PV027 Optimalizace

Radka Svobodová

Definice optimalizace

Již v minulosti řada matematiků a přírodovědců dospěla k přesvědčení, že přírodní děje lze popsat jako optimalizační procesy.

Definice optimalizace

Euler: *„Na světě se nestane nic, v čem by nebylo vidět smysl nějakého maxima nebo minima“.*

Leibnitz: *„Náš svět je nejlepší ze všech možných světů, a proto lze jeho zákony vyjádřit extremálními principy“.*

Definice optimalizace II

Optimalizaci lze definovat například následovně:

Obor zabývající se určením nejlepšího řešení jistého matematicky definovaného problému.

Definice optimalizace III

Postup při optimalizaci:

- Nastudování optimalizačních kritérií problému
- Nalezení metody řešení problému
- Matematický popis řešení (pomocí funkce)
- **Nalezení minima funkce**

Definice optimalizace IV

Předmět PV027 se zabývá matematickou optimalizací, tedy **minimalizací reálných funkcí**, tj. úlohami typu:

$$\min_{x \in M} f(x)$$

kde: $f : R^n \to R$

$$M \subseteq R^n$$

Definice optimalizace V

Poznámka:

Není nutné zabývat se samostatně také maximalizací, neboť ji lze převést na minimalizaci pomocí vztahu:

$$\max_{x \in M} f(x) = -\min_{x \in M}\left(-f(x)\right)$$

Definice optimalizace VI

Speciální oblasti optimalizace:

- Diskrétní optimalizace:

  Využívají se v případech, kdy mají význam pouze celočíselná řešení.

- Speciální úlohy:

  Existuje určitý typ úloh, jejichž řešení nemá příliš smysl popisovat jako $\min_{x \in M} f(x)$.

  Příklad: problém obchodního cestujícího

Sylabus

- Úvod
  - Definice optimalizace
  - Informace o předmětu
    - Sylabus předmětu
    - Vstupní požadavky předmětu
    - Požadavky ke zkoušce a k zápočtu
    - Materiály ke studiu
  - Aplikace optimalizačních metod
  - Motivační příklady
  - Matematické základy

Sylabus II

- Optimalizace bez omezení (unconstrained)
  - Nelder-Meadova metoda
  - spádové metody
  - metody sdruženého gradientu
  - newtonovské metody
  - metody s omezeným krokem
  - úloha nejmenších čtverců

Sylabus III

- Optimalizace s omezením (constrained)
  - Lineární programování:
    - grafické řešení úloh
    - přímá metoda
    - simplexová metoda
  - Nelineární programování:
    - Obecný přístup
    - kvadratické programování
  - Celočíselné programování
    - metoda větví a mezí

Sylabus IV

- Globální optimalizace:
  - simulované žíhání
  - genetické algoritmy
  - metoda difuzní rovnice

- Praktický projekt
    - Aplikace vybrané optimalizační metody pro řešení konkrétního problému

Vstupní požadavky

- **Znalosti z oblastí:**
  - Lineární algebra
  - Matematická analýza

Požadavky ke zkoušce a hodnocení

Požadavky: znalosti v rozsahu přednášek

Hodnocení:

- A: 100 - 90 %
- B: 90 - 80 %
- C: 80 - 70 %
- D: 70 - 60 %
- E: 60 - 50 %
- F: 49 - 0 %

Požadavky k zápočtu

Požadavky:

Vypracovat **zápočtový projekt** (zadání projektu získá student po domluvě s učitelem).

Hodnocení:

- **z** projekt splňuje požadavky, domluvené při zadávání
- **n** jinak

Poznámka:

Předmět PV027 nelze ukončit kolokviem.

Aplikace optimalizačních metod

Optimalizační úlohy se vyskytují všude tam, kde je možné vybírat si z více možných rozhodnutí a přitom kvalitu jednotlivých rozhodnutí ohodnotit nějakým reálným číslem. Konkrétní oblasti využití optimalizace:

Matematika: teorie aproximace, optimalizace numerických procesů atd.

Geometrie: geodézie, minimální křivky a plochy, optimální oblasti a tvary, atd.

Ekonomické a politologické teorie: využívání zdrojů a zásob, optimální skladba výroby, tvorba cen, rozložení rizika, strategické hry, teorie eskalace konfliktu, atd.

Fyzika: mechanika, geometrická optika, teorie pružnosti, hydrodynamika, teorie relativity, atd.

Aplikace optimalizačních metod II

Přírodní vědy: modely fyzikálních, chemických a biologických procesů, atd.

Teorie řízení: optimální řízení, optimální systémy, hierarchické řízení, koordinační strategie, atd.

Teorie konstruování: optimalizace konstrukcí, optimalizace tvarů, optimální odhad neznámých parametrů, optimalizace dynamických vlastností mechanických systému, optimalizace spolehlivosti a rizika konstrukcí, atd.

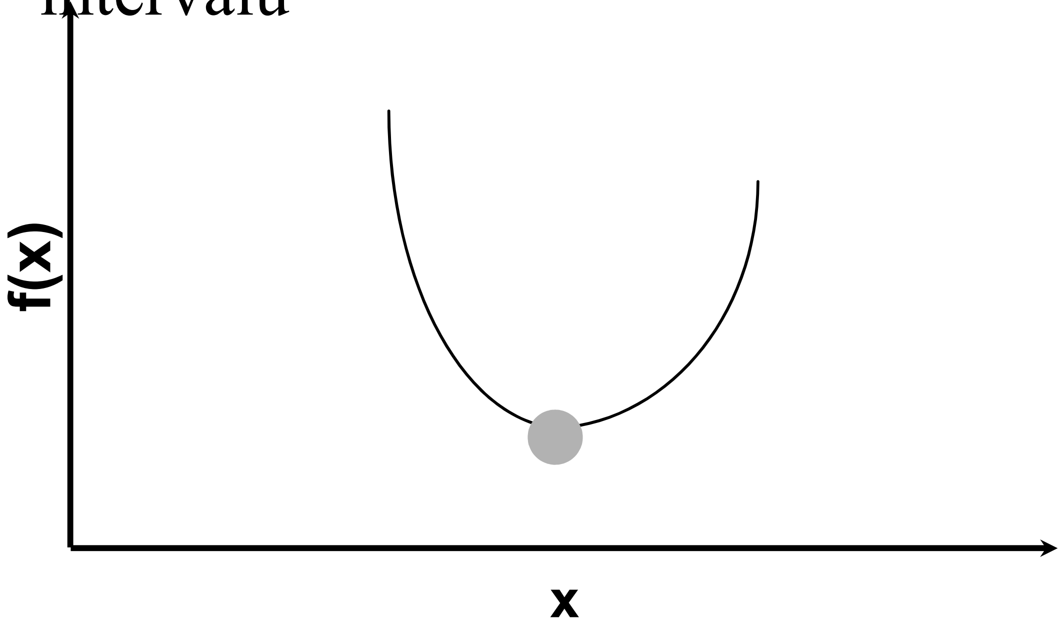
Další aplikace: při správě vodních toků (vypouštění a napouštění nádrží), v zemědělství (např. optimální krmná směs pro zvířata), v dopravě a logistice a kdekoliv jinde, kde se nám podaří zformulovat smysluplnou optimalizační úlohu

Typy optimalizací

Lokální* X *globální:

Lokální optimalizace:

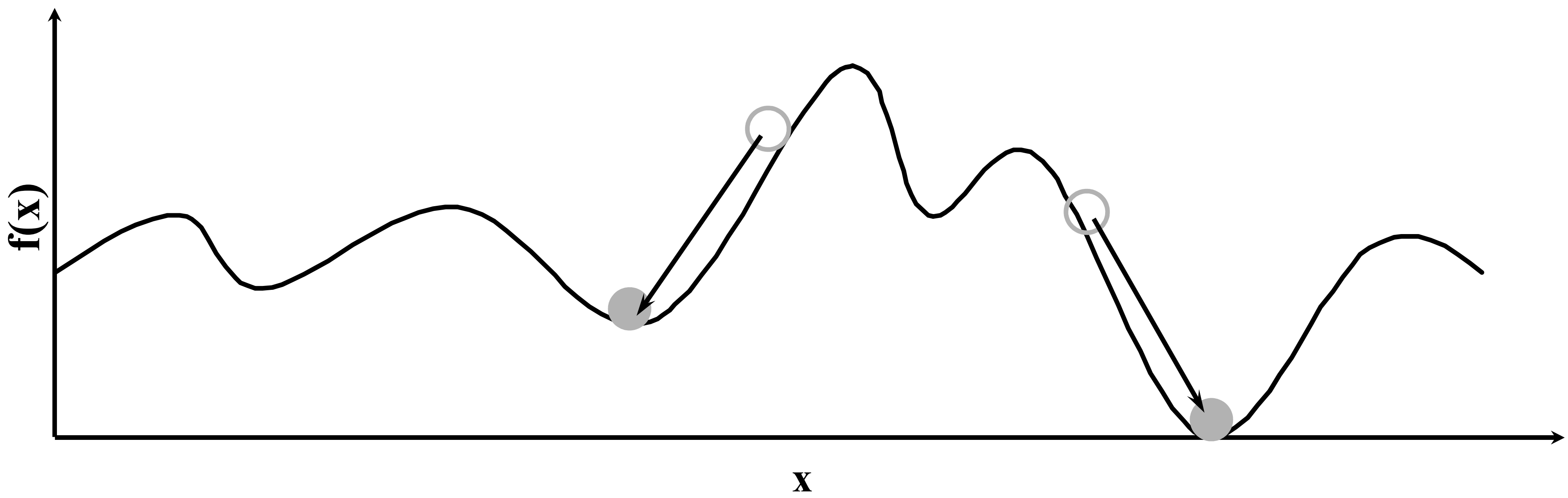
- Nalezení jediného minima, nacházejícího se v určitém intervalu



Typy optimalizací II

Lokální optimalizace – další možný přístup:

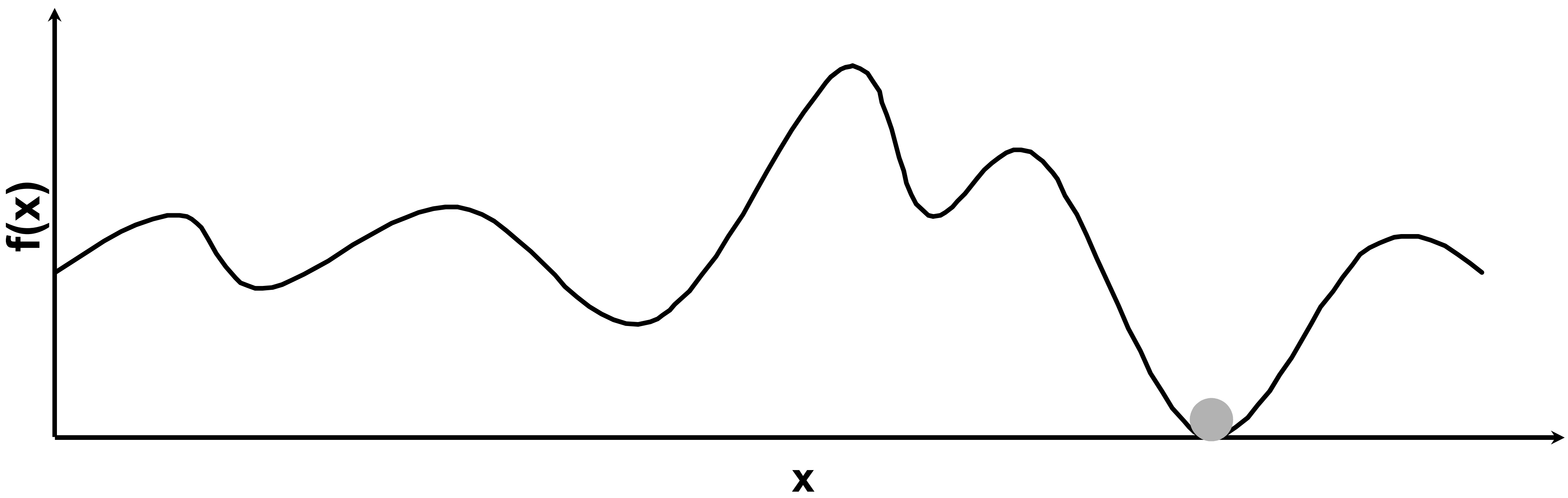
- Nalezení nejbližšího minima do kterého lze sestoupit ze vstupního bodu



Typy optimalizací III

Globální optimalizace:

- Hledání nejhlubšího minima v daném intervalu



Typy optimalizací IV

Bez omezení* X *s omezeními:

Bez omezení (unconstrained)

Kromě podmínky minimality funkce f(**x**) neexistuje žádná jiná podmínka, kterou by měla hledaná optimální hodnota **x** splňovat.

S omezeními (constrained)

Vedle podmínky minimality pracujeme ještě s dalšími podmínkami.

Lineární* X *nelineární:

Lineární

f(**x**) je lineární funkcí **x**

Nelineární

jinak

Motivační příklady

Aproximace dat: nelineární model bez omezení

Najděte nejlepší aproximaci pomocí součtu čtverců pro funkci:

$$f(U) = U / R$$

kde aproximované body (U, f(U)) jsou dány tabulkou a hledáme hodnotu parametru R.

Motivační příklady

Aproximace dat: nelineární model bez omezení

Najděte nejlepší aproximaci pomocí součtu čtverců pro funkci:

$$\phi(t,x) = \left(1 - \frac{x_1 t}{x_2}\right)^{\frac{1}{x_1 c} - 1}$$

kde c = 96,05 a aproximované body dány tabulkou

Motivační příklady II

Plánování výroby: lineární model s omezeními

Výrobce používá materiál (m) a práci (l) k výrobě nejvýše čtyř výrobků (a až d). Požadavky na jednotlivé výrobky a zisk z jejich prodeje jsou dány následovně:

k výrobě 1 kusu výrobku a je třeba 4m + 2l zdrojů a zisk je 50 Kč/kus

k výrobě 1 kusu výrobku b je třeba m + 5l zdrojů a zisk je 80 Kč/kus

k výrobě 1 kusu výrobku c je třeba 2m + l zdrojů a zisk je 30 Kč/kus

k výrobě 1 kusu výrobku d je třeba 2m + 3l zdrojů a zisk je 40 Kč/kus

Během jednoho dne je k dispozici nejvýše 30 jednotek materiálu a 50 jednotek (např. hodin) práce. V jakém počtu mají být produkovány jednotlivé výrobky tak, aby bylo dosaženo maximálního zisku?

Motivační příklady III

Konstrukční problém: nelineární model s omezeními

Navrhněte válcovitou plechovku o objemu 1 dm^3, na kterou se spotřebuje co nejméně kovu.

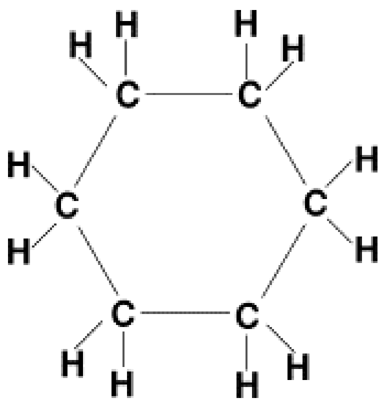
Motivační příklady IV

Aplikace v chemii: nelineární model bez omezení (s více lokálními minimy)

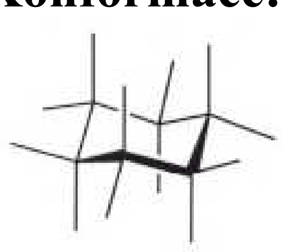
Je dána molekula, urči konformace této molekuly, které jsou v definovaném chemickém prostředí nejstabilnější.

Konformace = uspořádání atomů v prostoru.

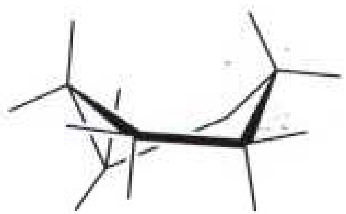
Strukturní vzorec:



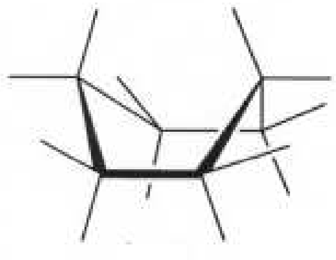
Konformace:



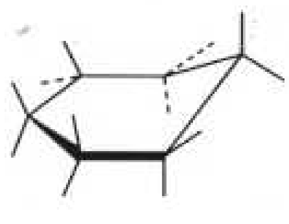
Židličková



Zkřížená židličková



Vaničková



Poloviční židličková

Motivační příklady IV b)

Čím je konformace stabilnější, tím nižší má potenciální energii.

Potenciální energie = energie daného uspořádání atomů v prostoru.

Epot = ϕ(souřadnic atomů)

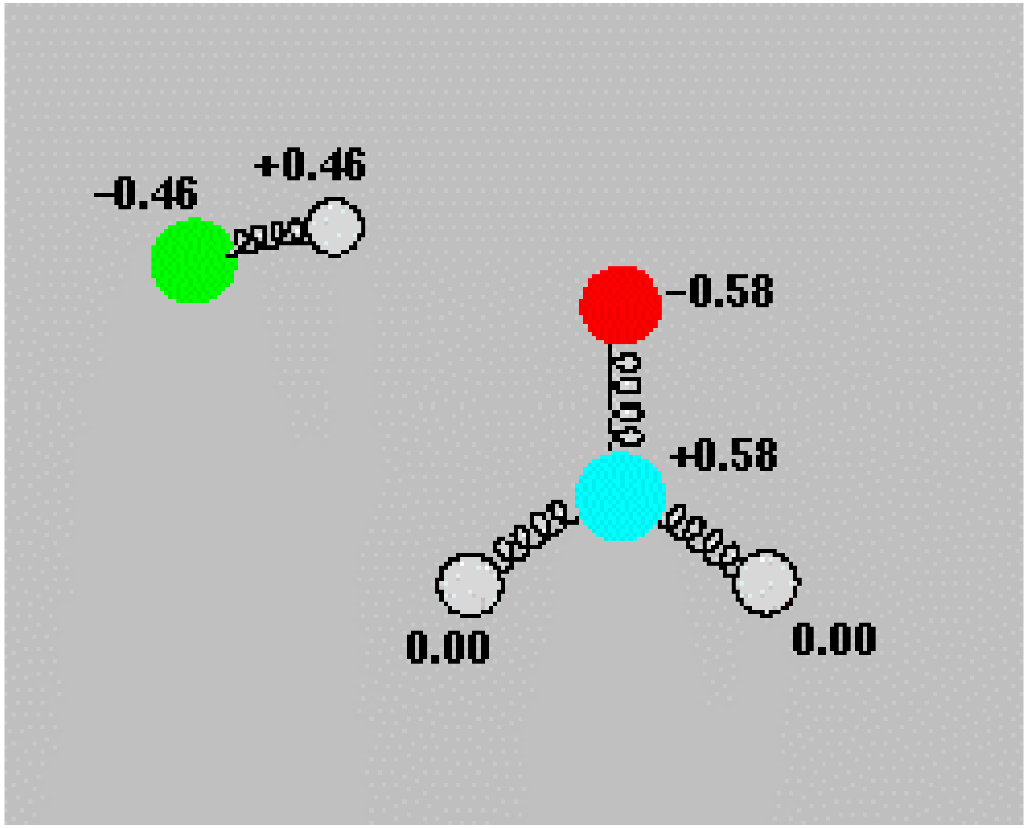
kde ϕ je potenciálová funkce

ϕ : $\mathbf{R}^{3N} \rightarrow \mathbf{R}$, kde N je počet atomů v molekule.

Motivační příklady IV c)

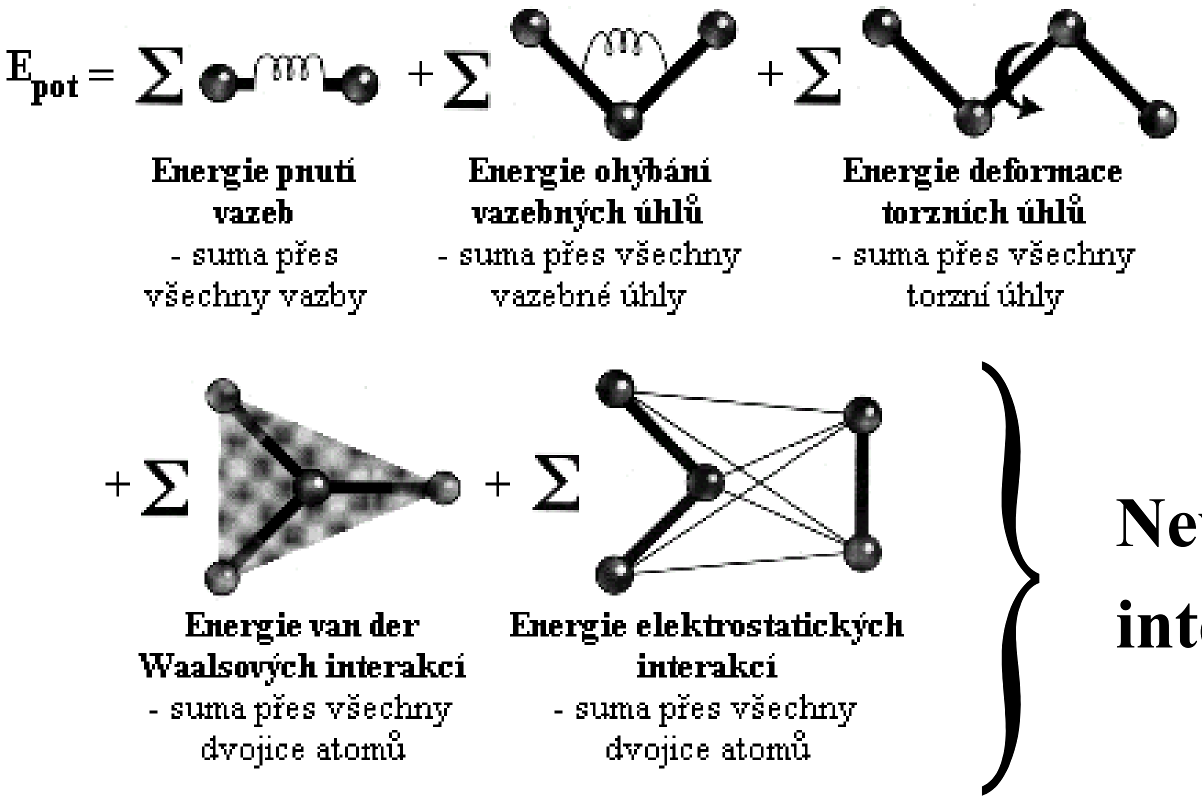
Vytvoříme model molekuly:

Nabité koule, spojené pružinami.



Motivační příklady IV d)

Popíšeme vztah mezi souřadnicemi a E_{pot}:

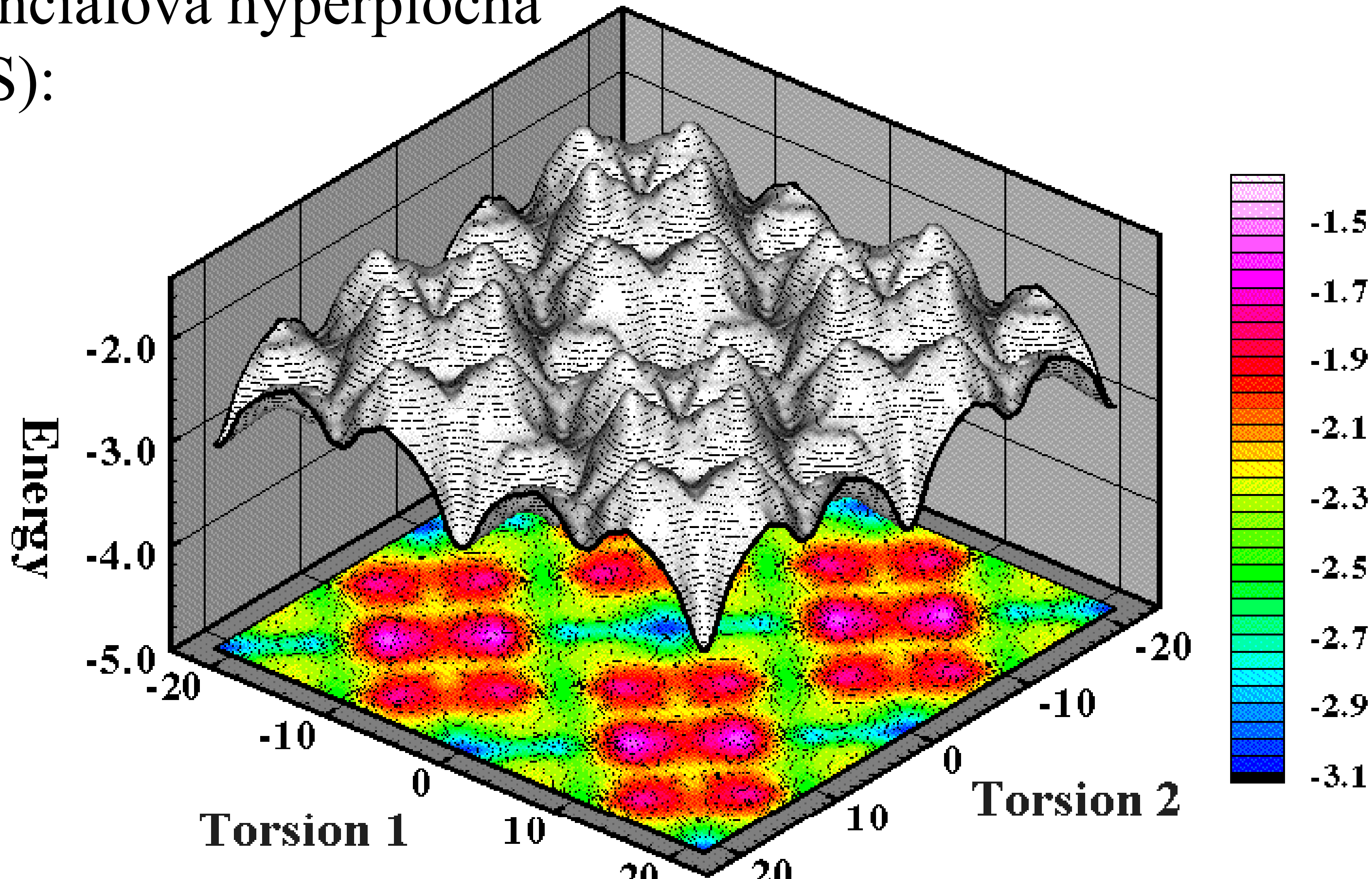


Vazebné interakce

Nevazebné interakce

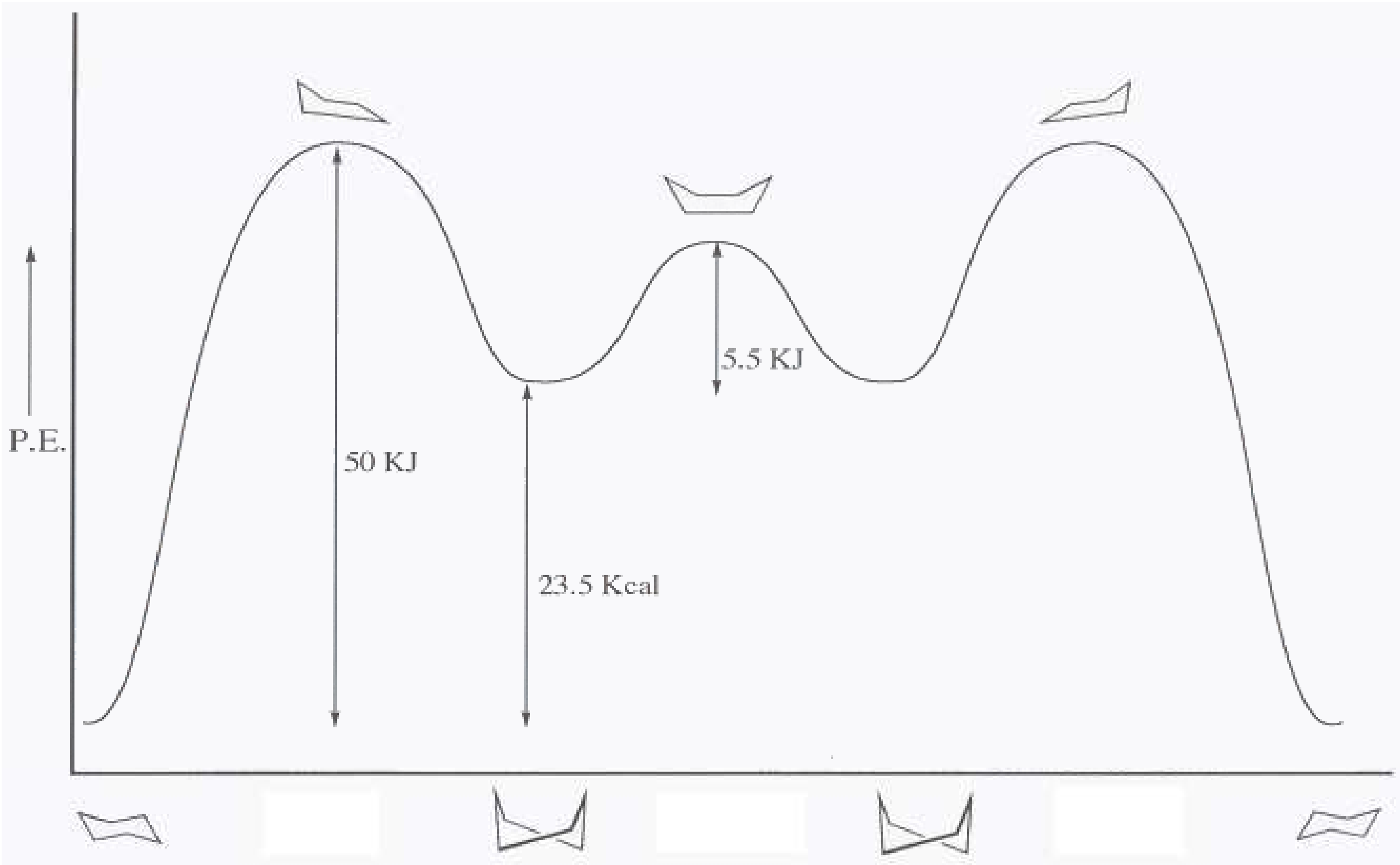
Motivační příklady IV e)

Grafem potenciálové funkce je potenciálová hyperplocha (PES):



Motivační příklady IV f)

Hledáme minima potenciálové funkce.



Matematické základy

Vektory:

– budeme pracovat hlavně se sloupcovými vektory

– vektor budeme označovat malými tučnými písmeny

– transpozici vektoru označíme pomocí písmene T v horním indexu

$$\mathbf{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \ldots \\ a_n \end{pmatrix} \qquad \mathbf{a}^{\mathbf{T}} = (a_1, a_2, \ldots, a_n)$$

Matematické základy II

Matice:

– budou se označovat velkými tučnými písmeny

– transpozici matice označíme pomocí písmene T v horním indexu

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} & \dots & B_{1n} \\ B_{21} & B_{22} & \dots & B_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ B_{m1} & B_{m2} & \dots & B_{mn} \end{pmatrix} \qquad \mathbf{B}^{T} = \begin{pmatrix} B_{11} & B_{21} & \dots & B_{m1} \\ B_{12} & B_{22} & \dots & B_{m2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ B_{1n} & B_{2n} & \dots & B_{mn} \end{pmatrix}$$

Matematické základy III

Skalární součin:

– skalární součin vektorů **a** a **z** zapíšeme jako:

$$\mathbf{a}^{\mathrm{T}}\mathbf{z} = \mathbf{z}^{\mathrm{T}}\mathbf{a} = \sum_{\mathrm{i}} \mathrm{a}_{\mathrm{i}} \mathrm{z}_{\mathrm{i}}$$

Příklad:

$$(1, 2, 2) \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 4 \end{pmatrix} = 1 + 0 + 8 = 9$$

Matematické základy IV

Posloupnost bodů z R^n:

– jednotlivé body v posloupnosti budeme rozlišovat horním indexem v závorce. Budeme je tedy psát například jako $x^{(1)}$, $x^{(2)}$ ... nebo $x^{(k)}$.

– speciální význam bude mít hvězdička (například v x^*). Budeme tak označovat bod, který je řešením vyšetřovaného problému.

Příklad: (2,2), (1.9, 1.5), (1.7, 1.2), …, (0,0)

Matematické základy V

Přímka v R^n:

– je definována jako množina bodů:

$$\mathbf{x} = f(\alpha) = \mathbf{x}' + \alpha.\mathbf{s}$$

pro všechna $\alpha \in R$, kde $\mathbf{x}'$ je jistý bod, ležící na přímce a $\mathbf{s} \in R^n$ je směr přímky.

– kvůli jednoznačnosti je někdy vhodné směr normalizovat, takže například při euklidovské normě platí:

$$\mathbf{s}^T\mathbf{s} = \sum_i s_i^2 = 1$$

Matematické základy VI

Funkce, kterými se budeme zabývat, budou mít spojité derivace až do druhého řádu.

Gradient:

– Vektor prvních parciálních derivací funkce f v bodě $x = (x_1, x_2, \ldots, x_n)$

– Označujeme ho $\nabla f(x)$:

$$\nabla f(x) = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}, \ldots, \frac{\partial f}{\partial x_n} \right)$$

Matematické základy VII

Hessova matice (hessián):

– Matice druhých parciálních derivací funkce f v bodě x = (x_1, x_2, …, x_n)

– Označujeme ho $\nabla^2 f(x)$

$$\nabla^2 f(x) = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial^2 f}{(\partial x_1)^2} & \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2} & \cdots & \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_1} & \dfrac{\partial^2 f}{(\partial x_2)^2} & \cdots & \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1} & \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_2} & \cdots & \dfrac{\partial^2 f}{(\partial x_n)^2} \end{pmatrix}$$

– Je zřejmé, že Hessova matice je symetrická

Matematické základy VIII

Gradient a hessián jako zobrazení:

– Operátor ∇ je zobrazením, které každé diferencovatlené funkci f přiřazuje jinou funkci ∇f.

– Tedy výrazy $\nabla f(\mathbf{x})$ a $\nabla^2 f(\mathbf{x})$ lze psát také jako $(\nabla f)(\mathbf{x})$ a $(\nabla^2 f)(\mathbf{x})$

Matematické základy IX

Gradient a hessián kubické funkce:

– Funkce:

$f(\mathbf{x}) = x_1{}^3 + 2x_2{}^2$

– Gradient:

$\nabla f(x) = (3x_1{}^2, 4x_2)$

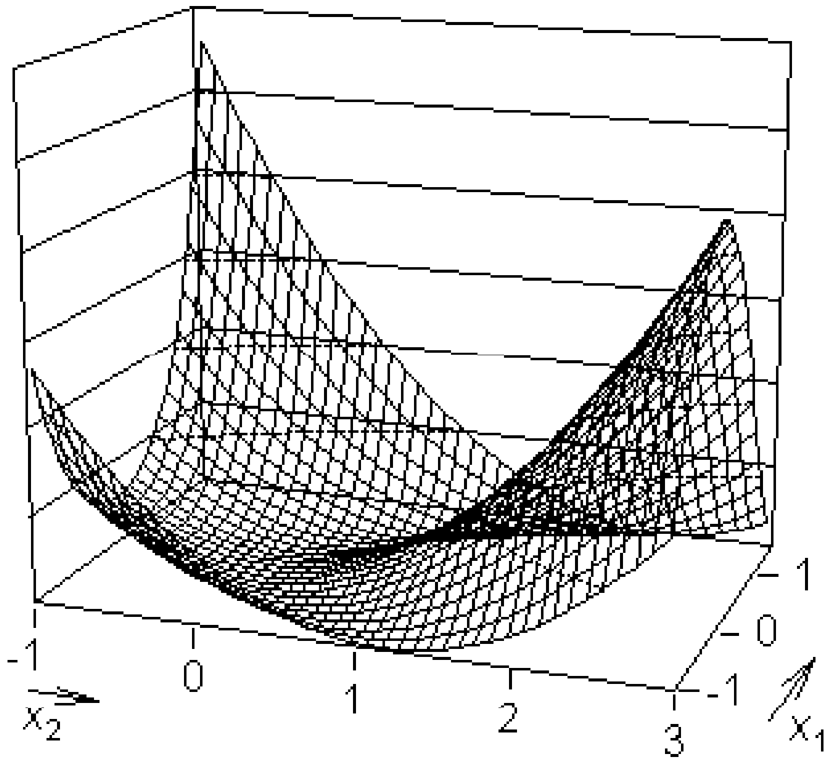
– Hessián:

$\nabla^2 f(x) = \begin{pmatrix} 6x_1 & 0 \\ 0 & 4 \end{pmatrix}$

Matematické základy X

Gradient a hessián Rosenbrockovy funkce:

– Rosenbrockova funkce:
  $f(\mathbf{x}) = 100(x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2$
– Graf má tvar banánovitého údolí se strmými srázy v jednom směru a s plochým dnem ve druhém směru.

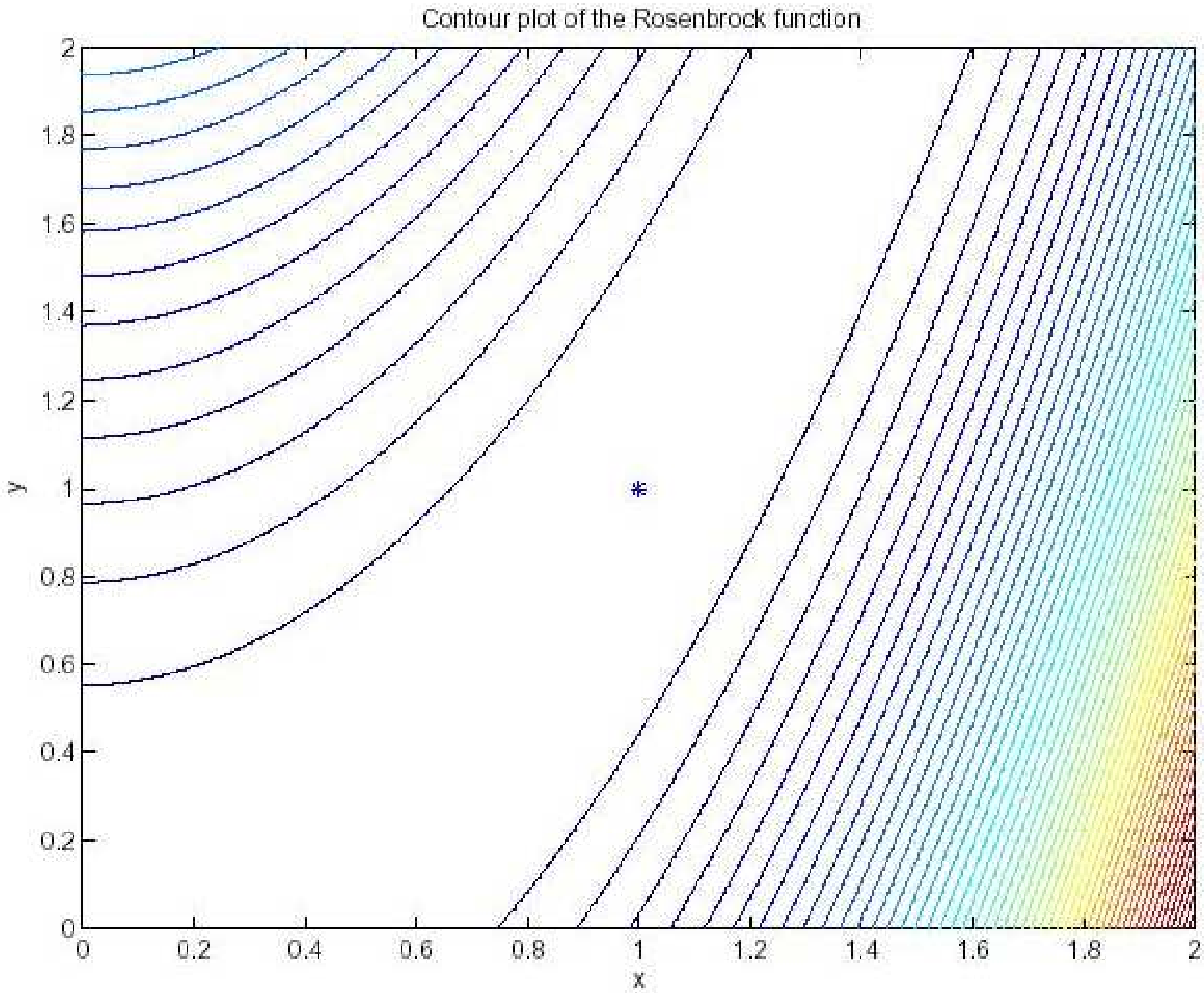


Matematické základy XI

Poznámka:

Globálním minimem Rosenbrockovy funkce je bod (1, 1) a leží na dlouhé pomalu se svažující oblasti, obklopené prudkými srázy.

Je velmi obtížné ji optimalizovat => používá se k testování optimalizačních metod.



Matematické základy XII

Gradient a hessián Rosenbrockovy funkce:

Gradient:

$$\nabla f(x) = \left(-400x_1(x_2 - x_1^2) - 2(1 - x_1),\quad 200(x_2 - x_1^2)\right)^T$$

Hessián:

$$\nabla^2 f(x) = \begin{pmatrix} -1200x_1^2 - 400x_2 + 2 & -400x_1 \\ -400x_1 & 200 \end{pmatrix}$$

Typy extrémů

Lokální minimum a **lokální maximum** (často se označuje pouze minimum a maximum):

Minimum:

$$\exists \Omega \ \forall \mathbf{x} \in \Omega(\mathbf{x}^*): f(\mathbf{x}) \geq f(\mathbf{x}^*)$$

Maximum:

$$\exists \Omega \ \forall \mathbf{x} \in \Omega(\mathbf{x}^*): f(\mathbf{x}) \leq f(\mathbf{x}^*)$$

Kde $\Omega(\mathbf{x}^*)$ je (vícerozměrné) okolí bodu $\mathbf{x}^*$.

Typy extrémů III

Globální minimum:

Pokud f(**x**) ≥ f(**x***) pro všechna **x** z definičního oboru funkce f, pak je **x*** globálním minimem funkce f.

Obdobně je definováno globální maximum funkce f.

Typy extrémů IV

Při práci s minimy a maximy, definovanými na předchozích slidech se může stát, že pro některé funkce dostaneme „paradoxní“ výsledky.

Např. $x = 0$ je lokálním minimem funkce:

$f(x) = \min(1 + x, 0, 1 - x)$

a zároveň je také globálním maximem dané funkce.