Úvod do optimalizace

Matematické metody pro ITS (11MAMY)

Jan Přikryl (volně dle M.T. Heathe)

Ústav aplikované matematiky
ČVUT v Praze, Fakulta dopravní

13. přednáška 11MAMY
čtvrtek 15. března 2018

verze: 2018-03-18 09:38

Obsah přednášky

Optimalizace

Definice

Definice (Optimalizační problém)

Mějme dánu funkci $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ 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 nelinerární

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

Optimalizace

Lineární a nelineární programování

Základní spojitý optimalizační problém lze zapsat jako

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

Definice (Lineární programování)

Funkce f, $\boldsymbol{g}$ a $\boldsymbol{h}$ jsou lineární.

Definice (Nelineární programování)

Alespoň jedna z funkcí f, $\boldsymbol{g}$ a $\boldsymbol{h}$ je nelineární.

Optimalizace
Příklady

- 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

Optimalizace

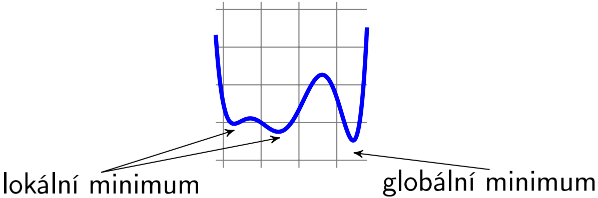
Lokální a globální optimalizace

Definice (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 (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 $\mathbf{x}^*$.



Optimailizace

Globální optimalizace

Najít globální minimum či ověřit jeho existenci je obecně velmi obtížné

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

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

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

Jednoznačnost minima

Konvexní optimalizace

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

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

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

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

Podmínky optimality prvního řádu

Derivace, gradient

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 $f : \mathcal{S} \subseteq \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ spojitě diferencovatelná, každý vnitřní bod $\mathbf{x}^*$ množiny $\mathcal{S}$, 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.

Podmínky optimality druhého řádu

Hessián

Definice (Hessián)

Hessián funkce $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ 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 $\mathbf{H}_f(\mathbf{x}^*))$

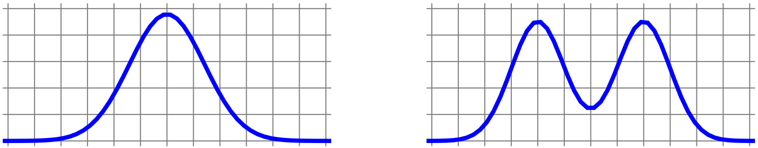
- pozitivně definitní, pak $\mathbf{x}^*$ je minimem f,
- negativně definitní, pak $\mathbf{x}^*$ je maximem f,
- indefinitní, pak $\mathbf{x}^*$ je sedlový bod f,
- singulární, pak nastávají různé patologické situace.

Unimodalita funkce

Co je to „mód“?

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

S existiencí maxima funkce spojujeme pojem mód.



unimodální bimodální

Unimodalita funkce

Definice

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

Definice (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 $x \geq x^*$.

Unimodalita umožňuje vyřazení části intervalu na základě vzorkování funkčních hodnot, analogicky s metodou půlení intervalu.

Unimodalita funkce

Praktické využití

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

Obsah přednášky

Hledání zlatým řezem

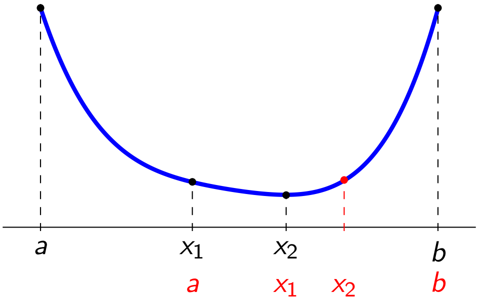
Jednou z voleb je vybírat relativní pozice bodů takové, že body se nacházejí ve vzdálenostech τ a $1-\tau$ od počátku, kde $\tau^2 = 1-\tau$ a tedy $\tau = (\sqrt{5}-1)/2 \approx 0{,}618$ a $1-\tau \approx 0{,}382$

Podintervaly budou mít relativní délku τ původního intervalu a zbylý vnitřní bod bude na pozici buď τ 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 $C \approx 0{,}618$

Hledání zlatým řezem



Obsah přednášky

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 $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \ldots, \mathbf{x}_{n+1}$ 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 α.

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?

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 α.

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

Metoda největšího spádu

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

Nechť je $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ 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

Gradientní metody

Metoda největšího spádu / Metoda spádových směrů

Definice (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 α_k udává délku kroku získanou pomocí metody spádových směrů (angl. *line-search*).

Definice (Metoda spádových směrů)

Známe-li směr sestupu $-\nabla f(\mathbf{x}_k)$, hodnotu α_k určíme jako

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

což je jednorozměrná optimalizační úloha.

Gradientní metody

Metoda největšího spádu

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.

Lineární programování

Nejběžnější a jedena z nejdůležitějších optimalizačních úloh

Definice (Lineární programování)

Najdi

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

za podmínky $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ 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

Lineární programování

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

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

Tyto metody se pohybují přes vnitřek přípustné oblasti, neomezují 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

Lineární programování

Příklad

Uvažujme

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

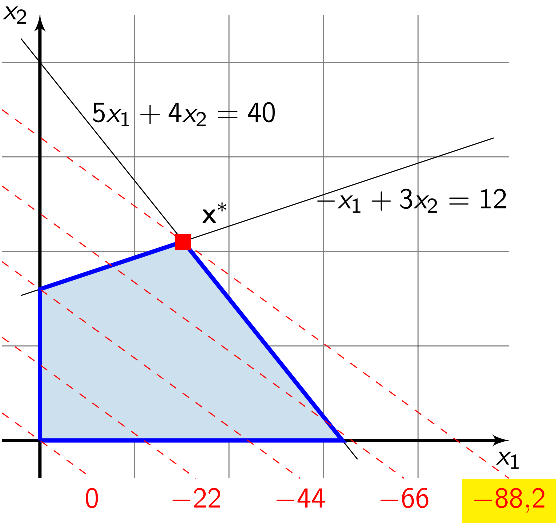
za podmínek

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

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 $f(\mathbf{x}^*) = -88{,}2$.

Lineární programování

Příklad



"You know, we're just not reaching that guy."