambda)\mathbf{y} = \lambda\alpha\boldsymbol{\xi} + (1-\lambda)\alpha\boldsymbol{\eta} = \alpha\left(\lambda\boldsymbol{\xi} + (1-\lambda)\boldsymbol{\eta}\right) \in \alpha A\ .$$
   Ověřili jsme, že i v tomto případě se jedná o konvexní množinu.

Q.E.D.

Lemma 2.15.: *Nechť $A, B \subset \mathbb{R}^n$ jsou konvexní množiny. Pak také*

$$A + B = \{\mathbf{a} + \mathbf{b} : \mathbf{a} \in A,\ \mathbf{b} \in B\}, \quad A - B = \{\mathbf{a} - \mathbf{b} : \mathbf{a} \in A,\ \mathbf{b} \in B\}$$

jsou konvexní množiny.

Důkaz: Stačí pouze ukázat konvexitu množiny $A + B$, protože $A - B = A + (-B)$.
Rozlišme dva případy.

1. Když buď $A = \emptyset$ nebo $B = \emptyset$, pak také $A + B = \emptyset$ a $\emptyset$ je konvexní množina.

2. Když $A \neq \emptyset$ i $B \neq \emptyset$, pak musíme ověřit definiční vlastnost konvexní množiny.
   Vezměme $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in A + B$ a $0 < \lambda < 1$.
   Pak existují $\mathbf{x}_A, \mathbf{y}_A \in A$ a $\mathbf{x}_B, \mathbf{y}_B \in B$ takové, že $\mathbf{x} = \mathbf{x}_A + \mathbf{x}_B$ a $\mathbf{y} = \mathbf{y}_A + \mathbf{y}_B$.
   Množiny A, B jsou konvexní, proto $\lambda\mathbf{x}_A + (1-\lambda)\mathbf{y}_A \in A$, $\lambda\mathbf{x}_B + (1-\lambda)\mathbf{y}_B \in B$.
   Platí tedy
   $$\lambda\mathbf{x} + (1-\lambda)\mathbf{y} = (\lambda\mathbf{x}_A + (1-\lambda)\mathbf{y}_A) + (\lambda\mathbf{x}_B + (1-\lambda)\mathbf{y}_B) \in A + B\,.$$
   Ověřili jsme, že $A + B$ je konvexní množina.

Q.E.D.

Lemma 2.16.: *Nechť I je nějaká neprázdná indexová množina a $\mathcal{X}_\alpha \subset \mathbb{R}^n$ jsou konvexní množiny pro každé $\alpha \in I$. Potom také jejich průnik $\bigcap_{\alpha \in I} \mathcal{X}_\alpha$ je konvexní množina.*

Důkaz: Ověříme definiční vlastnost konvexní množiny.
Vezměme $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \bigcap_{\alpha \in I} \mathcal{X}_\alpha$ a $0 < \lambda < 1$.
To znamená, že pro každé $\alpha \in I$ je $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathcal{X}_\alpha$.
Pak pro každé $\alpha \in I$ je $\lambda\mathbf{x} + (1-\lambda)\mathbf{y} \in \mathcal{X}_\alpha$.
To však znamená, že $\lambda\mathbf{x} + (1-\lambda)\mathbf{y} \in \bigcap_{\alpha \in I} \mathcal{X}_\alpha$.
Ověřili jsme, že průnik je opět konvexní množina.

Q.E.D.

Sjednocení množin však konvexitu nezachovává. Představme si sjednocení dvou kruhů o stejných poloměrech, ale různých středech.

Také některé topologické operace konvexitu zachovávají. Připomeňme si pojem uzávěru, vnitřku a hranice množiny.

Definice 2.17.: *Pro množinu $S \subset \mathbb{R}^n$ definujeme:*

- **uzávěr**, *označení* $\mathsf{clo}\,(S)$, *jako nejmenší uzavřenou množinu, která obsahuje S;*
- **vnitřek**, *označení* $\mathsf{int}\,(S)$, *jako největší otevřenou množinu, která je obsažena v S;*
- **hranici**, *označení $\partial(S)$, jako rozdíl uzávěru a vnitřku S, tj.* $\partial(S) = \mathsf{clo}\,(S) \setminus \mathsf{int}\,(S)$.

Uzávěr a vnitřek konvexitu množiny zachovávají.

Lemma 2.18.: *Nechť $A \subset \mathbb{R}^n$ je konvexní množina. Pak také* $\mathsf{clo}\,(A)$, $\mathsf{int}\,(A)$ *jsou konvexní množiny.*

Hranice konvexní množiny však zpravidla konvexní nebývá. Představme si například kruh. Jeho hranicí je kružnice a ta konvexní není.

Pro problematiku optimalizace jsou důležité následující obaly množiny.

Definice 2.19.: *Pro množinu $S \subset \mathbb{R}^n$, $S \neq \emptyset$ definujeme:*

$$\textbf{lineární obal} \quad \ldots \quad \mathcal{L}\,(S) = \left\{ \sum_{\mathbf{s} \in I} \lambda(\mathbf{s})\mathbf{s} \,:\, \lambda(\mathbf{s}) \in \mathbb{R}\ \forall \mathbf{s} \in I,\ \emptyset \neq I \subset S,\ I \textit{ konečná} \right\};$$

$$\textbf{afinní obal} \quad \ldots \quad \mathsf{Aff}\,(S) = \left\{ \sum_{\mathbf{s} \in I} \lambda(\mathbf{s})\mathbf{s} \,:\, \lambda(\mathbf{s}) \in \mathbb{R}\ \forall \mathbf{s} \in I,\ \sum_{\mathbf{s} \in I} \lambda(\mathbf{s}) = 1,\ \emptyset \neq I \subset S,\ I \textit{ konečná} \right\};$$

$$\textbf{nezáporný obal} \quad \ldots \quad \mathsf{pos}\,(S) = \left\{ \sum_{\mathbf{s} \in I} \lambda(\mathbf{s})\mathbf{s} \,:\, \lambda(\mathbf{s}) \geq 0\ \forall \mathbf{s} \in I,\ \emptyset \neq I \subset S,\ I \textit{ konečná} \right\};$$

$$\textbf{konvexní obal} \quad \ldots \quad \mathsf{conv}\,(S) = \left\{ \sum_{\mathbf{s} \in I} \lambda(\mathbf{s})\mathbf{s} \,:\, \lambda(\mathbf{s}) \geq 0\ \forall \mathbf{s} \in I,\ \sum_{\mathbf{s} \in I} \lambda(\mathbf{s}) = 1,\ \emptyset \neq I \subset S,\ I \textit{ konečná} \right\}.$$