PA081: Programování numerických výpočtů

6. Optimalizace

Aleš Křenek

jaro 2013

Řešený problém

- hledání minima funkce $f : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}$
  - 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

Klasifikace metod

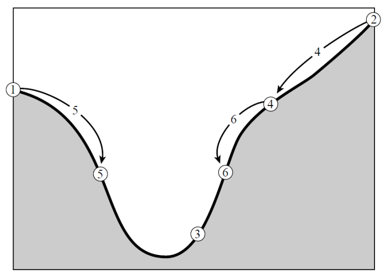
- jednorozměrné metody
  - zlatý řez – robustní, relativně pomalá
  - Brentova – interpolace parabolou
  - využití derivací je v 1D diskutabilní
  - většina vícerozměrných metod využívá jednorozměrné
- vícerozměrné metody
  - simplex (améba) – jednoduchá a robustní, pomalá
  - sdružené směry (Powell) – 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, b, x, jinak s b, x, c



Metoda zlatého řezu

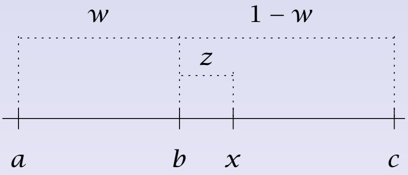
Určení poměru

- jak vybrat optimálně bod x?
- uvažujme poměry

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

- 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 $w+z = 1-w$

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

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 funční hodnoty, tj. $|f(b) - f(x)| < |f(b)|\epsilon$
- Taylorův rozvoj

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

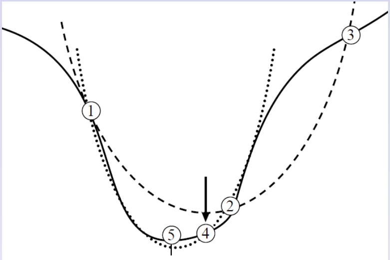
  a tedy po úpravách

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

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

Brentova metoda

- analogie metody pro řešení rovnic
- v okolí minima lze funkci dobře aproximovat parabolou
  - optimistická hypotéza
  - platí pro mnoho reálně používaných funkcí



- parabolickou interpolací lze dosáhnout kvadratické konvergence

Brentova metoda

- 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

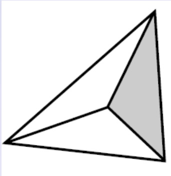
- také améba, resp. Nelder-Mead
- nevyžaduje derivace, robustní vůči singularitám apod.
- jednoduchá implementace
- nepříliš efektivní

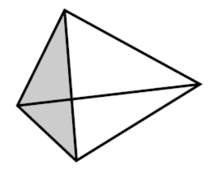
Simplexová metoda

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

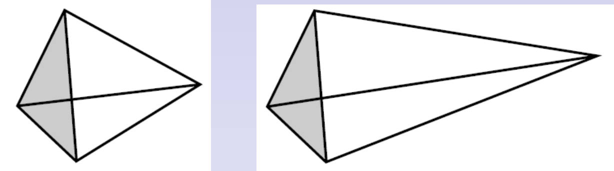
- počáteční odhad minima $\mathbf{P}_0$, definujeme další body simplexu
$$\mathbf{P}_i = \mathbf{P}_0 + \lambda e_i$$
kde λ odpovídá měřítku problému
- reflexe
  - nejvyšší bod simplexu (podle f) promítneme symetricky podle protilehlé stěny



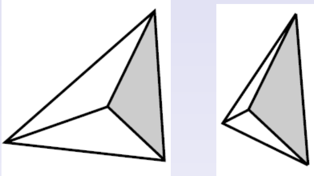


Simplexová metoda

- expanze
  - je-li výsledek reflexe lepší než nejnižší předchozí bod
  - zkusíme protáhnout simplex na dvojnásobnou délku slibným směrem

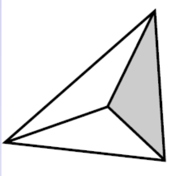


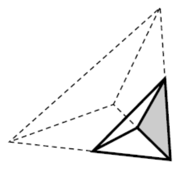
- kontrakce
  - v případě, kdy reflexe nepomohla
  - simplex se smrskne v jednom rozměru od nejvyššího bodu



Simplexová metoda

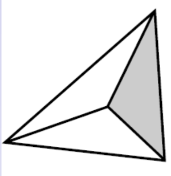
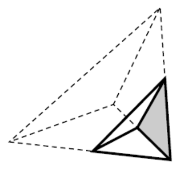
- kontrakce ve více dimenzích
  - ani kontrakce v jednom rozměru nepomohla
  - simplex se smrskne v $N - 1$ rozměrech směrem k nejlepšímu bodu





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

Metoda sdružených směrů

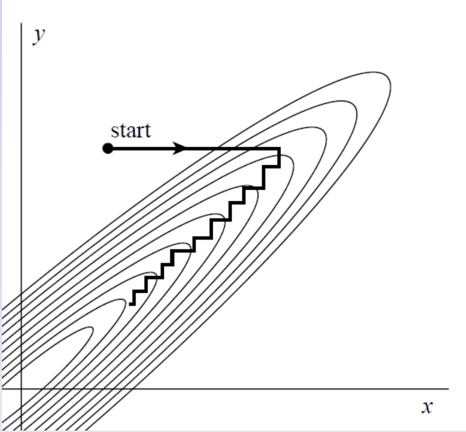
- umíme minimalizovat funkci jedné proměnné
- minimalizace funkce $f(\mathbf{x})$ více proměnných z bodu $\mathbf{P}$ ve směru $\mathbf{n}$ je minimalizace

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

  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

- naivní přístup – souřadné osy



- nevyvážené vlastní hodnoty matice druhých derivací
- obecně to není tak zlé

Metoda sdružených směrů

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

$$f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{P}) + \sum_i \frac{\partial f}{\partial x_i} x_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} x_i x_j + \dots$$

$$\approx f(\mathbf{P}) - \mathbf{bx} + \frac{1}{2}\mathbf{xAx}$$

kde

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

- potom derivováním

$$\nabla f = \mathbf{Ax} - \mathbf{b}$$

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 $\mathbf{uAv} = 0$
- postupná minimalizace v N lineárně nezávislých sdružených směrech přesně minimalizuje kvadratickou formu

Metoda sdružených směrů

Původní Powellův algoritmus

- začneme s $\mathbf{u}_i = e_i$ a počátečním bodem $\mathbf{P}_0$
- postupně pro $i = 1, \ldots, N$ 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 $\mathbf{u}_i = e_i$ a počátečním bodem $\mathbf{P}_0$
- postupně pro $i = 1, \ldots, N$ 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 $\mathbf{u}_i$

Ukázka chování algoritmu

- molekula cyklohexanu, v počáteční konformaci „židlička“
- násilím ji zdeformujeme vychýlením jednoho atomu
- minimalizujeme funkci „ošklivosti“
  - vyjádřena jako odchylky délek vazeb a úhlů mezi sousedními vazbami
  - přibližně odpovídá potenciální energii
- zpětná volání z minimalizační funkce
  - vizualizace chování metody minimalizace
- dvě varianty
  - zafixovaný vychýlený atom, polohu hledají jen dva další
  - uvolněný i vychýlený atom, vrátí se zpět nebo do „lodičky“

Využití derivací

Naivní přístup

- vedle funkčních hodnot umíme spočítat i gradient ∇f
- metoda největšího spádu
  - vektor $-\nabla f$ určuje směr „dolů“
  - tímto směrem minimalizujeme
  - v dalším kroku se vydáme opět po gradientu

Využití derivací

Naivní přístup

- vedle funkčních hodnot umíme spočítat i gradient ∇f
- metoda největšího spádu
  - vektor $-\nabla f$ určuje směr „dolů“
  - tímto směrem minimalizujeme
  - v dalším kroku se vydáme opět po gradientu
- stejné riziko postupu velmi krátkými kroky
  - v jednom kroku netrefíme dno údolí přesně
  - další musí být kolmo

Využití derivací

Sdružené gradienty

- posloupnost bodů $\mathbf{P}_i$, gradientů $\mathbf{g}_i$ a směrů $\mathbf{h}_i$
  $\mathbf{g}_i \cdot \mathbf{g}_j = 0 \quad \mathbf{h}_i \mathbf{A} \mathbf{h}_j = 0 \quad \mathbf{g}_i \cdot \mathbf{h}_j = 0 \qquad$ pro $j < i$

Využití derivací

Sdružené gradienty

- posloupnost bodů $\mathbf{P}_i$, gradientů $\mathbf{g}_i$ a směrů $\mathbf{h}_i$
  $\mathbf{g}_i \cdot \mathbf{g}_j = 0 \quad \mathbf{h}_i \mathbf{A} \mathbf{h}_j = 0 \quad \mathbf{g}_i \cdot \mathbf{h}_j = 0 \qquad \text{pro } j < i$
- algoritmus Fetcher-Reeves
  - minimalizace z $\mathbf{P}_i$ směrem $\mathbf{h}_i$, získáme $\mathbf{P}_{i+1}$
  - $\mathbf{g}_{i+1} := -\nabla f(\mathbf{P}_{i+1})$
  - $\mathbf{h}_{i+1} := \mathbf{g}_{i+1} + \gamma_i \mathbf{h}_i \quad \text{kde} \quad \gamma_i = \frac{\mathbf{g}_{i+1} \cdot \mathbf{g}_{i+1}}{\mathbf{g}_i \cdot \mathbf{g}_i}$
  - důkaz pro kvadratickou formu mechanický

Využití derivací

Sdružené gradienty

- posloupnost bodů $\mathbf{P}_i$, gradientů $\mathbf{g}_i$ a směrů $\mathbf{h}_i$
  $\mathbf{g}_i \cdot \mathbf{g}_j = 0 \quad \mathbf{h}_i \mathbf{A} \mathbf{h}_j = 0 \quad \mathbf{g}_i \cdot \mathbf{h}_j = 0 \qquad \text{pro } j < i$
- algoritmus Fetcher-Reeves
  - minimalizace z $\mathbf{P}_i$ směrem $\mathbf{h}_i$, získáme $\mathbf{P}_{i+1}$
  - $\mathbf{g}_{i+1} := -\nabla f(\mathbf{P}_{i+1})$
  - $\mathbf{h}_{i+1} := \mathbf{g}_{i+1} + \gamma_i \mathbf{h}_i \quad \text{kde} \quad \gamma_i = \frac{\mathbf{g}_{i+1} \cdot \mathbf{g}_{i+1}}{\mathbf{g}_i \cdot \mathbf{g}_i}$
  - důkaz pro kvadratickou formu mechanický
- varianta Polak-Ribiere

$$\gamma_i = \frac{(\mathbf{g}_{i+1} - \mathbf{g}_i) \cdot \mathbf{g}_{i+1}}{\mathbf{g}_i \cdot \mathbf{g}_i}$$

  - pro kvadratickou formu ekvivalentní
  - empiricky lepší výsledky pro složitější funkce
  - když dojde dech, vrací se ke gradientům

Využití derivací

Má to smysl?

- menší sklon k degeneraci
  - použití gradientu vnáší čerstvou informaci do sady směrů
  - neubývá dimenzí prohledávaného prostoru

Využití derivací

Má to smysl?

- menší sklon k degeneraci
  - použití gradientu vnáší čerstou informaci do sady směrů
  - neubývá dimenzí prohledávaného prostoru
- Powellova metoda potřebuje N^2 minimalizací v 1D
  - minimalizace v 1D cca. 5–10 vyhodnocení funkce (kvadratická konvergence, přesnost $\sqrt{\epsilon}$)
- Fletcher-Reeves – stačí N kroků
  - $1\times$ minimalizace v 1D
  - výpočet N parciálních derivací
  - derivace mohou recyklovat společné podvýrazy

Domácí úkol

Vybranou minimalizační metodou implementujte jednoduchý model interakce dvou molekul.

- je dána cílová poloha – energetické minimum (pdb)
- volné proměnné pro minimalizaci:
  - vektor polohy $\mathbf{x}$ – molekula se může volně pohybovat
  - vyjádření rotace – tři úhly nebo kvaternion
- minimalizovat začínáme z vychýlené polohy
- při vyjádření rotace kvaternionem je třeba silně penalizovat jeho odchylku od jednotkového (molekula by se deformovala)
- odchýlení od cílové polohy penalizujte modelem vhodně tuhé pružiny

$$F = k\Delta\mathbf{x} \qquad \text{tj.} \qquad E = \frac{1}{2}k|\Delta\mathbf{x}|^2$$

Domácí úkol

- libovolná dvojice atomů na sebe působí van der Waalsovou silou, odpovídá energii

$$E = \frac{\sigma^{12}}{r^{12}} - \frac{\sigma^6}{r^6}$$

  kde r je vzálenost atomů. Působí mírně přitažlivě na dálku, silně odpudivě na blízko. Použijte realistické $\sigma = 2.7$
- pro vizualizaci použijte VMD `http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/`
  - připojení k serveru příkazem „imd connect hostname port"
  - implementaci serveru použijte z ukázkového příkladu

Domácí úkol

- přijďte se zeptat, nebudete-li si vědět rady
- můžete si vymyslet i jiný obdobně složitý příklad
- kvalitní implementace – zápočet nebo 2 body ke zkoušce

Shrnutí

- hledání minima funkcí jedné nebo více proměnných
- jednorozměrné metody
  - zlatý řez – odpovídá půlení intervalu pro řešení rovnic
  - Brentova metoda (přímá analogie řešení rovnic)
  - v 1D nemá příliš smysl používat derivace
  - základ vícerozměrných optimalizací
- vícerozměrné metody
  - jednoduchá simplexová
  - sdružené směry bez i s derivacemi (Powell, Fletcher-Reeves)
  - (semi)newtonovské metody (Hessián)
- více viz PV027 Optimalizace