

# PA081: Programování numerických výpočtů

## 4. Optimalizace

Aleš Křenek

jaro 2019

- ▶ 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  $\sum f_i(\mathbf{x})^2$

Přehled

Metoda zlatého řezu

Brentova metoda

Simplexová metoda

Newtonovské metody

Metody sdružených směrů

Globální optimalizace

Základní metoda

Simulované žihání

Chlazení a délka kroku

Změny optimalizované funkce

Shrnutí

- ▶ globální metody
  - ▶ fyzikální analogie – simulované žihání
  - ▶ změny funkce – stochastické tunelování
  - ▶ střelba do vrabců
- ▶ metody s omezeními
  - ▶ COBYLA
  - ▶ L-BFGS-B
  - ▶ Sequential Quadratic Programming
- ▶ ... a spousty dalších

## Přehled

Metoda zlatého řezu

Brentova metoda

Simplexová metoda

Newtonovské metody

Metody sdružených směrů

Globální optimalizace

Základní metoda

Simulované žihání

Chlazení a délka kroku

Změny optimalizované funkce

Shrnutí

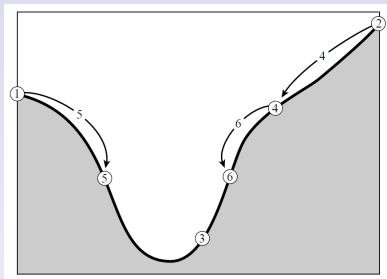
# Metoda zlatého řezu

- ▶ 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

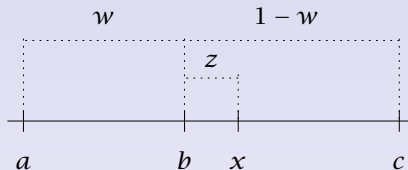
## Určení poměru

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

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

- ▶ 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  
metodaNewtonovské  
metodyMetody  
sdružených  
směrůGlobální  
optimalizaceZákladní  
metodaSimulované  
žiháníChlazení a  
délka krokuZměny  
optimalizované  
funkce

Shrnutí

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

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

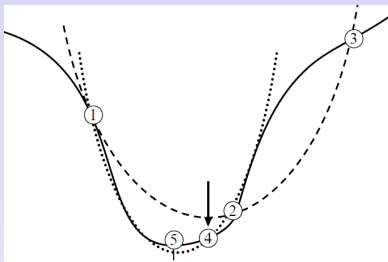
a tedy po úpravách

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

- ▶ velký zkomek je pro „normální“ funkce  $\sim 1$
- ▶ 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

- ▶ 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

Přehled

Metoda zlatého řezu

Brentova metoda

Simplexová metoda

Newtonovské metody

Metody sdružených směrů

Globální optimalizace

Základní metoda

Simulované žihání

Chlazení a délka kroku

Změny optimalizované funkce

Shrnutí

# 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

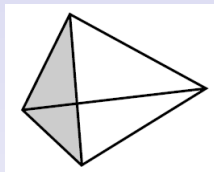
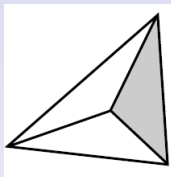
# Simplexová metoda

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

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

kde  $\lambda$  odpovídá měřítku problému

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



Přehled

Metoda zlatého řezu

Brentova metoda

Simplexová metoda

Newtonovské metody

Metody sdružených směrů

Globální optimalizace

Základní metoda

Simulované žihání

Chlazení a délka kroku

Změny optimalizované funkce

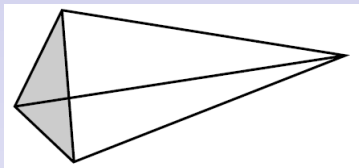
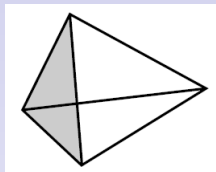
Shrnutí



# Simplexová metoda

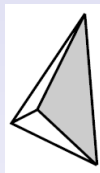
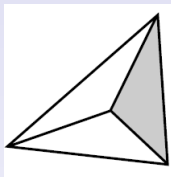
## ▶ expanze

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



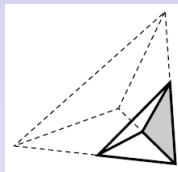
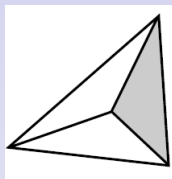
## ▶ kontrakce

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



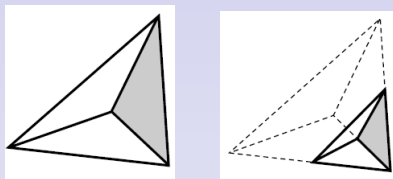
# Simplexová metoda

- ▶ 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,  $\epsilon$  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

- ▶ kvadratická funkce v jedné proměnné

$$f(x) = c + bx + \frac{1}{2}ax$$

- ▶ její derivace

$$f'(x) = b + ax, \quad f''(x) = a$$

- ▶ známe-li v libovolném  $x_0$  hodnoty  $f'$ ,  $f''$ , umíme spočítat  $a, b$
- ▶ řešení  $f'(x) = 0$ , tj.  $x = -b/a$  je minimum  $f$ 
  - ▶ za předpokladu  $a > 0$

Přehled

Metoda zlatého  
řezuBrentova  
metodaSimplexová  
metodaNewtonovské  
metodyMetody  
sdružených  
směrůGlobální  
optimalizaceZákladní  
metodaSimulované  
žiháníChlazení a  
délka krokuZměny  
optimalizované  
funkce

Shrnutí

# Aproximace paraboloidem

- ▶ kvadratická funkce více proměnných

$$f(\mathbf{x}) = c + \mathbf{b}\mathbf{x} + \frac{1}{2}\mathbf{x}\mathbf{A}\mathbf{x}$$

- ▶ derivace

$$\nabla f = \mathbf{b} + \mathbf{A}\mathbf{x}, \quad \nabla^2 f = \mathbf{A}$$

- ▶ známe-li v libovolném  $\mathbf{x}_0$  hodnoty  $\nabla f, \nabla^2 f$ , umíme spočítat  $\mathbf{A}, \mathbf{b}$
- ▶ řešením  $\mathbf{A}\mathbf{x} = -\mathbf{b}$  získáme minimum
  - ▶ je-li  $\mathbf{A}$  pozitivně definitní

Přehled

Metoda zlatého řezu

Brentova metoda

Simplexová metoda

Newtonovské metody

Metody sdružených směrů

Globální optimalizace

Základní metoda

Simulované žihání

Chlazení a délka kroku

Změny optimalizované funkce

Shrnutí

- ▶ matice druhých parciálních derivací
  - ▶ v případě kvadratické formy konstantní
- ▶ znaménka vlastních hodnot
  - ▶ všechny kladné - minimum
  - ▶ všechny záporné - maximum
  - ▶ mix - sedlo

# Vlastnosti dané Hessiánem

- ▶ matice druhých parciálních derivací
  - ▶ v případě kvadratické formy konstantní
- ▶ znaménka vlastních hodnot
  - ▶ všechny kladné - minimum
  - ▶ všechny záporné - maximum
  - ▶ mix - sedlo
- ▶ velikost vlastních hodnot
  - ▶ deformace základního tvaru

# Vlastnosti dané Hessiánem

- ▶ matice druhých parciálních derivací
  - ▶ v případě kvadratické formy konstantní
- ▶ znaménka vlastních hodnot
  - ▶ všechny kladné - minimum
  - ▶ všechny záporné - maximum
  - ▶ mix - sedlo
- ▶ velikost vlastních hodnot
  - ▶ deformace základního tvaru
- ▶ vlastní vektory
  - ▶ rotace základního tvaru
  - ▶ (u symetrické matice jsou kolmé)



# Newtonovské a odvozené metody

- ▶ známe-li  $\nabla f$ ,  $\nabla^2 f$  a funkce je kvadratická, nalezneme minimum přímo
- ▶ funkci postupně aproximujeme paraboloidy
- ▶ snažíme se informaci odpovídající  $\nabla f$ ,  $\nabla^2 f$  získat
- ▶ metody se liší explicitním výpočtem derivací a způsobem udržování této informace

Přehled

Metoda zlatého řezu

Brentova metoda

Simplexová metoda

Newtonovské metody

Metody sdružených směrů

Globální optimalizace

Základní metoda

Simulované žihání

Chlazení a délka kroku

Změny optimalizované funkce

Shrnutí

- ▶ 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  $\lambda$

- ▶ 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

Přehled

Metoda zlatého řezu

Brentova metoda

Simplexová metoda

Newtonovské metody

Metody sdružených směrů

Globální optimalizace

Základní metoda

Simulované žihání

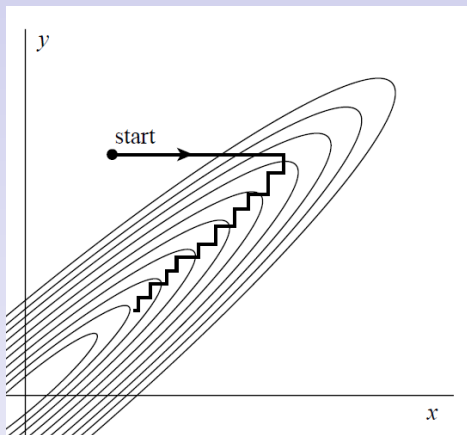
Chlazení a délka kroku

Změny optimalizované funkce

Shrnutí

# Metoda sdružených směrů

- ▶ naivní přístup – souřadné osy



- ▶ nevyvážené vlastní hodnoty matice druhých derivací

Přehled

Metoda zlatého řezu

Brentova metoda

Simplexová metoda

Newtonovské metody

Metody sdružených směrů

Globální optimalizace

Základní metoda

Simulované žihání

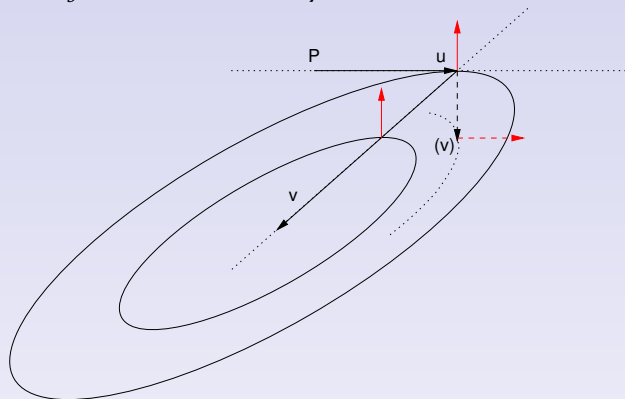
Chlazení a délka kroku

Změny optimalizované funkce

Shrnutí

# Metoda sdružených směrů

- ▶ následující krok „nepokazí“, co jsme získali předchozím
- ▶ předpokládejme, že směrem  $\mathbf{u}$  jsme minimalizovali
- ▶ v tomto bodě je  $\nabla f$  kolmý k  $\mathbf{u}$  (tj.  $\nabla f \mathbf{u} = 0$ )
- ▶ chceme se vydat dál jen takovým směrem  $\mathbf{v}$ , že  $\nabla f$  zůstane k  $\mathbf{u}$  kolmý



- ▶ v souřadném systému s počátkem  $\mathbf{P}$  lze psát

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

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

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

Přehled

Metoda zlatého  
řezuBrentova  
metodaSimplexová  
metodaNewtonovské  
metodyMetody  
sdružených  
směrůGlobální  
optimalizaceZákladní  
metodaSimulované  
žiháníChlazení a  
délka krokuZměny  
optimalizované  
funkce

Shrnutí

- ▶ změna  $\nabla f$  ve směru  $\mathbf{v}$  tedy musí být také kolmá na  $\mathbf{u}$ 
  - ▶ pro  $N = 2$  znamená zachování směru  $\nabla f$
  - ▶ pro  $N \geq 3$  je bohatší

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

- ▶ 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 ke zvyšující se lineární závislosti  $\mathbf{u}_i$ 
  - ▶ v numerickém smyslu, algebraicky v pořádku
- ▶ metoda se tedy pohybuje jen v podprostoru  $\mathbb{R}^N$ 
  - ▶ při více iteracích spočítá falešné řešení

Přehled

Metoda zlatého řezu

Brentova metoda

Simplexová metoda

Newtonovské metody

Metody sdružených směrů

Globální optimalizace

Základní metoda

Simulované žihání

Chlazení a délka kroku

Změny optimalizované funkce

Shrnutí

# Metoda sdružených směrů

## Problémy původního algoritmu

- ▶ opakované zapomínání  $\mathbf{u}_1$  postupně vede ke zvyšující se lineární závislosti  $\mathbf{u}_i$ 
  - ▶ v numerickém smyslu, algebraicky v pořádku
- ▶ 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“

- ▶ metoda sdružených směrů pracuje s parabolickou aproximací implicitně
  - ▶  $n$  minimalizací po přímce dosáhne minima paraboloidu
- ▶ alternativou je explicitní aproximace paraboloidem
  - ▶ analogie Brentovy metody v 1D
- ▶ vyjádření kvadratickou formou

$$Q(\mathbf{x}) = c + \mathbf{g}_Q^T(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) + \frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)^T \mathbf{G}_Q(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)$$

- ▶  $\mathbf{g}_Q$  a  $\mathbf{G}_Q$  jsou 1. a 2. parciální derivace
  - ▶ celkem  $m = 1 + n + \frac{1}{2}n^2$  koeficientů
- ▶ k jednoznačné aproximaci potřebujeme  $m$  nezávislých vyhodnocení  $f$

- ▶ stanovíme  $m$  bodů počáteční aproximace  $\mathbf{x}_i$ 
  - ▶  $\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_0 + \rho \mathbf{e}_i$  a jejich kombinace podle vlastností  $f$
- ▶ algoritmus pracuje s Lagrangeovými polynomy

$$l_j(\mathbf{x}) = c_j + \mathbf{g}_j^T(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) + \frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)^T \mathbf{G}_j(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)$$

kde

$$Q(\mathbf{x}) = \sum_j f(\mathbf{x}) l_j(\mathbf{x})$$

- ▶ v každém kroku minimalizace  $Q$  a náhrada jednoho z  $\mathbf{x}_i$ 
  - ▶ není třeba přepočítávat všechny Lagrangeovy polynomy
- ▶ komplikovaný algoritmus rozhodování o detailech dalšího kroku
- ▶ viz *Powell M. J. D. (2002). UOBYQA: unconstrained optimization by quadratic approximation.*

- ▶ funguje dobře pro problémy do cca.  $n = 20$ 
  - ▶  $m = 1 + n + \frac{1}{2}n^2$  bodů aproximace přestává být praktické
- ▶ metoda NEWUOA
  - ▶ používá omezený počet bodů odhadu, typicky  $2n + 1$
  - ▶ chybějící stupně volnosti „dohání“ minimalizací  $\nabla^2 Q_k - \nabla^2 Q_{k-1}$
  - ▶ v praxi funguje velmi dobře
- ▶ formulace algoritmu dovoluje i snadné zahrnutí lineárních omezení
- ▶ viz *Powell, M. J. D. (2004). Least Frobenius norm updating of quadratic models that satisfy interpolation conditions*

# Využití derivací

## Naivní přístup

- ▶ vedle funkčních hodnot umíme spočítat i gradient  $\nabla f$
- ▶ 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  $\nabla f$
- ▶ 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
  - ▶ ideálně funguje pouze pro nekonečně krátké 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  $\mathbf{h}_i$   
 $\mathbf{g}_i \cdot \mathbf{g}_j = 0 \quad \mathbf{h}_i^T \mathbf{A} \mathbf{h}_j = 0 \quad \mathbf{g}_i \cdot \mathbf{h}_j = 0 \quad \text{pro } j < i$

Přehled

Metoda zlatého  
řezu

Brentova  
metoda

Simplexová  
metoda

Newtonovské  
metody

**Metody  
sdružených  
směrů**

Globální  
optimalizace

Základní  
metoda

Simulované  
žihání

Chlazení a  
délka kroku

Změny  
optimalizované  
funkce

Shrnutí

# Využití derivací

## Sdružené gradienty

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

# Využití derivací

## Sdružené gradienty

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

Přehled

Metoda zlatého  
řezu

Brentova  
metoda

Simplexová  
metoda

Newtonovské  
metody

Metody  
sdružených  
směrů

Globální  
optimalizace

Základní  
metoda

Simulované  
žihání

Chlazení a  
délka kroku

Změny  
optimalizované  
funkce

Shrnutí

# Využití derivací

Má to smysl?

- ▶ menší sklon k degeneraci
  - ▶ použití gradientu vnáší čerstvou 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
- ▶ stejná asymptotická složitost, menší celkový počet operací

- ▶ přímo dostupný Hessián
  - ▶ velmi speciální případy
  - ▶ explicitní výpočet Hessiánu je náročný ( $O(N^2)$ )
  - ▶ přínost přesného výpočtu diskutabilní
  - ▶ nejčastěji pro  $\sum f_i(\mathbf{x})^2$
- ▶ explicitně udržovaná aproximace Hessiánu
  - ▶ resp. přímo její inverze
  - ▶ Davidon-Fletcher-Powell, Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno
  - ▶ robustnější – Hessián skutečných funkcí není vždy pozitivně definitní
- ▶ výsledky srovnatelné s metodou sdružených gradientů
- ▶ detaily viz literatura

Přehled

Metoda zlatého řezu

Brentova metoda

Simplexová metoda

Newtonovské metody

Metody sdružených směrů

Globální optimalizace

Základní metoda

Simulované žihání

Chlazení a délka kroku

Změny optimalizované funkce

Shrnutí

- ▶ popsané metody směřují k nějakému lokálnímu minimu
- ▶ to ale nemusí být řešení, které chceme
  - ▶ mnoho reálných problémů
- ▶ ne vždy víme, kde začít hledat
- ▶ globální metody – jak se dostat k nejlepšímu minimu
- ▶ místo sestupu potřebujeme dynamiku

- ▶ systematické prohledání stavového prostoru
  - ▶ případně heuristické metody
- ▶ vhodné pro diskrétní problémy, ve spojitém případě problematické
  - ▶ diskrétní vzorkování každé proměnné
  - ▶ i při malém počtu příliš náročné ( $M^N$ )



- ▶ technika řešení problému postavená na více či méně naivním očekávání
  - ▶ sledování gradientu
  - ▶ náhodné vzorkování
- ▶ negarantuje nalezení optimálního řešení
- ▶ s vysokou pravděpodobností přijatelné řešení v přijatelném čase

- ▶ Monte Carlo
- ▶ Las Vegas
- ▶ Macao

Přehled

Metoda zlatého  
řezu

Brentova  
metoda

Simplexová  
metoda

Newtonovské  
metody

Metody  
sdružených  
směrů

**Globální  
optimalizace**

Základní  
metoda

Simulované  
žihání

Chlazení a  
délka kroku

Změny  
optimalizované  
funkce

Shrnutí

- ▶ Monte Carlo
  - ▶ vede k výsledku jen s jistou pravděpodobností
  - ▶ deterministická délka výpočtu
- ▶ Las Vegas
  - ▶ vždy vede k výsledku
  - ▶ délka výpočtu záleží na průběhu náhodných čísel
- ▶ Macao
  - ▶ vždy vede k výsledku
  - ▶ deterministická délka výpočtu

# Základní algoritmus

- ▶ pracujeme s jedním konkrétním stavem  $\mathbf{x}$
- ▶ vygenerujeme jednoho nebo více kandidátů  $\mathbf{x}' = \mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}$
- ▶ v těchto bodech vypočteme hodnotu cílové funkce  $f(\mathbf{x})$
- ▶ podle nějakého kritéria rozhodneme o přijetí nebo odmítnutí kandidáta

# Základní algoritmus

- ▶ pracujeme s jedním konkrétním stavem  $\mathbf{x}$
- ▶ vygenerujeme jednoho nebo více kandidátů  $\mathbf{x}' = \mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}$
- ▶ v těchto bodech vypočteme hodnotu cílové funkce  $f(\mathbf{x})$
- ▶ podle nějakého kritéria rozhodneme o přijetí nebo odmítnutí kandidáta
  
- ▶ konkrétní metody se liší strategií (heuristikami)
  - ▶ volba směru a velikosti kroku
  - ▶ kritérium rozhodnutí o přijetí
  - ▶ průběžné modifikace parametrů těchto strategií

# Základní algoritmus

- ▶ pracujeme s jedním konkrétním stavem  $\mathbf{x}$
- ▶ vygenerujeme jednoho nebo více kandidátů  $\mathbf{x}' = \mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}$
- ▶ v těchto bodech vypočteme hodnotu cílové funkce  $f(\mathbf{x})$
- ▶ podle nějakého kritéria rozhodneme o přijetí nebo odmítnutí kandidáta
- ▶ konkrétní metody se liší strategií (heuristikami)
  - ▶ volba směru a velikosti kroku
  - ▶ kritérium rozhodnutí o přijetí
  - ▶ průběžné modifikace parametrů těchto strategií
- ▶ dělení podle použití paměti
  - ▶ čistě Markovovské - nepamatují si nic
  - ▶ využívající historie různé délky
  - ▶ seznamy tabu

# Triviální strategie přijetí

- ▶ náhodná procházka:  $p(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}') = 1$ 
  - ▶ má smysl v kombinaci s propracovanější strategií volby kroku
  - ▶ funguje dobře pro problémy typu golfového hřiště

# Triviální strategie přijetí

- ▶ náhodná procházka:  $p(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}') = 1$ 
  - ▶ má smysl v kombinaci s propracovanější strategií volby kroku
  - ▶ funguje dobře pro problémy typu golfového hřiště
- ▶ přímý sestup

$$p(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}') = \begin{cases} 1 & \text{když } f(\mathbf{x}') < f(\mathbf{x}) \\ 0 & \text{jinak} \end{cases}$$

- ▶ problémy blízké jednomu lokálnímu minimu



# Simulované žíhání

## Fyzikální analogie

- ▶ při vysokých teplotách se molekuly volně pohybují
- ▶ s poklesem teploty se pohyb zpomaluje
- ▶ látky postupně krystalizují
- ▶ rychlé schlazení – velké množství malých krystalů
  - ▶ odpovídá lokální optimalizaci
  - ▶ výsledek není to energeticky optimální stav
  - ▶ nízká teplota nedovoluje přeskupení
- ▶ pomalé schlazení – velké krystaly
- ▶ kritická je rychlost ochlazování

# Simulované žíhání

## Fyzikální analogie

- ▶ Boltzmanova distribuce pravděpodobnosti

$$\pi(\sigma) = \frac{1}{Z} e^{-\frac{E(\sigma)}{kT}} = \frac{1}{Z} e^{-\beta E(\sigma)}$$

- ▶ i za nízké teploty existuje malá pravděpodobnost dosažení vysoce energetického stavu
- ▶ systém může přejít i „nahoru“

- ▶ rovnovážný stav

$$\forall \sigma: \sum_{\tau} \pi(\sigma) p(\sigma \rightarrow \tau) = \sum_{\tau} \pi(\tau) p(\tau \rightarrow \sigma)$$

- ▶ vhodnou volbou  $p$  libovolná počáteční distribuce konverguje k této rovnováze

- ▶ Metropolisovo kritérium

$$p(\sigma \rightarrow \tau) = \min \left\{ 1, e^{-\beta(f(\tau) - f(\sigma))} \right\}$$

- ▶ kritérium teplotního rezervoáru

$$p(\sigma \rightarrow \tau) = \frac{1}{2} (1 - \tanh(\beta(f(\tau) - f(\sigma))))$$

- ▶ kritérium prostého prahu

$$p(\sigma \rightarrow \tau) = \begin{cases} 1 & f(\tau) - f(\sigma) < T \\ 0 & \text{jinak} \end{cases}$$

- ▶ nekonverguje přesně k Boltzmanově distribuci
- ▶ méně výpočetně náročné

# Simulované žihání

## Základní algoritmus

- ▶ začínáme z počátečního stavu  $\sigma_0$  a s vysokou teplotou  $T_0$  (resp. malým  $\beta$ )
- ▶ provedeme jeden nebo více kroků simulace
  - ▶ vygenerování kandidáta na další stav
  - ▶ přijetí podle jednoho z kritérií na základě náhodně generovaného čísla
- ▶ snížíme teplotu
- ▶ končíme dosažením nulové (nebo dostatečně nízké) teploty

# Simulované žihání

## Nezbytná rozšíření

- ▶ vždy je dosaženo lokálního minima
- ▶ globální minimum to je jen s jistou pravděpodobností
  - ▶ blíží se k 1 při nekonečně pomalém chlazení
- ▶ restartování simulace
  - ▶ pamatujeme si nejlepší výsledek
  - ▶ je-li při nízké teplotě řešení výrazně horší, vracíme se
  - ▶ pokračujeme jiným kandidátem
- ▶ simulace na celé populaci stavů
  - ▶ může běžet paralelně (i masivně)
  - ▶ nakonec vybereme nejlepší

- ▶ kde vůbec začít?
  - ▶ reálné systémy mají „bod tání“
  - ▶ musíme začít s vyšší teplotou

- ▶ kde vůbec začít?
  - ▶ reálné systémy mají „bod tání“
  - ▶ musíme začít s vyšší teplotou
- ▶ průzkumná náhodná procházka
  - ▶ několik desítek až tisíc kroků
  - ▶ hledáme maximální rozdíl  $f$
  - ▶  $T_0$  nastavíme na  $10\times$  více než by byl třeba k překonání tohoto rozdílu

Přehled

Metoda zlatého řezu

Brentova metoda

Simplexová metoda

Newtonovské metody

Metody sdružených směrů

Globální optimalizace

Základní metoda

Simulované žihání

**Chlazení a délka kroku**

Změny optimalizované funkce

Shrnutí



- ▶ lineární

$$T = a - bt$$

- ▶ exponenciální

$$T = ab^t$$

- ▶ adaptivní

- ▶ pomocné výpočty ke zhodnocení globálního dopadu změny teploty
- ▶ viz Schneider & Kirkpatrick

- ▶ nemonotónní

- ▶ např. opakovaně „zahříváme“ na  $T_B < T_0$
- ▶ další různé strategie stanovení  $T_B$

Přehled

Metoda zlatého řezu

Brentova metoda

Simplexová metoda

Newtonovské metody

Metody sdružených směrů

Globální optimalizace

Základní metoda

Simulované žihání

Chlazení a délka kroku

Změny optimalizované funkce

Shrnutí

# Délka kroku

## Lokální prohledávání

- ▶ problém je přiměřeně spojitý, malá změna  $\mathbf{x}$  nezpůsobí velkou změnu  $f(\mathbf{x})$
- ▶ máme-li už poměrně dobré řešení, krátkým krokem ho můžeme zlepšit
- ▶ větší pravděpodobnost zlepšení než zcela náhodný skok
- ▶ nebezpečí uváznutí v lokálním minimu
- ▶ paradoxně příliš dlouhé kroky

# Délka kroku

## Proměnlivá délka kroku

- ▶ postup základní délkou kroku, dokud dochází ke zlepšení
- ▶ krok délky 2 - úspěšný
  - ▶ zpět k základní délce kroku
- ▶ krok délky 2 - neúspěšný
  - ▶ rekurzivně prodlužujeme krok
  - ▶ při úspěchu se vracíme přímo k základní délce nebo jen zkrácení o 1
- ▶ další varianty jsou možné

- ▶ modifikace simulovaného žíhání
- ▶ přijetí kroku závisí na hodnotě  $f$ , ne její změně:

$$p(\sigma \rightarrow \tau) = \begin{cases} 1 & f(\tau) < T \\ 0 & \text{jinak} \end{cases}$$

- ▶ vytváří izolované ostrovy
- ▶ ve více dimenzích zůstávají únikové cesty

Přehled

Metoda zlatého řezu

Brentova metoda

Simplexová metoda

Newtonovské metody

Metody sdružených směrů

Globální optimalizace

Základní metoda

Simulované žíhání

**Chlazení a délka kroku**

Změny optimalizované funkce

Shrnutí

- ▶ modifikace simulovaného žíhání
- ▶ přijetí kroku závisí na hodnotě  $f$ , ne její změně:

$$p(\sigma \rightarrow \tau) = \begin{cases} 1 & f(\tau) < T \\ 0 & \text{jinak} \end{cases}$$

- ▶ vytváří izolované ostrovy
- ▶ ve více dimenzích zůstávají únikové cesty
- ▶ urychlení konvergence

$$p(\sigma \rightarrow \tau) = \begin{cases} 1 & f(\tau) < T \text{ nebo } f(\tau) < f(\sigma) \\ 0 & \text{jinak} \end{cases}$$

Přehled

Metoda zlatého  
řezuBrentova  
metodaSimplexová  
metodaNewtonovské  
metodyMetody  
sdružených  
směrůGlobální  
optimalizaceZákladní  
metodaSimulované  
žíháníChlazení a  
délka krokuZměny  
optimalizované  
funkce

Shrnutí

# Změny optimalizované funkce

## Vyhlazování

- ▶ cílem je vyhlazení rušivých lokálních minim
- ▶ dobře do jde při plné znalosti funkce
  - ▶ pak ale nepotřebujeme optimalizovat

Přehled

Metoda zlatého  
řezu

Brentova  
metoda

Simplexová  
metoda

Newtonovské  
metody

Metody  
sdružených  
směrů

Globální  
optimalizace

Základní  
metoda

Simulované  
žihání

Chlazení a  
délka kroku

Změny  
optimalizované  
funkce

Shrnutí

# Změny optimalizované funkce

## Vyhlazování

- ▶ cílem je vyhlazení rušivých lokálních minim
- ▶ dobře do jde při plné znalosti funkce
  - ▶ pak ale nepotřebujeme optimalizovat
- ▶ řízení přesnosti výpočtu  $f$  parametrem  $\alpha$ 
  - ▶ s rostoucím  $\alpha$  méně detailů
- ▶ začneme s velkým  $\alpha$ , výpočet lokálního minima
- ▶ postupně  $\alpha$  snižujeme, start lokální optimalizace v předchozím výsledku

- ▶ modifikace simulovaného žíhání
- ▶ náhrada  $f$  transformací

$$f'(\sigma) = 1 - e^{-\gamma(f(\sigma) - f_{\min})}$$

- ▶ výrazně prohloubí nižší minima
- ▶ potlačí bariéry

Přehled

Metoda zlatého řezu

Brentova metoda

Simplexová metoda

Newtonovské metody

Metody sdružených směrů

Globální optimalizace

Základní metoda

Simulované žíhání

Chlazení a délka kroku

Změny optimalizované funkce

Shrnutí



- ▶ více instancí s jinou inicializací
  - ▶ různé startovací body
  - ▶ různá náhodná čísla
  - ▶ vybereme nejlepší řešení
  - ▶ primitivní, ale účinné
- ▶ rozděl a panuj
  - ▶ smysluplné rozdělení stavového prostoru
  - ▶ výpočet  $f(\mathbf{x})$  závisí na velkých datech, podle nich rozdělujeme
- ▶ s výměnou informací
  - ▶ složitější varianty algoritmů
  - ▶ např. nejlepší dosud nalezené řešení

Přehled

Metoda zlatého  
řezu

Brentova  
metoda

Simplexová  
metoda

Newtonovské  
metody

Metody  
sdružených  
směrů

Globální  
optimalizace

Základní  
metoda

Simulované  
žihání

Chlazení a  
délka kroku

Změny  
optimalizované  
funkce

Shrnutí

- ▶ 216 citací v Schneider & Kirkpatrick

- ▶ 216 citací v Schneider & Kirkpatrick
- ▶ neuronové sítě
- ▶ genetické algoritmy
- ▶ a další ...

# Modifikovaná simplexová metoda

- ▶ zachovává operace reflexe, expanze, a kontrakce
- ▶ počítá s **modifikovanými funkčními hodnotami**
  - ▶ náhodná funkce, velikost úměrná teplotě  $T$
  - ▶ **přičtená** k hodnotě uložené ve vrcholu simplexu
  - ▶ **odečtená** od hodnoty v nově zkoušené bodě
- ▶ je-li nemodifikovaný krok „dolů“, je přijat
- ▶ úměrně teplotě jsou někdy přijaty i kroky „nahoru“
- ▶ při nenulové teplotě se simplex roztáhne na celou dosažitelnou oblast
- ▶ postupným schlazením se zachytí v nejhlubším minimu
  - ▶ nikoli jistě, pouze pravděpodobně

- ▶ různé strategie chlazení
  - ▶ exponenciální: snížení  $T$  na  $T(1 - \epsilon)$  po každých  $m$  krocích
  - ▶ lineární: snížení na  $T_0(1 - k/K)$  po  $m$  krocích  
 $k, K$  jsou počty provedených/plánovaných kroků
  - ▶ a další ...
- ▶ restart metody
  - ▶ některý vrchol simplexu je nahrazen dosavadním nejlepším bodem
  - ▶ nesmí být uvnitř

Přehled

Metoda zlatého řezu

Brentova metoda

Simplexová metoda

Newtonovské metody

Metody sdružených směrů

Globální optimalizace

Základní metoda

Simulované žihání

Chlazení a délka kroku

Změny optimalizované funkce

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)
- ▶ globální metody
  - ▶ exaktní - příliš náročné, omezené použití
  - ▶ stochastické - nezaručují plný úspěch, prakticky použitelné

Přehled

Metoda zlatého řezu

Brentova metoda

Simplexová metoda

Newtonovské metody

Metody sdružených směrů

Globální optimalizace

Základní metoda

Simulované žihání

Chlazení a délka kroku

Změny optimalizované funkce

Shrnutí

# Domácí úkol

## Rozmístění vrcholů grafu

- ▶ „energetické“ algoritmy rozmístění uzlů grafu v 2D/3D
- ▶ na vrcholy působí síly, např. hrany přitahují, vrcholy se odpuzují
- ▶ nemusí být konkrétně podle fyzikálních zákonů, např. Eadesův algoritmus:

$$F_a = k_a \log d \quad F_r = \frac{k}{d^2}$$

- ▶ za „hezké“ považujeme rozmístění vrcholů s minimální energií

# Domácí úkol

## Rozmístění vrcholů grafu

- ▶ implementujte algoritmus rozmístění vrcholů grafu založený na energii
- ▶ energii si definujte po svém, experimentujte s různými variantami
- ▶ použijte vhodnou knihovni implementaci minimalizační funkce
- ▶ nepoužívejte hotové implementace rozmístění vrcholů grafu
- ▶ implementujte vhodnou jednoduchou strategii globální optimalizace
- ▶ načítejte a zapisujte standardizovaný formát GraphML
- ▶ odevzdejte kód a vhodné příklady vstupů