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 $\theta(P_1.P_2. \ldots .P_N)$, 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 funkčnch 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, ..., 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 $f(x_1, ..., x_k', ..., x_N)$ a $f(x_1, ..., x_k'', ..., x_N)$, a pak je pro další iteraci za x_k použito nejvhodnější z x_k' a x_k''.

Po proběhnutí iterací 1 ... 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.

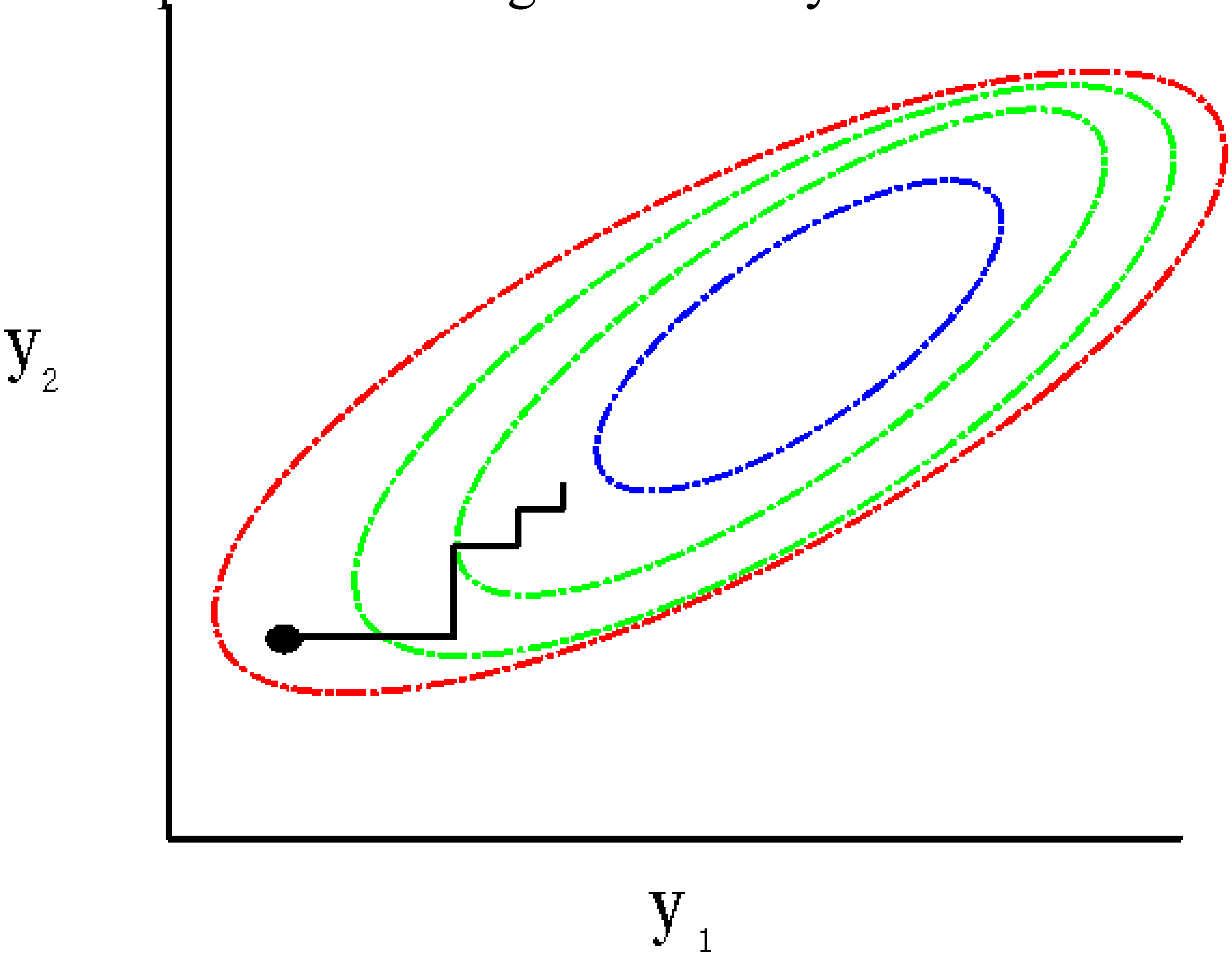
Postup optimalizace je v těchto případech charakterizován oscilačním průběhem (viz následující obrázek).

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.

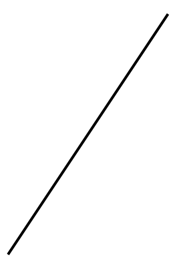
Nelder-Meadova metoda
- *obecně II*

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.

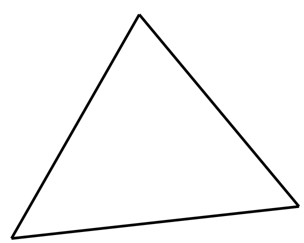
Zápis simplexu: $S = \{p_1, p_2, \ldots, p_{N+1}\}$, kde $p_i \in R_N$

Příklady simplexů:

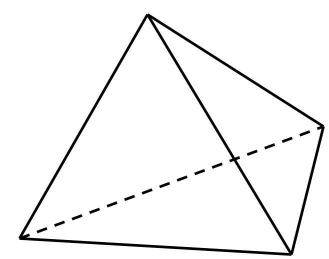
R:



R_2:



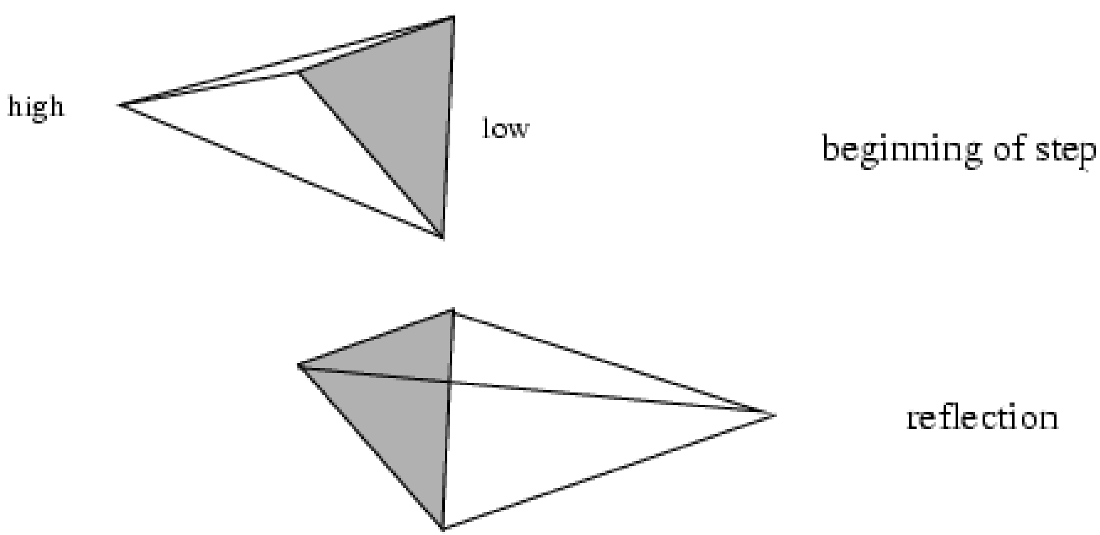
R_3:



Nelder-Meadova metoda - transformace

Reflexe:

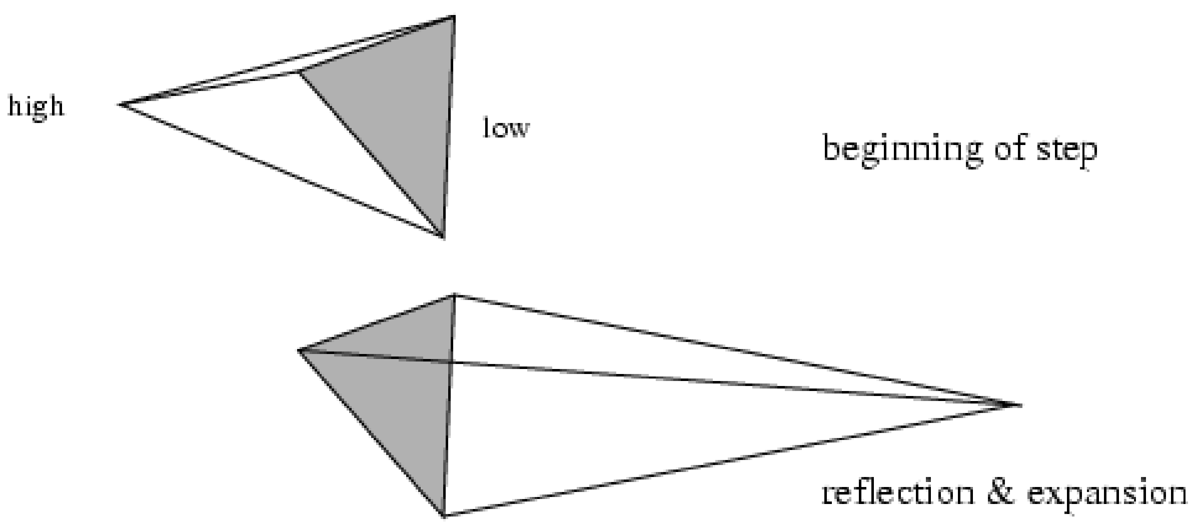
Bod $\mathbf{p_i}$, který má největší funkční hodnotu se přemístí (odzrcadlí) na druhou stranu simplexu, tj. k bodu $\mathbf{p_i}$ se přičte dvojnásobek rozdílu mezi $\mathbf{p_i}$ a průměrem ostatních bodů $\left(\sum_{j \neq i} \frac{p_j}{n}\right)$.



Nelder-Meadova metoda - transformace II

Reflexe a prodloužení:

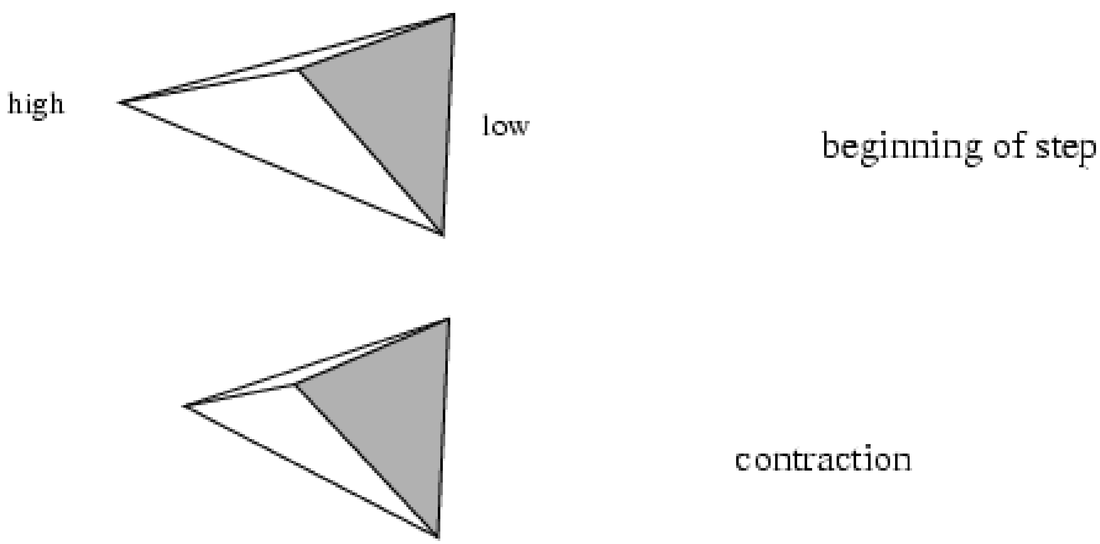
Totéž jako v předchozím případě, až na to, že simplex je prodloužen v novém směru (tj. přičítá se více než dvojnásobek rozdílu mezi nejhorším bodem a průměrem ostatních).



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, ..., N

$\mathbf{p_0}$ pevně zvolený (počáteční) bod

$e_{\mathbf{i}}$ 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*