

PA081: Programování numerických výpočtů

6. Optimalizace

Aleš Křenek

jaro 2011

- ▶ hledání minima funkce $f: \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$
 - ▶ maximum je minimum $-f(\mathbf{x})$, speciálně neřešíme
 - ▶ standardní metody hledají (nejbližší) lokální minimum
 - ▶ potřebujeme znát vlastnosti funkce a mít dobrý počáteční odhad
 - ▶ existují i rozšíření na globální minima
- ▶ celkově příjemnější problém než řešení rovnic
 - ▶ především ve více dimenzích
 - ▶ stačí „jít směrem dolů“ a minimum najdeme (kořen ne)
- ▶ žádná univerzální metoda opět neexistuje

- ▶ **jednorozměrné metody**
 - ▶ zlatý řez – robustní, relativně pomalá
 - ▶ Brentova – interpolace parabolou
 - ▶ využití derivací je v 1D diskutabilní
 - ▶ většina vícerozměrných metod využívá jednorozměrné
- ▶ **vícerozměrné metody**
 - ▶ simplex (améba) – jednoduchá a robustní, pomalá
 - ▶ sdružené směry (Powell) – bez derivací, kvadratická konvergence
 - ▶ sdružené gradienty (Polak-Ribiere, Fletcher-Reeves) – s derivacemi
 - ▶ seminewtonovské (Davidon-Fletcher-Powell, Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno) – s derivacemi, postupná aproximace druhých derivací
 - ▶ newtonovské – s explicitními druhými derivacemi, vhodné pro $\sum f_i(\mathbf{x})^2$
- ▶ **globální metody**
 - ▶ simulované žíhání

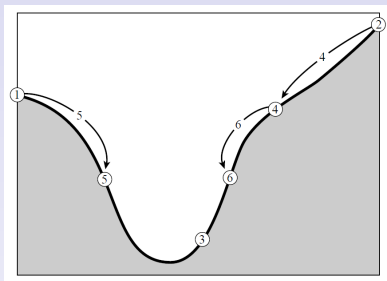
Metoda zlatého řezu

- ▶ analogie metody půlení intervalu pro řešení rovnic
- ▶ podobný pojem separace minima
- ▶ spojitá funkce f , trojice bodů $a < b < c$, platí

$$f(a) > f(b) \text{ a zároveň } f(b) < f(c)$$

potom f má v intervalu $[a, c]$ lokální minimum

- ▶ vybereme nový bod x např. z (b, c)
- ▶ je-li $f(x) < f(b)$, pokračujeme s a, x, b , jinak s b, x, c



Metoda zlatého řezu

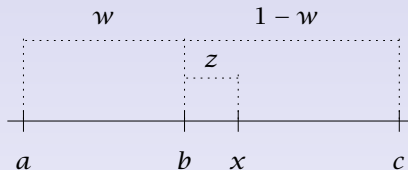
Určení poměru

- ▶ jak vybrat optimálně bod x ?
- ▶ uvažujme poměry

$$\frac{b-a}{c-a} = w \quad \text{a tedy} \quad \frac{c-b}{c-a} = 1-w$$

- ▶ nové x předpokládáme o z dál za b

$$\frac{x-b}{c-a} = z$$



- ▶ nový úsek bude $w + z$ nebo $1 - w$
- ▶ chceme se vyhnout nejhoršímu případu, položíme tedy $w + z = 1 - w$

Přehled

Metoda zlatého
řezuBrentova
metodaSimplexová
metodaMetoda
sdružených
směrů

Metoda zlatého řezu

Určení poměru

- ▶ kde se vzalo w ? z dělení ve stejném poměru, tedy

$$\frac{z}{1-w} = w$$

- ▶ dostáváme rovnici $w^2 - 3w + 1 = 0$, tj.
 $w = \frac{3-\sqrt{5}}{2} \approx 0.38197$
- ▶ není-li původní a, b, c v tomto poměru, rychle se k němu přiblíží
- ▶ rychlost konvergence jen o málo horší než půlení intervalů
 - ▶ $n + 1$. interval je 0.61803 délky n -tého

[Přehled](#)[Metoda zlatého řezu](#)[Brentova metoda](#)[Simplexová metoda](#)[Metoda sdružených směrů](#)

Metoda zlatého řezu

Počáteční separace

- ▶ nevíme-li nic lepšího, začneme z libovolné dvojice a, b
- ▶ pokračujeme směrem „dolů“ podle $f(a), f(b)$
- ▶ kroky prodlužujeme konstantním faktorem,
- ▶ lze využít kvadratickou inter/extrapolaci
 - ▶ rychlejší postup a přesnější výsledek pro „hezké“ funkce
 - ▶ viz Brentova metoda
- ▶ má-li funkce globální minimum, musíme narazit na místo, kde se otočí

Metoda zlatého řezu

Kritérium zastavení

- ▶ naivní $|b - x| < |b|\epsilon$
- ▶ jsme poblíž minima, f je skoro plochá
 - ▶ musíme aplikovat na funkční hodnoty, tj. $|f(b) - f(x)| < |f(b)|\epsilon$
- ▶ Taylorův rozvoj

$$f(x) \approx f(b) + \frac{1}{2}f''(b)(x - b)^2$$

a tedy po úpravách

$$|x - b| < \sqrt{\epsilon}|b| \sqrt{\frac{2|f(b)|}{b^2 f''(b)}}$$

- ▶ velký zkomek je pro „normální“ funkce ~ 1
- ▶ v x má tedy smysl relativní přesnost jen $\sqrt{\epsilon}$

Přehled

Metoda zlatého řezu

Brentova metoda

Simplexová metoda

Metoda sdružených směrů

- ▶ extrém paraboly procházející body a, b, c

$$x = b - \frac{(b-a)^2(f(b) - f(c)) - (b-c)^2(f(b) - f(a))}{2((b-a)(f(b) - f(c)) - (b-c)(f(b) - f(a)))}$$

- ▶ možné problémy
 - ▶ vzorec najde maximum
 - ▶ jmenovatel je nulový nebo blízký nule
 - ▶ x zabloudí příliš daleko
- ▶ metoda problémy detekuje a vrací se k bezpečnému zlatému řezu
- ▶ důsledně zachovává separaci minima
- ▶ detaily viz literatura

Využití derivací

- ▶ naivní přístup - řešení $f'(x) = 0$
 - ▶ nerozliší minimum a maximum, potřebovali bychom ještě $f''(x) > 0$
- ▶ derivace nesouvisí přímo s bezpečnou separací
 - ▶ v jednom nebo obou krajních bodech může být směr „dolů“ zároveň „ven“
- ▶ derivace lze využít k přesnější aproximaci funkce
 - ▶ v jednom iteračním kroku se lépe přiblížíme skutečnému minimu
 - ▶ zlatý řez lineární, Brent kvadratický, ...

Využití derivací

- ▶ naivní přístup - řešení $f'(x) = 0$
 - ▶ nerozliší minimum a maximum, potřebovali bychom ještě $f''(x) > 0$
- ▶ derivace nesouvisí přímo s bezpečnou separací
 - ▶ v jednom nebo obou krajních bodech může být směr „dolů“ zároveň „ven“
- ▶ derivace lze využít k přesnější aproximaci funkce
 - ▶ v jednom iteračním kroku se lépe přiblížíme skutečnému minimu
 - ▶ zlatý řez lineární, Brent kvadratický, ...
- ▶ nemusí přinést očekávaný výsledek
 - ▶ polynom nepostihne exponenciální charakteristiky funkcí
 - ▶ výpočet derivací je zpravidla zatížen větší chybou
- ▶ celkově diskutabilní přínos
 - ▶ cena za vyhodnocení derivace je větší než potenciální zrychlení a zpřesnění výpočtu
 - ▶ zejména v případě hledání po přímce, kde reálně potřebujeme N parciálních derivací

Simplexová metoda

- ▶ také améba, resp. Nelder-Mead
- ▶ nevyžaduje derivace, robustní vůči singularitám apod.
- ▶ jednoduchá implementace
- ▶ nepřiliš efektivní

- ▶ také améba, resp. Nelder-Mead
- ▶ nevyžaduje derivace, robustní vůči singularitám apod.
- ▶ jednoduchá implementace
- ▶ nepřiliš efektivní
- ▶ N -rozměrný **simplex** je konvexní lineární „těleso“
 - ▶ definované $N + 1$ body
 - ▶ trojúhelník, čtyřstěn, ...
- ▶ metoda nechává simplex „plazit se“ po funkční hyperploše dolů

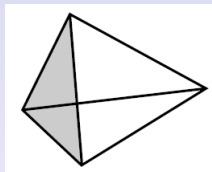
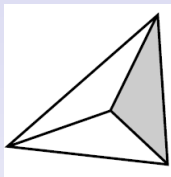
Simplexová metoda

- ▶ počáteční odhad minima \mathbf{P}_0 , definujeme další body simplexu

$$\mathbf{P}_i = \mathbf{P}_0 + \lambda e_i$$

kde λ odpovídá měřítku problému

- ▶ reflexe
 - ▶ nejvyšší bod simplexu (podle f) promítneme symetricky podle protilehlé stěny



Přehled

Metoda zlatého řezu

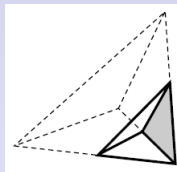
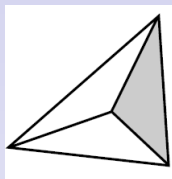
Brentova metoda

Simplexová metoda

Metoda sdružených směrů

Simplexová metoda

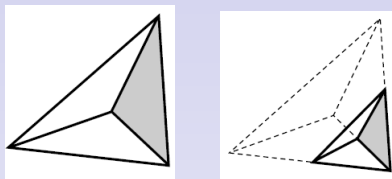
- ▶ kontrakce ve více dimenzích
 - ▶ ani kontrakce v jednom rozměru nepomohla
 - ▶ simplex se smrskne v $N - 1$ rozměrech směrem k nejlepšímu bodu



Simplexová metoda

- ▶ kontrakce ve více dimenzích

- ▶ ani kontrakce v jednom rozměru nepomohla
- ▶ simplex se smrskne v $N - 1$ rozměrech směrem k nejlepšímu bodu



- ▶ kritérium ukončení

- ▶ tolerance $\sqrt{\epsilon}$ v nezávislých proměnných, ϵ ve funkčních hodnotách, viz úvahy o jednorozměrném případě
- ▶ v praxi

$$\frac{2(f(x_H) - f(x_L))}{|f(x_H)| + |f(x_L)|} < \epsilon$$

kde x_H, x_L jsou nevyšší a nejnižší body simplexu

- ▶ umíme minimalizovat funkci jedné proměnné
- ▶ minimalizace funkce $f(\mathbf{x})$ více proměnných z bodu \mathbf{P} ve směru \mathbf{n} je minimalizace

$$f(\mathbf{P} + \lambda \mathbf{n})$$

v jedné proměnné λ

- ▶ postupně volíme směry \mathbf{n}
- ▶ bod \mathbf{P} nahradíme minimem v tomto směru, tj. $\mathbf{P} + \lambda_{\min} \mathbf{n}$
- ▶ pokračujeme v jiném směru
- ▶ jádrem metody je stanovení těchto směrů

Metoda sdružených směrů

- ▶ sdružené (konjugované) směry
 - ▶ následující krok „nepokazí“, co jsme získali předchozím
 - ▶ formulujeme precizněji
- ▶ v souřadném systému s počátkem \mathbf{P} lze psát

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}) &= f(\mathbf{P}) + \sum_i \frac{\partial f}{\partial x_i} x_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} + \dots \\ &\approx f(\mathbf{P}) - \mathbf{b}\mathbf{x} + \frac{1}{2} \mathbf{x}\mathbf{A}\mathbf{x} \end{aligned}$$

kde

$$\mathbf{b} \equiv -\nabla f|_{\mathbf{P}} \quad [\mathbf{A}]_{ij} \equiv \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} \right|_{\mathbf{P}}$$

- ▶ potom derivováním

$$\nabla f = \mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}$$

Metoda sdružených směrů

- ▶ předpokládejme, že směrem \mathbf{u} jsme minimalizovali
- ▶ v tomto bodě je ∇f kolmý k \mathbf{u} (tj. $\nabla f \mathbf{u} = 0$)
- ▶ chceme se vydat dál jen takovým směrem \mathbf{v} ,
že ∇f zůstane k \mathbf{u} kolmý

Metoda sdružených směrů

- ▶ předpokládejme, že směrem \mathbf{u} jsme minimalizovali
- ▶ v tomto bodě je ∇f kolmý k \mathbf{u} (tj. $\nabla f \mathbf{u} = 0$)
- ▶ chceme se vydat dál jen takovým směrem \mathbf{v} ,
že ∇f zůstane k \mathbf{u} kolmý
- ▶ změna ∇f ve směru \mathbf{v} tedy musí být také kolmá na \mathbf{u}

$$\nabla f|_{\mathbf{x}+\mathbf{v}} - \nabla f|_{\mathbf{x}} = \mathbf{A}(\mathbf{x} + \mathbf{v}) - \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x} + \mathbf{b} = \mathbf{A}\mathbf{v}$$

- ▶ stačí tedy vyžadovat $\mathbf{u}\mathbf{A}\mathbf{v} = 0$
- ▶ postupná minimalizace v N lineárně nezávislých
sdružených směrech přesně minimalizuje kvadratickou
formu

Metoda sdružených směrů

Původní Powellův algoritmus

- ▶ začneme s $\mathbf{u}_i = \mathbf{e}_i$ a počátečním bodem \mathbf{P}_0
- ▶ postupně pro $i = 1, \dots, N$ minimalizujeme z \mathbf{P}_{i-1} směrem \mathbf{u}_i a získáme tak \mathbf{P}_i
- ▶ přejmenujeme směry $\mathbf{u}_i \leftarrow \mathbf{u}_{i+1}$ (zapomeneme tedy \mathbf{u}_1)
- ▶ nastavíme $\mathbf{u}_N \leftarrow \mathbf{P}_N - \mathbf{P}_0$
- ▶ minimalizujeme směrem \mathbf{u}_N a výsledek označíme jako nový \mathbf{P}_0

Metoda sdružených směrů

Původní Powellův algoritmus

- ▶ začneme s $\mathbf{u}_i = \mathbf{e}_i$ a počátečním bodem \mathbf{P}_0
- ▶ postupně pro $i = 1, \dots, N$ minimalizujeme z \mathbf{P}_{i-1} směrem \mathbf{u}_i a získáme tak \mathbf{P}_i
- ▶ přejmenujeme směry $\mathbf{u}_i \leftarrow \mathbf{u}_{i+1}$ (zapomeneme tedy \mathbf{u}_1)
- ▶ nastavíme $\mathbf{u}_N \leftarrow \mathbf{P}_N - \mathbf{P}_0$
- ▶ minimalizujeme směrem \mathbf{u}_N a výsledek označíme jako nový \mathbf{P}_0
- ▶ lze ukázat (Powell, 1964), že k opakování vygeneruje k sdružených směrů

Metoda sdružených směrů

Problémy původního algoritmu

- ▶ opakované zapomínání \mathbf{u}_1 postupně vede k lineární závislosti \mathbf{u}_i
- ▶ metoda se tedy pohybuje jen v podprostoru \mathbb{R}^N
 - ▶ při více iteracích spočítá falešné řešení

Metoda sdružených směrů

Problémy původního algoritmu

- ▶ opakované zapomínání \mathbf{u}_1 postupně vede k lineární závislosti \mathbf{u}_i
- ▶ metoda se tedy pohybuje jen v podprostoru \mathbb{R}^N
 - ▶ při více iteracích spočítá falešné řešení
- ▶ degenerující systém \mathbf{u}_i lze nahradit po $> N$ iteracích
 - ▶ znovu e_i
 - ▶ vlastními vektory \mathbf{A} , je-li k dispozici
- ▶ nezapomínat vždy \mathbf{u}_1 , ale ten směr, kterým jsme nevíce získali
 - ▶ odpovídá dosažení dna údolí
 - ▶ naruší striktní udržování sdruženosti směrů
 - ▶ je třeba kompenzovat - v jistých případech se ponechá původní sada \mathbf{u}_i

- ▶ implementujte vizualizaci postupu optimalizačních metod
- ▶ statické zobrazení grafu funkce
- ▶ animovaný postup kroků metod
 - ▶ transformace simplexu
 - ▶ jednotlivé kroky separace minima a vlastní minimalizace po přímce
 - ▶ vhodná podoba stopy předchozích kroků
- ▶ současné zobrazení více metod pro srovnání
 - ▶ příště probereme další
- ▶ implementace numerických metod najdete na ISu
 - ▶ bude třeba doplnit je o zpětná volání animace
- ▶ odevzdejte funkční kód (Linux/Windows)
 - ▶ pustíme si na přednášce
 - ▶ předběžný termín 21. 4. 2011

Přehled

Metoda zlatého řezu

Brentova metoda

Simplexová metoda

Metoda sdružených směrů

- ▶ možnosti zobrazení
 - ▶ jen 2D, funkce 2 proměnných, funkční hodnota na škále černá - bílá
 - ▶ částečně 3D, funkce 2 proměnných, graf jako zakřivená plocha
 - ▶ plně 3D, funkce 3 proměnných, „graf“ jen naznačením významných bodů, postup minimalizace jako pentlička/trubka, barevně kódovaná funkční hodnota
- ▶ minimalizované funkce
 - ▶ analyticky generované, např. deformované elektrostatické pole několika bodových nábojů

$$f(\mathbf{x}) = \sum_i \frac{1}{|\mathbf{A}_i(\mathbf{x} - \mathbf{b}_i)|} + \mathbf{x} \Lambda \mathbf{x}$$

- ▶ výškové mapy (např. <http://hme.sourceforge.net/>)