Optimalizace bez omezení (unconstraint)

Nederivační (ad hoc) metody

- Jednoduché metody
- Nelder-Meadova (simplexová) metoda

Derivační metody

- *První derivace*
  - Metoda největšího spádu + další spádové metody
  - Metoda konjugovaných gradientů
- *Druhá derivace*
  - Newton-Raphsonova metoda
  - Quasi-Newtonova metoda

Spádové metody
- *obecně*

Jsou založeny na stejném principu jako metoda největšího spádu:

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \alpha.\mathbf{s}^{(k)}, \text{ kde:}$$

$\mathbf{s}^{(k)}$ je **směr přesunu** z bodu $\mathbf{x}^{(k)}$,

nejčastěji jako směr volíme $-\mathbf{g}^{(k)}$

α koeficient, popisující **délku daného přesunu**

Využívají sofistikovanější metody k určení koeficientu α.

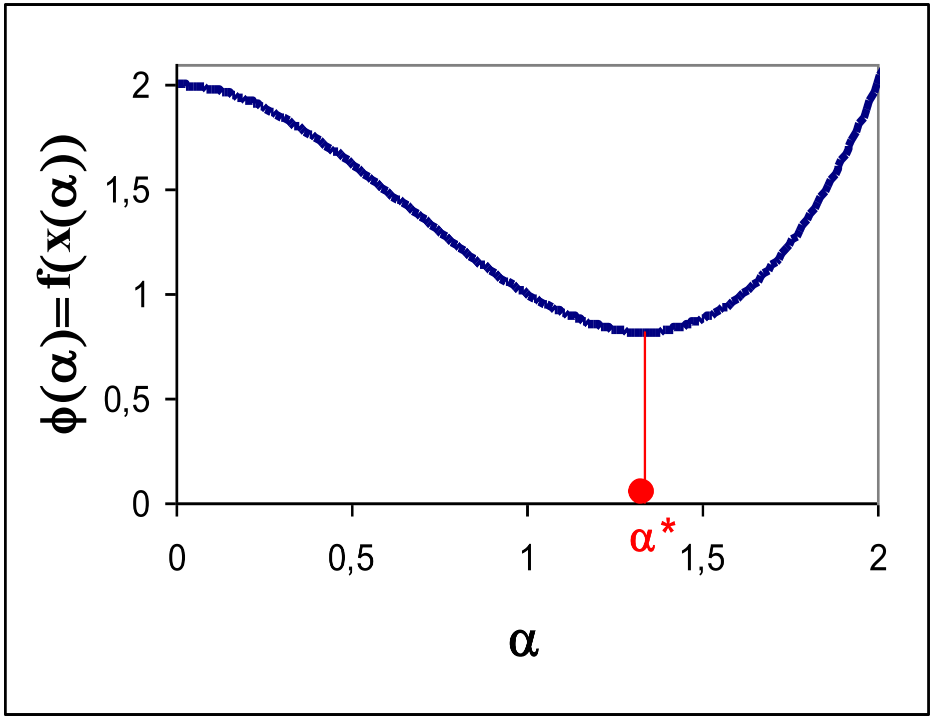
Hodnota koeficientu α je různá pro každou iteraci.

Spádové metody
- *obecně II*

Podmínka pro ideální hodnotu (α^*) koeficientu α:

funkce $\phi(\alpha) = f(x(\alpha))$ má v α^* minimum [1]

Poznámka: Jedná se o nejmenší hodnotu α, v níž má $\phi(\alpha)$ minimum. Navíc samozřejmě platí $\alpha > 0$.



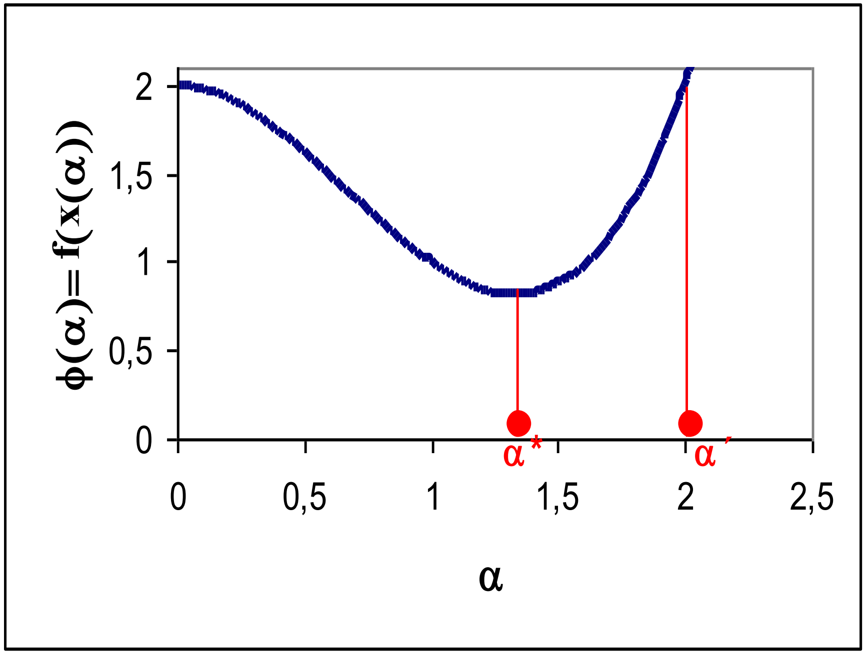
Tuto podmínku nelze využít k volbě koeficientu α.

Potřebujeme totiž určit hodnotu α pro danou iteraci v konečném a pokud možno velmi malém počtu kroků.

Spádové metody

- *obecně III*

Předpokládejme, že funkce f má průběh naznačený na obrázku.



Pak existuje $\alpha > 0$ tak, že:
$f(x^{(k)} + \alpha s^{(k)}) = f(x^{(k+1)})$

Nejmenší takové α označujeme α'.

=> Nutné podmínky pro koeficient α:

$$0 < \alpha < \alpha' \qquad [2]$$

Spádové metody

- *obecně IV*

=> Při volbě koeficientu a musíme dodržet podmínky [2] a co nejvíce se přiblížit podmínce [1].

Metody pro nalezení α:

- Goldsteinovy podmínky
- Wolfe-Powellovy podmínky

Značení:

$f(x^{(k+1)}) = f(x^{(k)} + \alpha.s^{(k)})$ budeme značit $\phi(\alpha)$

$f(x^{(k)})$ budeme značit $\phi(0)$

Spádové metody
- Goldsteinovy podmínky I

1. Goldsteinova podmínka zaručuje, že α nebude zvoleno příliš blízko α':

$$\phi(\alpha) \leq \phi(0) + \rho.\alpha.\phi'(0)$$

Parametr ρ je zde pevně zvolené číslo z intervalu (0, ½).

I když α' neexistuje {tj. $\phi(\alpha) < \phi(0)$ pro všechna $\alpha > 0$}, je 1GP schopna omezit volbu $\alpha^{(k)}$. (Pokud je tedy funkce f zdola omezená.)

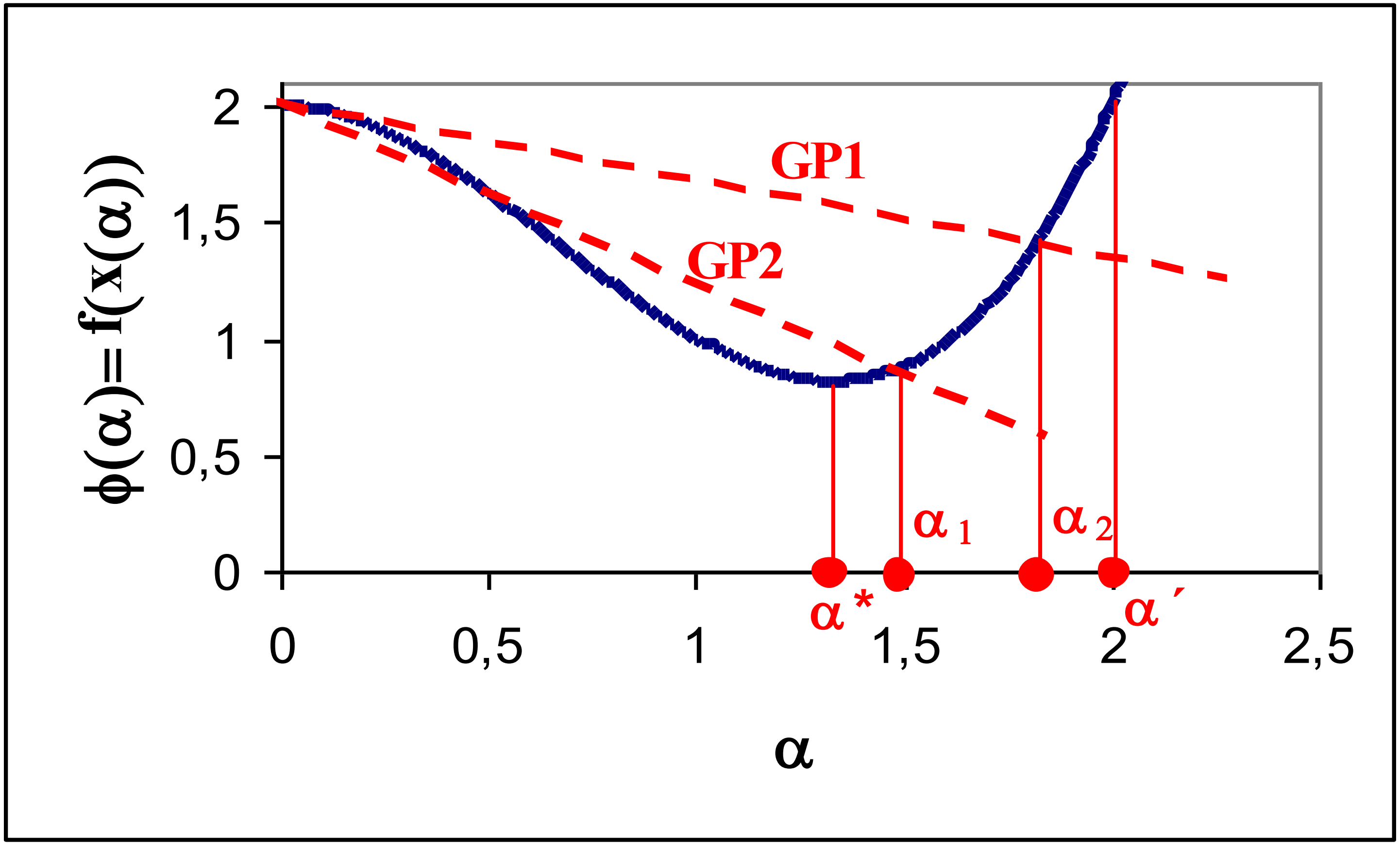
Spádové metody
- *Goldsteinovy podmínky II*

2. Goldsteinova podmínka zaručuje, že α nebude zvoleno příliš blízko 0:

$$\phi(\alpha) \geq \phi(0) + (1-\rho).\alpha.\phi'(0)$$

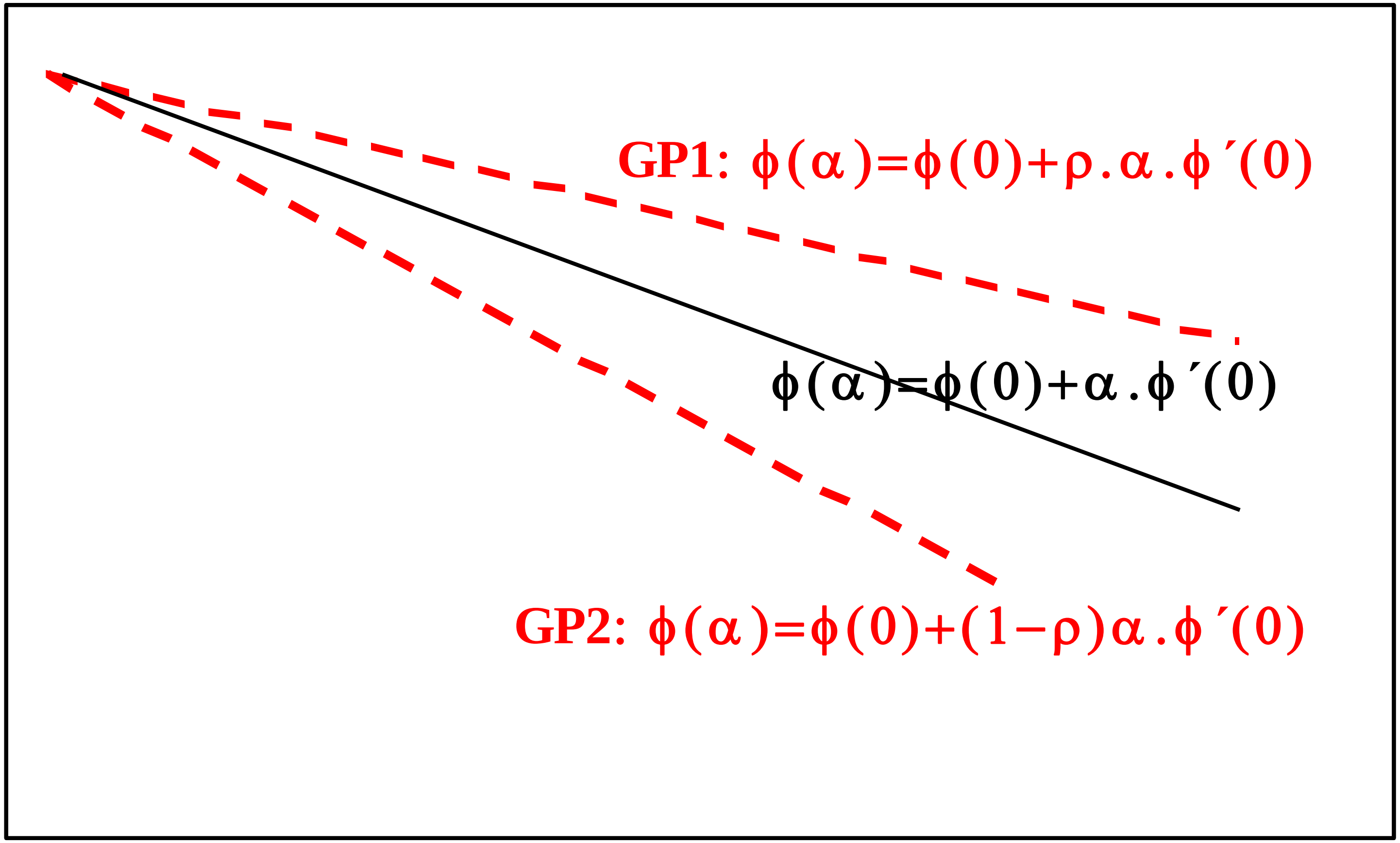
Pravé strany Goldsteinových podmínek určují dvě přímky se zápornou směrnicí. Hodnoty α_1 a α_2, které přísluší průsečíkům těchto přímek s $\phi(\alpha)$, určují interval vhodných hodnot α.

Spádové metody
- Goldsteinovy podmínky III



Spádové metody
- *Goldsteinovy podmínky IV*

Zdůvodnění Goldsteinových podmínek:



Spádové metody
- Goldsteinovy podmínky V

Věta: Nechť funkce f je spojitě diferenciovatelná a nechť její gradient $\mathbf{g} = \nabla f$ je lipschitzovsky spojitý na R^n.

Je-li $\{\mathbf{x}^{(k)}\}$ posloupnost generována spádovou metodou a volba a vyhovuje Goldsteinovým podmínkám, pak platí:

$$f(\mathbf{x}^{(k)}) - f(\mathbf{x}^{(k-1)}) \geq -\rho.\mathbf{g}^{(k)}.\boldsymbol{\delta}^{(k)}$$

$$\text{kde } \boldsymbol{\delta}^{(k)} = \alpha^{(k)}\mathbf{s}^{(k)} = \mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^{(k)}$$

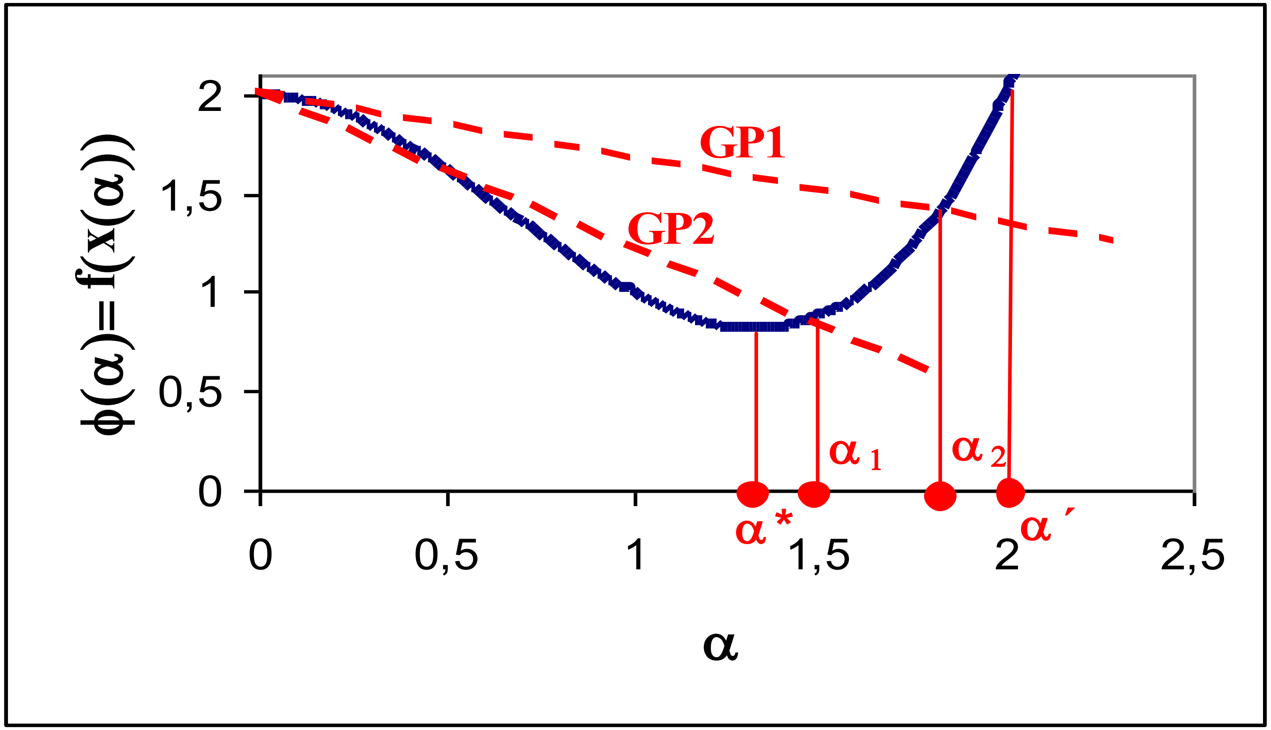
=> Metoda vždy konverguje k minimu funkce f (pro vhodné ρ).

Poznámka: Volba koeficientu $\rho < ½$ zaručuje konvergenci metody pro kvadratické funkce.

Spádové metody
- Goldsteinovy podmínky VI

Nevýhoda Goldsteinových podmínek:

V intervalu mezi α_1 a α_2 se nemusí nacházet minimum funkce $\phi(\alpha)$.



Spádové metody
- *Wolfe-Powellovy podmínky*

Místo GP2 se testuje sklon funkce $\phi(\alpha)$ v bodě α.

Využívá se tedy následující podmínka:

$$\left|\phi'(\alpha)\right| \leq \sigma \left|\phi'(0)\right|$$

kde $\sigma \in (\rho, 1)$.

Spádové metody

- Wolfe-Powellovy podmínky II