

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

Jednoduché metody

Nejstarší z optimalizačních metod.

Některé nejsou podloženy matematickou teorií, ostatní mají velmi jednoduchý princip.

Konkrétně:

- **Postupná optimalizace proměnných**
- **Systematické prohledávání**
- **Náhodnostní metoda**
- **Metoda alternujících proměnných**

Jednoduché metody

- postupná optimalizace proměnných

Jedna z nejstarších optimalizačních metod (označována také „naivní metoda“ :-).

Princip:

Nejdříve nalezne minimum první proměnné (hodnoty ostatních proměnných se nemění). Původní hodnotu této proměnné nahradí nově nalezenou hodnotou.

Analogicky jsou optimalizovány další proměnné.

Zhodnocení:

Metoda je použitelná pouze v některých případech:

funkce 2 nebo 3 proměnných + vhodný tvar funkce.

V současnosti se tato metoda již nevyužívá.

Jednoduché metody

- systematické prohledávání

Anglicky označována **grid search**.

Princip:

Rozdělí vícerozměrný prostor, nad kterým je funkce definována na části pomocí vícerozměrné mřížky.

Vypočítá pro každou část funkční hodnoty.

Projde všechny funkční hodnoty a nalezne nejmenší z nich.

V některých implementacích této metody analogickým způsobem prohledá okolí minima, nalezeného v předchozím kroku atd.

Jednoduché metody

- systematické prohledávání

Zhodnocení:

Výhody:

Spolehlivá metoda.

Dnes se využívá pro hledání globálních extrémů případně pro nalezení všech extrémů v určité oblasti.

Nevýhody:

Složitost $\theta(P_1 \cdot P_2 \cdot \dots \cdot P_N)$, kde P_i je počet dílů mřížky pro i -tou proměnnou a N je rozměr prostoru, nad kterým je studovaná funkce definována.

Jednoduché metody

- náhodnostní metoda

Princip:

V rámci každého kroku výpočtu je vypočítáno mnoho hodnot studované funkce pro náhodně vybrané hodnoty proměnných (tyto hodnoty jsou ovšem náhodně vybrány z určitého regionu).

Poté je nalezena nejmenší hodnota funkce a ta se stane středem nového regionu (který má menší rozměry než původní region).

Zhodnocení:

Použitelné, ale pouze při dostatečně velkém počtu vypočítaných funkčních hodnot v každém kroku.

Nevýhodou je velká složitost metody.

Jednoduché metody

- metoda alternujících proměnných

Anglicky označována **alternating variables method**.

Princip:

V iteraci k ($k = 1, 2, \dots, N^*$) se mění (je optimalizována) pouze proměnná x_k , ostatní proměnné jsou ponechány.

Poznámka: Proměnná x_k je optimalizována např. tak, že jsou vypočítány hodnoty $x_k' = x_k + \delta x$ a $x_k'' = x_k - \delta x$, poté hodnoty $f(x_1, \dots, x_k', \dots, x_N)$ a $f(x_1, \dots, x_k'', \dots, x_N)$, a pak je pro další iteraci za x_k použito nejvhodnější z x_k' a x_k'' .

Po proběhnutí iterací $1 \dots N$, když jsou všechny hodnoty optimalizovány, se celý cyklus opakuje znovu (až do splnění podmínek minima).

* N je dimenze prostoru, nad kterým je funkce definována.

Jednoduché metody

- metoda alternujících proměnných II

Zhodnocení:

Výhody:

Jednoduchá implementace.

Rozumná složitost.

Nevýhody:

V některých případech je tato metoda velmi neefektivní.

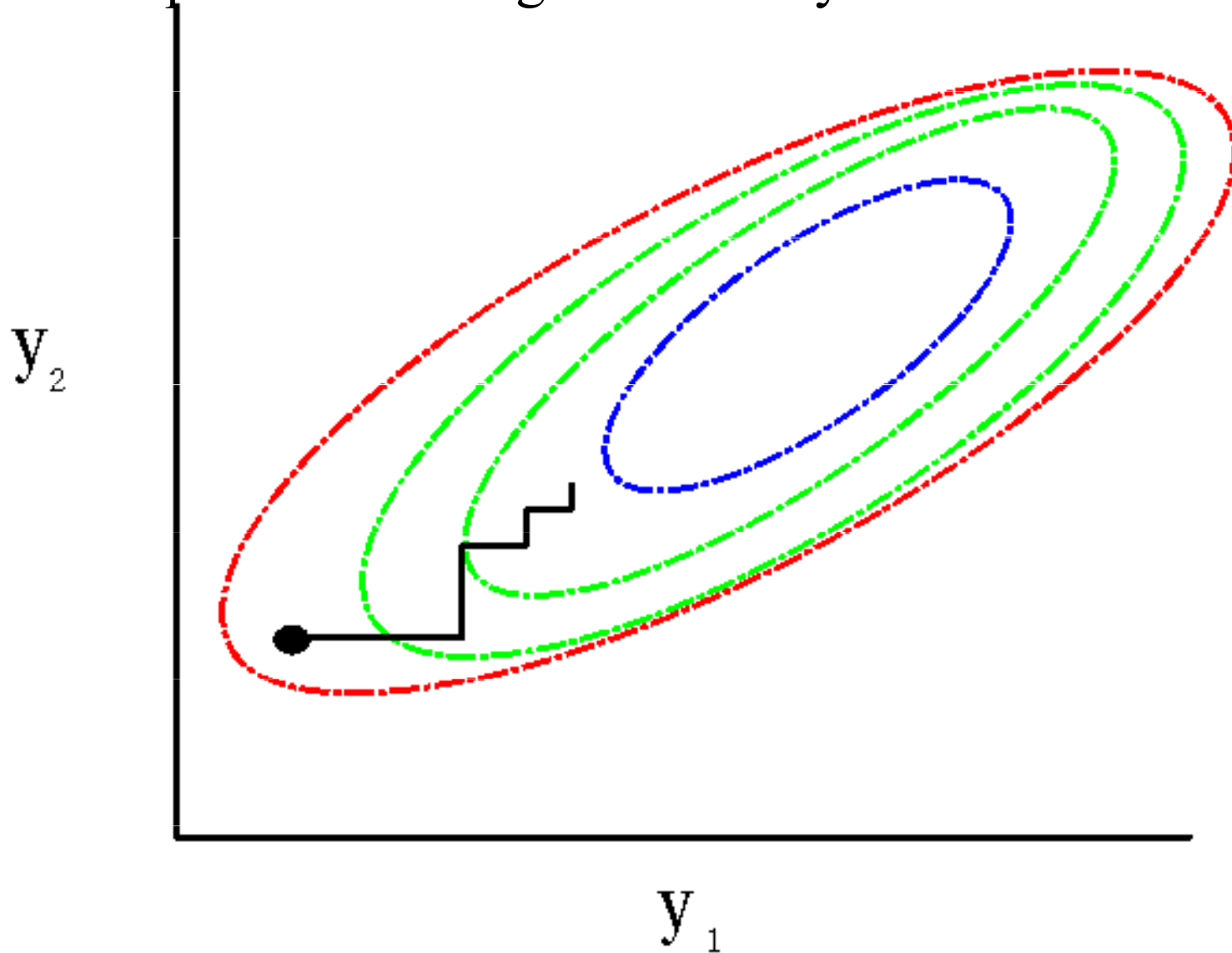
Postup optimalizace je v těchto případech charakterizován oscilačním průběhem (viz následující obrázek).

Navíc je znám problém (viz Practical methods of optimization), pro který metoda chybně konverguje k sedlovému bodu.

Jednoduché metody

- *metoda alternujících proměnných III*

Příklad pomalé konvergence metody:



Nelder-Meadova metoda

- obecně

Nazývá se také **simplexová metoda**.

Základní myšlenka:

N-rozměrným prostorem se pohybuje jistý objekt („améba“), který se může natahovat nebo zkracovat v různých směrech. Několik typů takových transformací má zajistit, aby se objekt posouval směrem do „údolí“ a po dosažení dna údolí se „plazil“ co nejkratší cestou k lokálnímu minimu.

Nelder-Meadova metoda

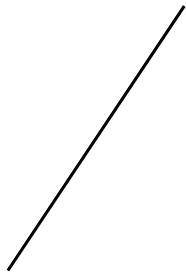
- obecně II

Simplex: V N -rozměrném prostoru je „améba“ definována jako simplex s $N+1$ vrcholy s neprázdným obsahem, tj. jde o konvexní obal tvořený $N+1$ body.

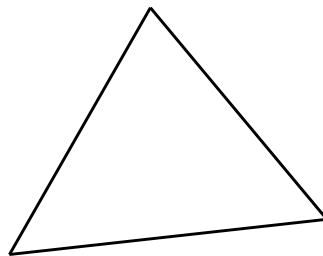
Zápis simplexu: $S = \{p_1, p_2, \dots, p_{N+1}\}$, kde $p_i \in \mathbb{R}_N$

Příklady simplexů:

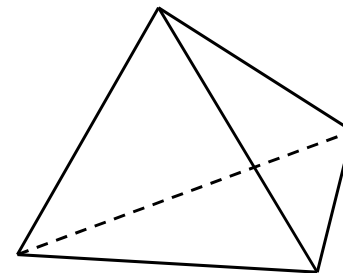
\mathbb{R} :



\mathbb{R}_2 :



\mathbb{R}_3 :

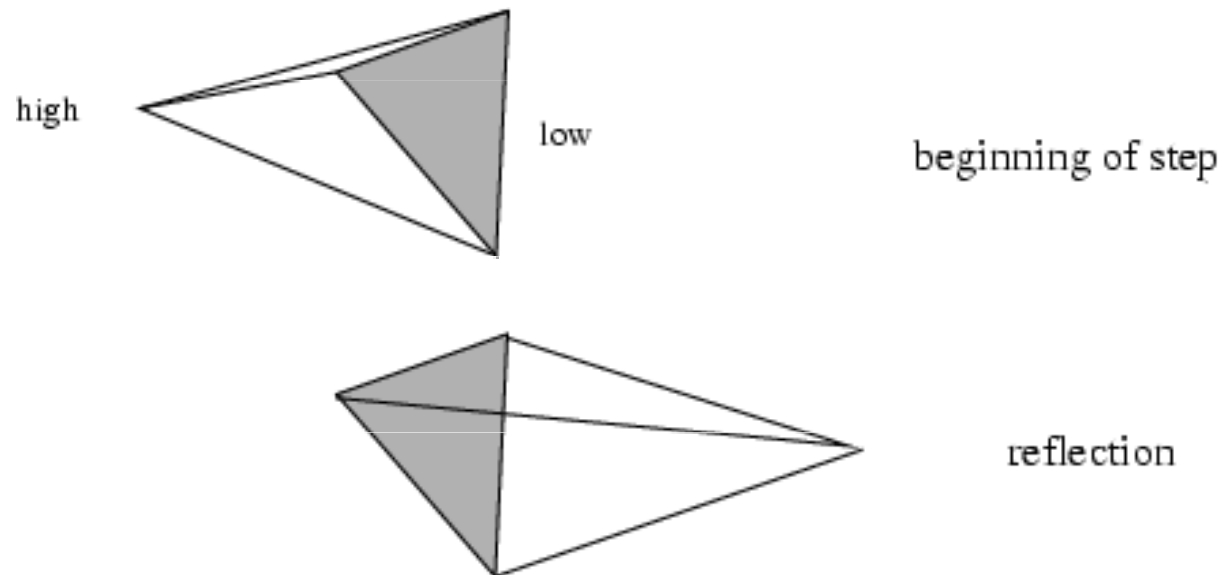


Nelder-Meadova metoda

- transformace

Reflexe:

Bod \mathbf{p}_i , který má největší funkční hodnotu se přemístí (odzrcadí) na druhou stranu simplexu, tj. k bodu \mathbf{p}_i se přičte dvojnásobek rozdílu mezi \mathbf{p}_i a průměrem ostatních bodů $(\sum_{j \neq i} \frac{p_j}{n})$.

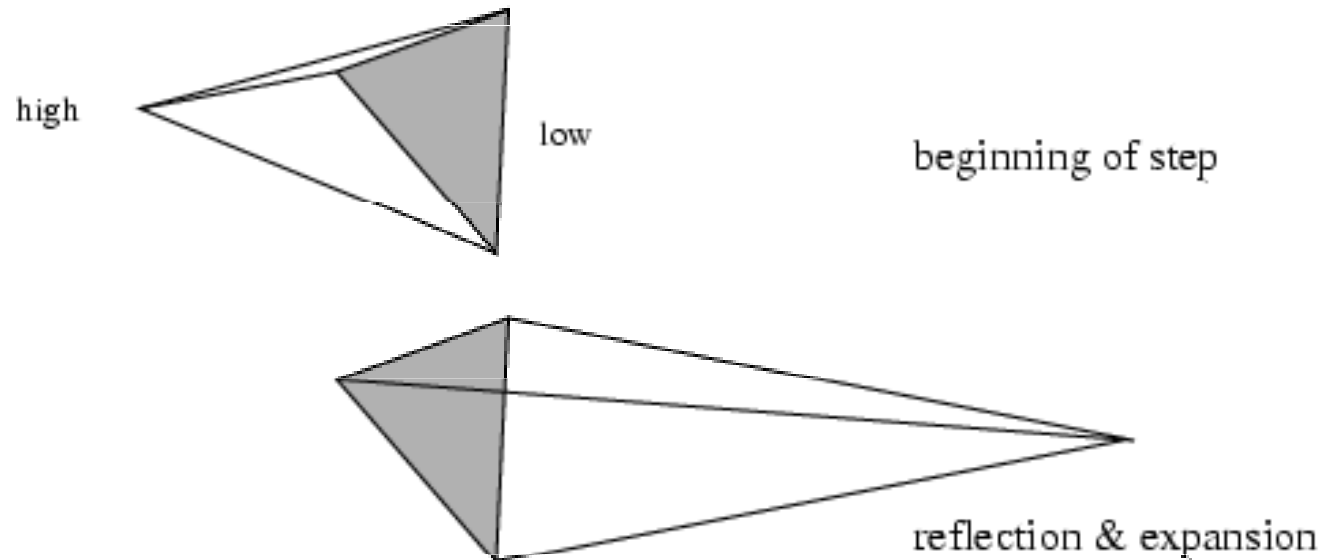


Nelder-Meadova metoda

- transformace II

Reflexe a prodloužení:

Totéž jako v předchozím případě, až na to, že simplex je prodloužen v novém směru (tj. přičítá se více než dvojnásobek rozdílu mezi nejhorším bodem a průměrem ostatních).

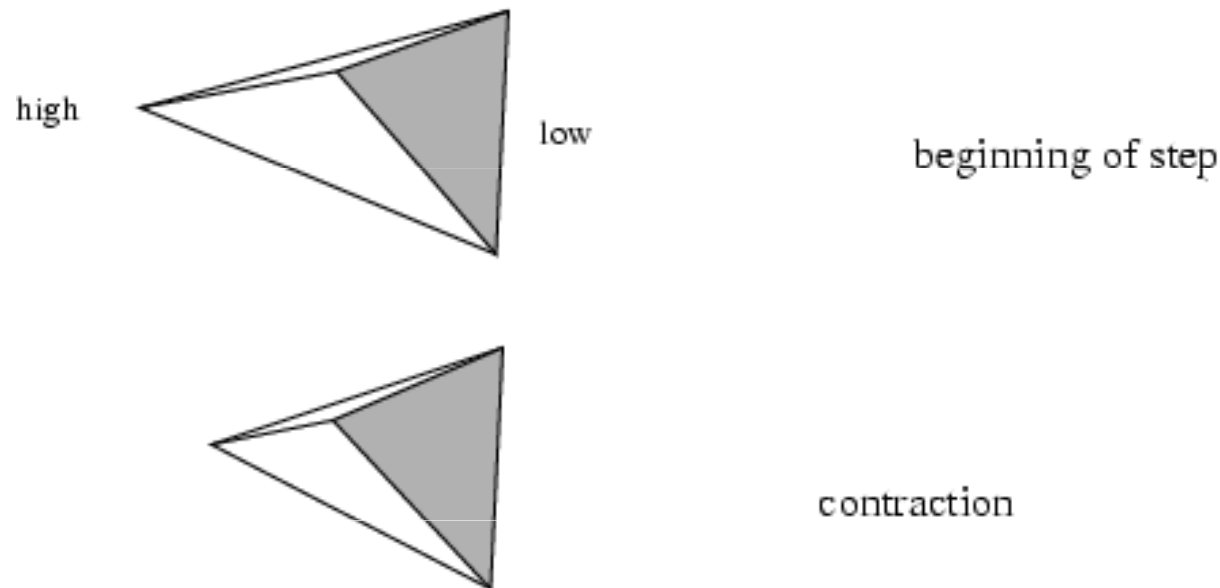


Nelder-Meadova metoda

- transformace III

Kontrakce:

Nejhorší bod se přiblíží k průměru ostatních. To je vhodné v případě, kdy má „améba“ projít úzkým údolím.



Nelder-Meadova metoda

- začátek výpočtu

Na začátku výpočtu se simplex nejčastěji definuje takto:

$$\mathbf{p}_i = \mathbf{p}_0 + \lambda \mathbf{e}_i$$

kde:

$$i = 1, \dots, N$$

\mathbf{p}_0 pevně zvolený (počáteční) bod

\mathbf{e}_i jednotkové vektory

λ konstanta, odrážející odhad měřítka

optimalizačního problému (např. šířku „údolí“)

Nelder-Meadova metoda

- ukončení výpočtu

Metoda končí, pokud:

- Není dosaženo výrazného snížení hodnoty studované funkce
- simplex se v některém cyklu prakticky nezmění

Nelder-Meadova metoda

- zhodnocení

Výhody:

- Jednoduchá implementace
- Rychlý výpočet 1 iterace
- Rychlá konvergence v oblastech daleko od minima

Nevýhody:

- Pomalá konvergence v oblastech poblíž minima
- Může nastat situace, že výpočet neskončí v lokálním minimu

Nelder-Meadova metoda

- příklad aplikace

