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

Metody konjugovaných gradientů
- *obecně*

= metody sdružených gradientů

= conjugate gradient method

= speciální případ metod sdružených směrů

Základní myšlenka: Pro určení směru přesunu z bodu $x^{(k)}$ do bodu $x^{(k+1)}$ se využívají nejen hodnotu $g^{(k+1)}$, ale rovněž hodnotu $g^{(k)}$. (V obecném případě je možno využít hodnot $g^{(1)}$, $g^{(2)}$, ..., $g^{(k)}$, $g^{(k+1)}$.)

Zdůvodnění: Spojení informací o současném a předchozím sklonu studované funkce umožňuje rychlejší sestup do minima (zlepšení konvergence na plochých oblastech).

Metody konjugovaných gradientů

- *algoritmus*

Výpočet $\mathbf{x}^{(k+1)}$:

$\mathbf{x}^{(k+1)}$ se určuje pomocí stejného vztahu jako u spádových metod:

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \alpha^{(k)}.\mathbf{s}^{(k)} \qquad [2.1]$$

kde:

$\mathbf{s}^{(k)}$	**směr přesunu** z bodu $\mathbf{x}^{(k)}$
$\alpha^{(k)}$	koeficient, popisující **délku daného přesunu**

Metody konjugovaných gradientů

- *algoritmus II*

Výpočet $\alpha^{(k)}$:

Analogické jako u spádových metod:

1) Je nutno zvolit koeficient $\alpha^{(k)}$ tak, aby platilo:

$$0 < \alpha^{(k)} < \alpha^{(k)\prime}$$

kde: $f(x^{(k)} + \alpha^{(k)\prime}.s^{(k)}) = f(x^{(k+1)})$

2) $\alpha^{(k)}$ by se měla co nejvíce blížit $\alpha^{(k)*}$,

kde $\alpha^{(k)*}$ je minimum funkce $f(x^{(k)} + \alpha^{(k)}.s^{(k)})$.

Metody konjugovaných gradientů

- *algoritmus III*

Výpočet $\mathbf{s}^{(k+1)}$:

$\mathbf{s}^{(k+1)}$ se vypočte pomocí gradientu $\mathbf{g}^{(k+1)}$ a směru $\mathbf{s}^{(k)}$. (Přičemž $\mathbf{s}^{(k)}$ byl vypočítán pomocí předchozích hodnot gradientů ...). Konkrétně:

$$\mathbf{s}^{(k+1)} = -\mathbf{g}^{(k+1)} + \beta^{(k)}.\mathbf{s}^{(k)} \qquad [2.2]$$

Kde $\beta^{(k)}$ je koeficient, který určuje míru vlivu směru přesunu v kroku k ($\mathbf{s}^{(k)}$) na směr přesunu v následujícím kroku ($\mathbf{s}^{(k+1)}$).

Výpočet $\mathbf{s}^{(0)}$:

$$\mathbf{s}^{(0)} = -\mathbf{g}^{(0)}$$

Metody konjugovaných gradientů
- *algoritmus III*

Výpočet $\beta^{(k+1)}$:

Existuje více možností, jak volit číslo $\beta^{(k+1)}$.

Nyní odvodíme hodnotu $\beta^{(k+1)}$ za předpokladu, že minimalizovaná funkce je kvadratická a má pozitivně definitní Hessovou matici $\mathbf{G}$. V tomto případě platí:

$$\mathbf{y}^{(k)} = \mathbf{G}.\boldsymbol{\delta}^{(k)} \qquad [2.3]$$

kde $\mathbf{y}^{(k)} = \mathbf{g}^{(k+1)} - \mathbf{g}^{(k)}$ a $\boldsymbol{\delta}^{(k)} = \mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^{(k)}$.

Protože vektory $\mathbf{s}^{(k+1)}$ a $\mathbf{s}^{(k)}$ mají být sdružené vzhledem ke $\mathbf{G}$, musí platit:

$$\mathbf{s}^{(k+1)T}.\mathbf{G}.\boldsymbol{\delta}^{(k)} = 0 \qquad [2.4]$$

Z [2.3] a [2.4] vyplývá:

$$0 = \mathbf{s}^{(k+1)T}.\mathbf{G}.\boldsymbol{\delta}^{(k)} = \mathbf{s}^{(k+1)T}.\mathbf{y}^{(k)}$$

Metody konjugovaných gradientů

- *algoritmus IV*

$$\mathbf{s}^{(k+1)} = -\mathbf{g}^{(k+1)} + \beta^{(k)}.\mathbf{s}^{(k)} \qquad [2.2]$$

Po transponování rovnice [2.2] a násobení vektorem $\mathbf{y}^{(k)}$ zprava dostáváme:

$$0 = -\mathbf{g}^{(k+1)T}.\mathbf{y}^{(k)} + \beta^{(k)}.\mathbf{s}^{(k)T}.\mathbf{y}^{(k)} \qquad [2.5]$$

Odtud plyne hodnota, kterou navrhli Hestenes a Stiefel v roce 1952:

$$\beta_{HS}^{(k)} = \frac{\boldsymbol{g}^{(k+1)T}(\boldsymbol{g}^{(k+1)} - \boldsymbol{g}^{(k)})}{\boldsymbol{s}^{(k)T}(\boldsymbol{g}^{(k+1)} - \boldsymbol{g}^{(k)})} \qquad [2.6]$$

Metody konjugovaných gradientů

- algoritmus V

Pokud je $\mathbf{x}^{(k)}$ v rovnici [2.1] přesně určeným minimem ve směru $\mathbf{s}^{(k)}$, musí platit $\mathbf{s}^{(k)T}.\mathbf{g}^{(k+1)} = 0$ (jinak by se hodnota f ve směru $\mathbf{s}^{(k)}$ dala ještě snížit), obdobně $\mathbf{s}^{(k-1)T}.\mathbf{g}^{(k)} = 0$. Pak je jmenovatel ve vztahu [2.6] roven:

$$\boldsymbol{s}^{(k)T}\left(\boldsymbol{g}^{(k+1)} - \boldsymbol{g}^{(k)}\right) = -\boldsymbol{s}^{(k)T}.\boldsymbol{g}^{(k)} = \left[\boldsymbol{g}^{(k)} - \beta^{(k-1)}.\boldsymbol{s}^{(k-1)}\right]^T.\boldsymbol{g}^{(k)} =$$

$$= \boldsymbol{g}^{(k)}.\boldsymbol{g}^{(k)} = \left\|\boldsymbol{g}^{(k)}\right\|_2^2 \qquad [2.7]$$

Metody konjugovaných gradientů

- *algoritmus VI*

Po dosazení [2.7] do [2.6] získáme vyjádření $\beta^{(k)}$, které poprvé publikovali Polak a Ribiere v roce 1969:

$$\beta_{PR}^{(k)} = \frac{\boldsymbol{g}^{(k+1)T}(\boldsymbol{g}^{(k+1)} - \boldsymbol{g}^{(k)})}{\left\|\boldsymbol{g}^{(k)}\right\|_2^2} \qquad [2.8]$$

Obdobně lze ukázat, že $\mathbf{g}^{(k+1)T}.\mathbf{g}^{(k)} = 0$, odtud plyne vztah pro $\beta^{(k)}$ podle Fletchera a Reevese (1963):

$$\beta_{FR}^{(k)} = \frac{\left\|\boldsymbol{g}^{(k+1)}\right\|_2^2}{\left\|\boldsymbol{g}^{(k)}\right\|_2^2}$$

Metody konjugovaných gradientů

- *algoritmus VII*

Pro kvadratické funkce je $\beta_{HS}^{(k)} = \beta_{PR}^{(k)} = \beta_{FR}^{(k)}$.

To ale neplatí pro obecnější funkce. Při testovacích úlohách dává obvykle nejlepší výsledky varianta Polaka a Ribiera.

Metody konjugovaných gradientů
- *zhodnocení*

Výhody:

- Spolehlivější než spádové metody.
- Vhodná i v oblastech poblíž minima

Nevýhody:

- Výpočetně náročnější.
- Větší prostorová složitost (nutnost ukládat několik n-prvkových vektorů).

Metody konjugovaných gradientů

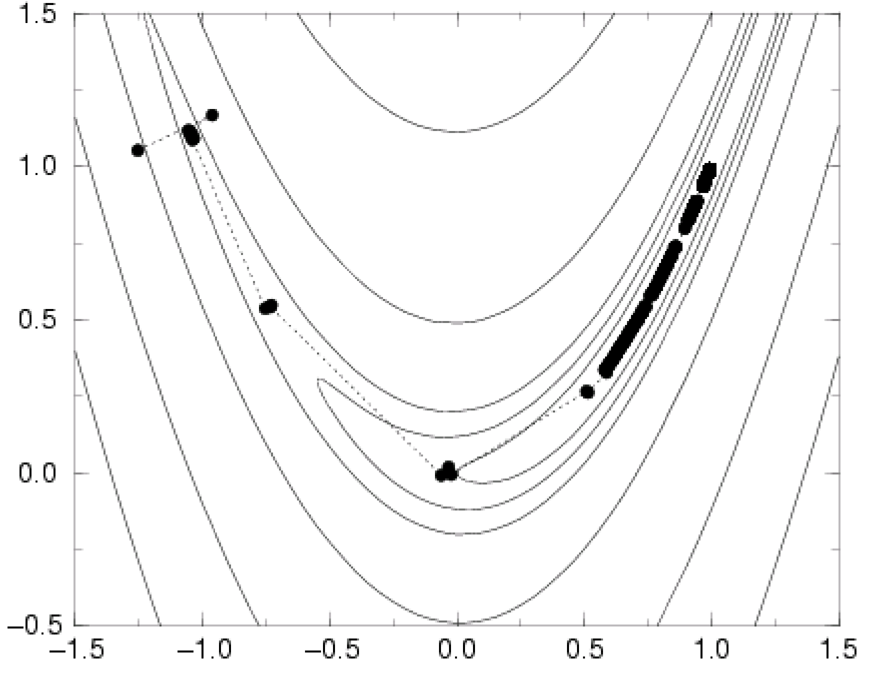
- porovnání

Vhodná i v oblastech poblíž Porovnání metody největšího spádu a metody konjugovaných gradientů (Rosenbrockova funkce):

	Daleko od minima (gradient < 1kcal.A^{-2})		**Poblíž minima** (gradient < 0,1kcal.A^{-2})	
	CPU	Počet iter.	CPU	Počet iter.
Nejv. spád	67	98	1405	1893
Konj. grad.	149	213	257	367

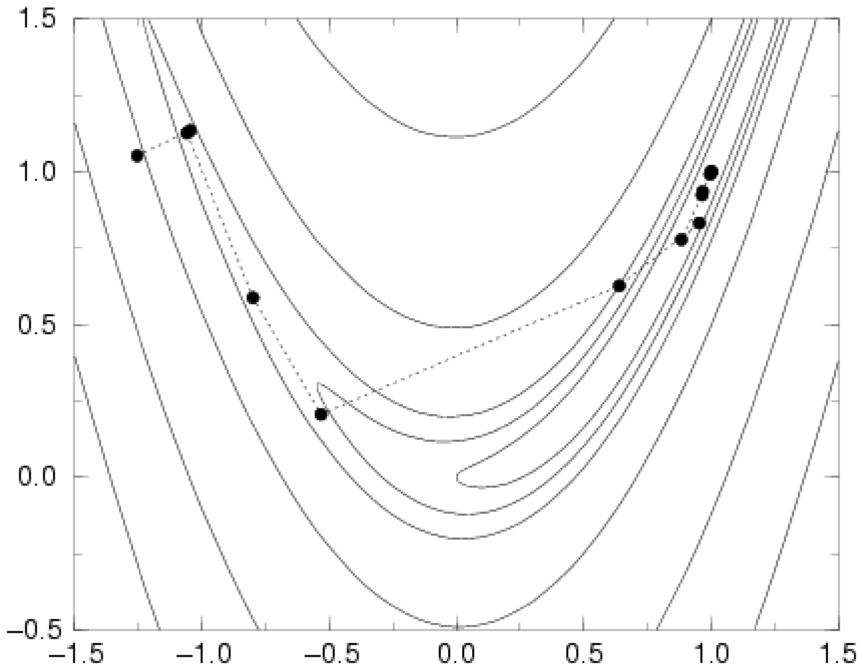
Metody konjugovaných gradientů
- *porovnání II*

Ukázka konvergence spádové metody pro Rosenbrockovu funkci:



Metody konjugovaných gradientů
- *porovnání III*

Ukázka konvergence metody konjugovaných gradientů pro Rosenbrockovu funkci:



Cvičení

Proveďte první 2 kroky optimalizace funkce:

$f(x_1, x_2) = x_1^2 + 2x_2^2$

a) pomocí metody největšího spádu

b) pomocí metody konjugovaných gradientů

Poznámka: Využijte $\alpha = 0{,}25$. Počáteční bod je (2,1)

Funkce: $f(x_1, x_2) = x_1^2 + 2x_2^2$
Výchozí bod: $x^0 = (2, 1)$
Parametry: $a = 0.25$
Gradient funkce: $\nabla f(x_1, x_2) = (2x_1, 4x_2)$

Směr funkce: $s^k = -g^k$

Následující bod: $x^{k+1} = x^k + \alpha.s^k$

Gradient v bodě x^0: $g^0 = (4,4)$
Směr v bodě x^0: $s^0 = (-4,-4)$
Bod x^1: $x^1 = (2,1) + 0,25.(-4,-4) = (1,0)$

Gradient v bodě x^1: $g^1 = (2,0)$

Směr v bodě x^1: $s^1 = (-2,0)$
Bod x^2: $x^2 = (1,0) + 0,25.(-2,0) = (0.5,0)$

Funkce: $f(x_1, x_2) = x_1^2 + 2x_2^2$
Výchozí bod: $x^0 = (2, 1)$
Parametry: $\alpha = 0.25$
Gradient funkce: $\nabla f(x_1, x_2) = (2x_1, 4x_2)$

Směr funkce: $s^k = -g^k$

Následující bod: $x^{k+1} = x^k + \alpha.s^k$

Gradient v bodě x^0: $g^0 = (4,4)$
Směr v bodě x^0: $s^0 = (-4,-4)$
Bod x^1: $x^1 = (2,1) + 0,25.(-4,-4) = (1,0)$

Gradient v bodě x^1: $g^1 = (2,0)$

Směr v bodě x^1: $s^1 = (-2,0)$
Bod x^1: $x^2 = (1,0) + 0,25.(-2,0) = (0.5,0)$

Funkce: $f(x_1, x_2) = x_1^2 + 2x_2^2$
Výchozí bod: $^0 = (2, 1)$
Parametry: a = 0.25
Gradient funkce: $\nabla f(x_1, x_2) = (2x_1, 4x_2)$

Beta: $\boldsymbol{\beta_{FR}^{(k)} = \frac{\|g^{(k+1)}\|_2^2}{\|g^{(k)}\|_2^2}}$
Směr funkce: $s^k = -g^k \boldsymbol{+ \beta^k.s^k}$

Následující bod: $x^{k+1} = x^k + \alpha.s^k$

Funkce: $f(x_1, x_2) = x_1^2 + 2x_2^2$
Výchozí bod: $x^0 = (2, 1)$
Parametry: a = 0.25
Gradient funkce: $\nabla f(x_1, x_2) = (2x_1, 4x_2)$

Směr funkce: $s^k = -g^k$

Následující bod: $x^{k+1} = x^k + \alpha.s^k$

Gradient v bodě x^0: $g^0 = (4,4)$
Směr v bodě x^0: $s^0 = (-4,-4)$
Bod x^1: $x^1 = (2,1) + 0{,}25.(-4,-4) = (1,0)$

Gradient v bodě x^1: $g^1 = (2,0)$

Směr v bodě x^0: $s^1 = (-2,0)$
Bod x^2: $x^2 = (1,0) + 0{,}25.(-2,0) = (0.5,0)$

Funkce: $f(x_1, x_2) = x_1^2 + 2x_2^2$
Výchozí bod: $^0 = (2, 1)$
Parametry: a = 0.25
Gradient funkce: $\nabla f(x_1, x_2) = (2x_1, 4x_2)$

Beta: $\boldsymbol{\beta_{FR}^{(k)} = \frac{\|g^{(k+1)}\|_2^2}{\|g^{(k)}\|_2^2}}$
Směr funkce: $s^k = -g^k + \boldsymbol{\beta^k.s^k}$

Následující bod: $x^{k+1} = x^k + \alpha.s^k$

Gradient v bodě x^0:
Směr v bodě x^0:
Bod x^1:

Gradient v bodě x^1:
Beta v bodě x^1:
Směr v bodě x^1:
Bod x^1:

Funkce: $f(x_1, x_2) = x_1^2 + 2x_2^2$
Výchozí bod: $x^0 = (2, 1)$
Parametry: a = 0.25
Gradient funkce: $\nabla f(x_1, x_2) = (2x_1, 4x_2)$

Směr funkce: $s^k = -g^k$

Následující bod: $x^{k+1} = x^k + \alpha . s^k$

Gradient v bodě x^0: $g^0 = (4,4)$
Směr v bodě x^0: $s^0 = (-4,-4)$
Bod x^1: $x^1 = (2,1) + 0,25.(-4,-4) = (1,0)$

Gradient v bodě x^1: $g^1 = (2,0)$

Směr v bodě x^0: $s^1 = (-2,0)$
Bod x^1: $x^2 = (1,0) + 0,25.(-2,0) = (0.5,0)$

Funkce: $f(x_1, x_2) = x_1^2 + 2x_2^2$
Výchozí bod: $^0 = (2, 1)$
Parametry: a = 0.25
Gradient funkce: $\nabla f(x_1, x_2) = (2x_1, 4x_2)$

Beta: $\boldsymbol{\beta_{FR}^{(k)} = \frac{\|g^{(k+1)}\|_2^2}{\|g^{(k)}\|_2^2}}$

Směr funkce: $s^k = -g^k + \boldsymbol{\beta^k . s^k}$

Následující bod: $x^{k+1} = x^k + \alpha . s^k$

Gradient v bodě x^0: $g^0 = (4,4)$
Směr v bodě x^0: $s^0 = (-4,-4)$
Bod x^1: $x^1 = (2,1) + 0,25.(-4,-4) = (1,0)$

Gradient v bodě x^1:
Beta v bodě x^1:
Směr v bodě x^1:
Bod x^1:

Funkce: $f(x_1, x_2) = x_1^2 + 2x_2^2$
Výchozí bod: $x^0 = (2, 1)$
Parametry: a = 0.25
Gradient funkce: $\nabla f(x_1, x_2) = (2x_1, 4x_2)$

Směr funkce: $s^k = -g^k$

Následující bod: $x^{k+1} = x^k + \alpha.s^k$

Gradient v bodě x^0: $g^0 = (4,4)$
Směr v bodě x^0: $s^0 = (-4,-4)$
Bod x^1: $x^1 = (2,1) + 0,25.(-4,-4) = (1,0)$

Gradient v bodě x^1: $g^1 = (2,0)$

Směr v bodě x^0: $s^0 = (-2,0)$
Bod x^1: $x^1 = (1,0) + 0,25.(-2,0) = (0.5,0)$

Funkce: $f(x_1, x_2) = x_1^2 + 2x_2^2$
Výchozí bod: $^0 = (2, 1)$
Parametry: a = 0.25
Gradient funkce: $\nabla f(x_1, x_2) = (2x_1, 4x_2)$

Beta: $\boldsymbol{\beta_{FR}^{(k)} = \frac{\|g^{(k+1)}\|_2^2}{\|g^{(k)}\|_2^2}}$

Směr funkce: $s^k = -g^k$ **$+ \beta^k.s^k$**

Následující bod: $x^{k+1} = x^k + \alpha.s^k$

Gradient v bodě x^0: $g^0 = (4,4)$
Směr v bodě x^0: $s^0 = (-4,-4)$
Bod x^1: $x^1 = (2,1) + 0,25.(-4,-4) = (1,0)$

Gradient v bodě x^1: $g^1 = (2,0)$
Beta v bodě x^1: $b^1 = (2.2)/(4.4+4.4) = 4/32 = 0,125$
Směr v bodě x^1: $s^1 = -(2,0)+0.125.(-4,-4) = (-2.5\ ,-0.5)$
Bod x^1: $x^1 = (1,0) + 0,25.(-2,5,-0.5) = (0.375,-0.125)$

Domácí úkol

Proveďte první 3 kroky optimalizace funkce:

$f(x_1, x_2) = x_1^2 + 2x_2^2$

a) pomocí metody konjugovaných gradientů

Poznámka: Využijte $\alpha = 0{,}25$. Počáteční bod je (2,1)

Domácí úkol 2

Připravte implementaci metody konjugovaných gradientů (např. v Excelu, Pythonu apod.) pro Rosenbrockovu funkci:

$$f(x_1, x_2) = 100(x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2$$

Gradient Rosenbrockovy funkce:

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

Výchozí bod:

$x_0 = (-2, 2)$

Parametry:

$\alpha = 0{,}001$