

# Úvod do optimalizace

Matematické metody pro ITS (11MAMY)

Jan Příkryl (volně dle M.T. Heath)

13. přednáška 11MAMY

čtvrtek 15. března 2018

verze: 2018-03-18 09:38

## Obsah

<i>Optimalizační problém</i>	1
<i>Definice</i>	1
<i>Existence a jednoznačnost minima</i>	2
<i>Podmínky optimality</i>	3
<i>Jednorozměrná optimalizace</i>	4
<i>Hledání zlatým řezem</i>	4
<i>Vícerozměrná optimalizace</i>	6
<i>Přímé metody</i>	6
<i>Gradientní metody</i>	6
<i>Lineární programování</i>	7

Tento text je doplněnou a počeštěnou verzí podkladů k přednáškám podle 6. kapitoly knihy Michaela T. Heath *Scientific Computing — An Introductory Survey*<sup>1</sup>. Jde do jisté míry o experimentální pískoviště na odladění převodu textu prezentace vytvořené v L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>Xové třídě beamer do textu vysázeného pomocí tufte-handout. Obsah je oproti prezentaci mírně rozšířen o poznámky. Bude se ještě v průběhu semestru měnit, kontrolujte si prosím čas sestavení v záhlaví tohoto souboru.

## Optimalizační problém

■ **todo** ■

### Definice

■ **todo** ■

**Definice 1** (Optimalizační problém). Mějme danou funkci  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  a množinu  $\mathcal{S} \subseteq \mathbb{R}^n$ . Nalezněte  $\mathbf{x}^* \in \mathcal{S}$  takové, že  $f(\mathbf{x}^*) \leq f(\mathbf{x})$  pro všechna  $\mathbf{x} \in \mathcal{S}$ .

$\mathbf{x}^*$  nazýváme *optimum* nebo *minimum* funkce  $f$

Stačí uvažovat minimalizaci: maximum  $f$  je minimum  $z - f$

Účelová (cílová) funkce  $f$  je obvykle diferencovatelná a může být jak lineární, tak i nelineární

Přípustná množina (často také množina omezení)  $\mathcal{S}$  je definována soustavou lineárních nebo nelineárních rovnic a nerovnic

Body  $\mathbf{x} \in \mathcal{S}$  nazýváme *přípustné body*

Pokud platí  $\mathcal{S} = \mathbb{R}^n$ , jde o *neomezený* optimalizační problém

Základní spojité optimalizační problém lze zapsat jako

$$\min f(\mathbf{x}) \text{ pokud } g(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \text{ a } h(\mathbf{x}) \leq \mathbf{0}.$$

**Definice 2** (Lineární programování). Funkce  $f$ ,  $g$  a  $h$  jsou lineární.

**Definice 3** (Nelineární programování). Alespoň jedna z funkcí  $f$ ,  $g$  a  $h$  je nelineární.

- Minimalizujte hmotnost konstrukce při dodržení omezujících podmínek na její pevnost.
- Maximalizujte pevnost konstrukce při dodržení omezujících podmínek na její hmotnost.
- Minimalizujte náklady na potravu za podmínek minimálního příjmu určitých živin.
- Minimalizujte povrch válce daného objemu:

$$\min_{r,h} f(r,h) = 2\pi r(r+h)$$

$$\text{za podmínky } g(r,h) = \pi r^2 h - V = 0,$$

kde  $r$  a  $h$  jsou poloměr a výška válce a  $V$  je jeho požadovaný objem

**Definice 4** (Globální minimum). Bod  $\mathbf{x}^* \in \mathcal{S}$  je globálním minimem  $f$ , pokud  $f(\mathbf{x}^*) \leq f(\mathbf{x})$  pro všechna  $\mathbf{x} \in \mathcal{S}$ .

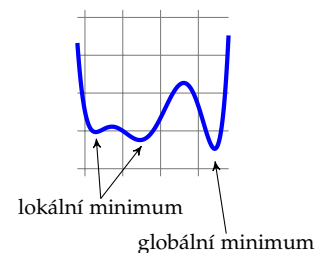
**Definice 5** (Lokální minimum). Bod  $\mathbf{x}^* \in \mathcal{S}$  je lokálním minimem  $f$ , pokud  $f(\mathbf{x}^*) \leq f(\mathbf{x})$  pro všechna přípustná  $\mathbf{x}$  v okolí bodu  $\mathbf{x}^*$ .

Najít globální minimum či ověřit jeho existenci je obecně velmi obtížné

Většina optimalizačních metod je navržena na hledání lokálních minim, která mohou, ale nemusí být i globálním minimem

Pokud hledáme globální minimum, můžeme zkusit několik široce rozprostřených startovacích bodů a ověřit, že konvergují k tomu samému výsledku

Pro určité problémy (například pro lineární programování) je nalezení globálního optima výpočetně schůdné



Obrázek 1: Globální a lokální minimum funkce

## Existence a jednoznačnost minima

### ■ zde vynechán kus Heathe o koercivitě a level-sets ■

Množina  $S \subseteq \mathbb{R}^n$  je *konvexní*, pokud obsahuje i úsečku spojující libovolné dva body z této množiny.

Funkce  $f : S \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  je *konvexní* na konvexní množině  $S$ , pokud její graf mezi dvěma libovolnými hodnotami z  $S$  leží na nebo pod úsečkou, spojující funkční hodnoty na koncových bodech úsečky.

Jakékoliv lokální minimum konvexní funkce  $f$  na konvexní množině  $S \subseteq \mathbb{R}^n$  je zároveň globálním minimem  $f$  na  $S$

Jakékoliv lokální minimum *striktně* konvexní funkce  $f$  na konvexní množině  $S \subseteq \mathbb{R}^n$  je zároveň *jednoznačným* globálním minimem  $f$  na  $S$

## Podmínky optimality

Pro funkci jedné proměnné hledáme extrémy jako nulové body první derivace

Obdobně u funkcí  $n$  proměnných hledáme *kritické body*, tedy řešení nelineární úlohy

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \mathbf{0},$$

kde  $\nabla f(\mathbf{x})$  je gradientní vektor (prvky jsou  $\partial f(\mathbf{x})/\partial x_i$ )

Pokud je  $f : S \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  spojitě diferencovatelná, každý vnitřní bod  $\mathbf{x}^*$  množiny  $S$ , na němž nabývá  $f$  lokálního minima, musí být kritickým bodem  $f$

*Ne každý kritický bod je ale minimem:* může jít i o maxima či sedlové body.

**Definice 6** (Hessián). Hessián funkce  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  je symetrická  $n \times n$  matice

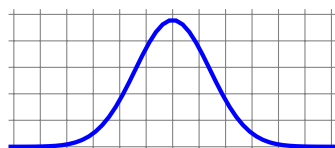
$$\mathbf{H}_f(\mathbf{x}) = \nabla^2 f(\mathbf{x}) = \left( \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_i \partial x_j} \right).$$

Hessián umožňuje určit typ kritického bodu funkce: Je-li  $\mathbf{H}_f(\mathbf{x}^*)$

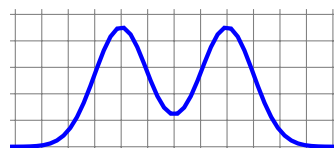
- pozitivně definitní, pak  $\mathbf{x}^*$  je minimem  $f$ ,
- negativně definitní, pak  $\mathbf{x}^*$  je maximem  $f$ ,
- indefinitní, pak  $\mathbf{x}^*$  je sedlový bod  $f$ ,
- singularní, pak nastávají různé patologické situace.

Pro minimalizaci funkce jedné proměnné potřebujeme „uzávorkovat“ interval řešení analogicky k uzavorkování intervalu změny znaménka při řešení nelineárních rovnic.

S existencí extrémní hodnoty (maxima nebo minima) funkce spojujeme pojem *mód*. Pokud nějaký matematický objekt (typicky pravděpodobnostní distribuce nebo funkce) nabývá pouze jednoho maxima na nějakém intervalu hodnot, říkáme, že tento objekt je *unimodální*.



unimodální



bimodální

Víme, že  $\min f = \max -f$ , unimodalitu tedy můžeme definovat i v kontextu minimalizace:

**Definice 7** (Unimodalita). Reálná funkce  $f$  je unimodální na intervalu  $\langle a, b \rangle$  v případě, že existuje jedinečné  $x^* \in \langle a, b \rangle$  takové, že  $f(x^*)$  je minimum  $f$  na  $\langle a, b \rangle$  a  $f$  je striktně klesající pro  $x \leq x^*$  a striktně rostoucí pro  $x \geq x^*$ .

Jak uvidíme dále, unimodalita funkce umožňuje vyřazení části intervalu na základě vzorkování funkčních hodnot, analogicky s metodou půlení intervalu.

Mějme unimodální funkci  $f$  na  $\langle a, b \rangle$  a v tomto intervalu dva body  $x_1$  a  $x_2$  takové, že  $x_1 < x_2$

- Porovnáním funkčních hodnot  $f(x_1)$  a  $f(x_2)$  můžeme vyřadit buď interval  $\langle a, x_1 \rangle$  nebo  $\langle x_2, b \rangle$ , minimum bude ležet ve zbylém podintervalu.
- Při vhodné volbě stačí pro další iteraci jen jedno vyhodnocení funkce  $f$ , podobně jako u metody půlení intervalu
- Každý nový pár bodů se ale musí nacházet na relativních pozicích, které jsou totožné k relativní délce celého intervalu

## Jednorozměrná optimalizace

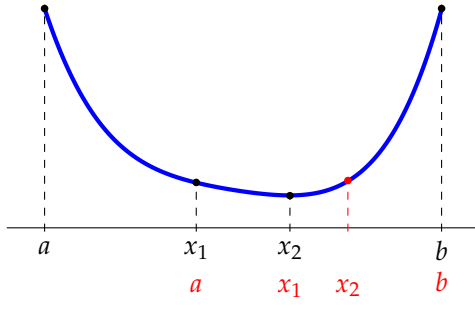
### Hledání zlatým řezem

Jednou z voleb je vybírat relativní pozice bodů takové, že body se nacházejí ve vzdálenostech  $\tau$  a  $1 - \tau$  od počátku, kde  $\tau^2 = 1 - \tau$  a tedy  $\tau = (\sqrt{5} - 1)/2 \approx 0,618$  a  $1 - \tau \approx 0,382$

Podintervaly budou mít relativní délku  $\tau$  původního intervalu a zbylý vnitřní bod bude na pozici buď  $\tau$  nebo  $1 - \tau$  vzhledem k délce podintervalu

Pro další iteraci tedy stačí vyhodnotit pouze jednu funkční hodnotu  $f$

Hledání zlatým řezem je bezpečný způsob minimalizace, jeho rychlost konvergence je ale pouze lineární s  $C \approx 0,618$



## Vícerozměrná optimalizace

### Přímé metody

Využívají pouze informace funkčních hodnotách účelové funkce a to pouze k jejich porovnání

Pro minimalizace funkce  $f$  o  $n$  proměnných, *Nelder-Meadova* metoda začíná s  $n + 1$  počátečními body  $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_{n+1}$  a vytváří tak *simplex* v  $\mathbb{R}^n$ .

Následuje posun po přímce spojující bod s nejvyšší funkční hodnotou  $\mathbf{x}^* = \arg \max_i f(\mathbf{x}_i)$  s centroidem ostatních bodů simplexu o krok délky  $\alpha$ .

Tento nový bod nahradí původní nejhorší bod a celý proces se opakuje.

Přímé metody jsou vhodné pro nehladké funkce a pro malá  $n$ , ale drahé pro velká  $n$ . Proč?

### Gradientní metody

Diferenciální (gradientní) metody vyžadují určování hodnot účelové funkce a její první, respektive druhé derivace

Nechť je  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  reálná funkce  $n$  proměnných: V jakémkoliv bodě  $\mathbf{x}$  s nenulovým gradientem ukazuje  $-\nabla f(\mathbf{x})$  směrem k nižším hodnotám  $f$

Hodnota  $-\nabla f(\mathbf{x})$  vlastně udává spádnici: funkční hodnoty  $f$  klesají ve směru negativního gradientu rychleji, než jakýmkoliv jiným směrem

**Definice 8** (Metoda největšího spádu). Od nástřelu  $\mathbf{x}_0$  pokračujeme iteracemi

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \alpha_k \nabla f(\mathbf{x}_k),$$

kde  $\alpha_k$  udává *délku kroku* získanou pomocí metody spádových směrů (angl. *line-search*).

**Definice 9** (Metoda spádových směrů). Známe-li směr sestupu  $-\nabla f(\mathbf{x}_k)$ , hodnotu  $\alpha_k$  určíme jako

$$a_k = \arg \min_{\alpha} f(\mathbf{x}_k - \alpha \nabla f(\mathbf{x}_k))$$

což je jednorozměrná optimalizační úloha.

Metoda největšího spádu je velmi spolehlivá (dokud je gradient nenulový)

Je ale „*krátkozraká*“: zkoumá pouze nejbližší okolí bodu  $\mathbf{x}_k$ , iterace proto často oscilují a metoda konverguje pomalu.

■ **Zmínit sdružené gradienty** ■

Rychlost konvergence (o níž jsme se nebavili) je pouze lineární, každá iterace tedy přidává konstantní počet platných číslic.

### Lineární programování

Nejběžnější a jedna z nejdůležitějších optimalizačních úloh

**Definice 10** (Lineární programování). Najdi

$$\mathbf{x}^* = \arg \min_{\mathbf{x}} \mathbf{c}^T \mathbf{x}$$

za podmínky  $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$  a  $\mathbf{x} \geq \mathbf{0}$ , kde  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ,  $m < n$ ,  $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$ ,  $\mathbf{c} \in \mathbb{R}^n$ ,  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ .

Přípustná oblast je konvexní polyhedron v  $\mathbb{R}^n$  a minimum je v nějakém jeho vrcholu

Řeší se pomocí *simplexové metody*: procházíme postupně všechny vrcholy, až najdeme minimum

Simplexová metoda je spolehlivá a obvykle efektivní: je schopna řešit problémy s tisíci proměnných, v nehorším případě ale může vyžadovat dobu exponenciálně úměrnou velikosti řešeného problému

*Metody vnitřního bodu* vyvinuté pro LP v posledních letech mají v nehorším případě polynomiální dobu řešení

Tyto metody se pohybují přes vnitřek přípustné oblasti, neomezuji se na vyšetřování pouze vrcholů polyhedronu

Ačkoli metody vnitřního bodu mají značný praktický význam, simplexová metoda stále ve standardních balíčcích pro LP převládá – její praktická účinnost je vynikající

*Příklad 1*: Lineární program

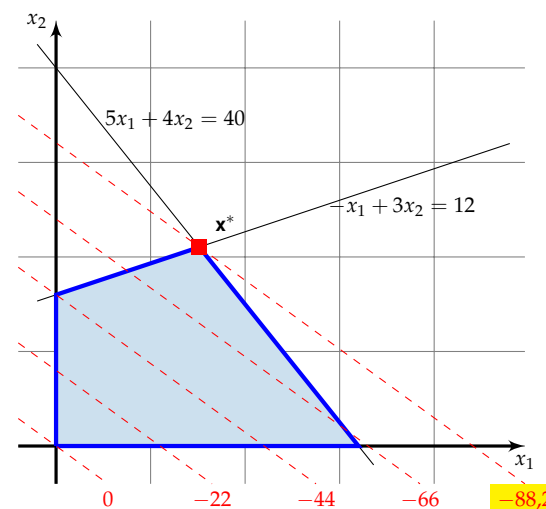
Uvažujme

$$\mathbf{x}^* = \arg \min_{\mathbf{x}} \mathbf{c}^T \mathbf{x} = -8x_1 - 11x_2$$

za podmínek

$$5x_1 + 4x_2 \leq 40, \quad -x_1 + 3x_2 \leq 12, \quad x_1 \geq 0, x_2 \geq 0$$

Minimum  $\mathbf{x}^*$  se musí nacházet v jednom z vrcholů přípustné oblasti, v tomto případě v bodě  $x_1 = 3,79$ ,  $x_2 = 5,26$ , v němž má cílová funkce hodnotu  $f(\mathbf{x}^*) = -88,2$ .



Obrázek 2: Řešení úlohy z Příkladu 1