

9. Úvod do optimalizačních metod. Optimalizace geometrie molekuly.

Definice optimalizace

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

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 extrémálními principy“.*

Definice optimalizace II

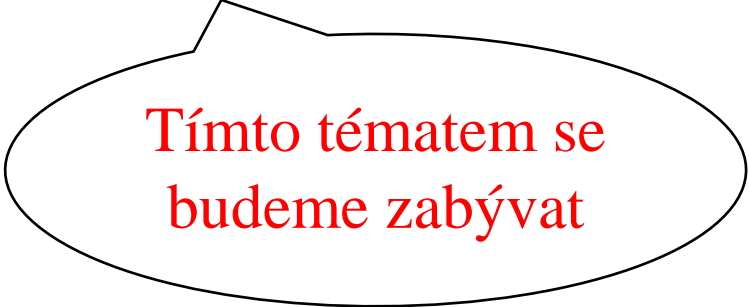
Optimalizaci lze definovat například následovně:

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**



Tímto tématem se
budeme zabývat

Definice optimalizace IV

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

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

$$\text{kde: } f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$$

$$M \subseteq \mathbb{R}^n$$

Definice optimalizace V

Poznámka:

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

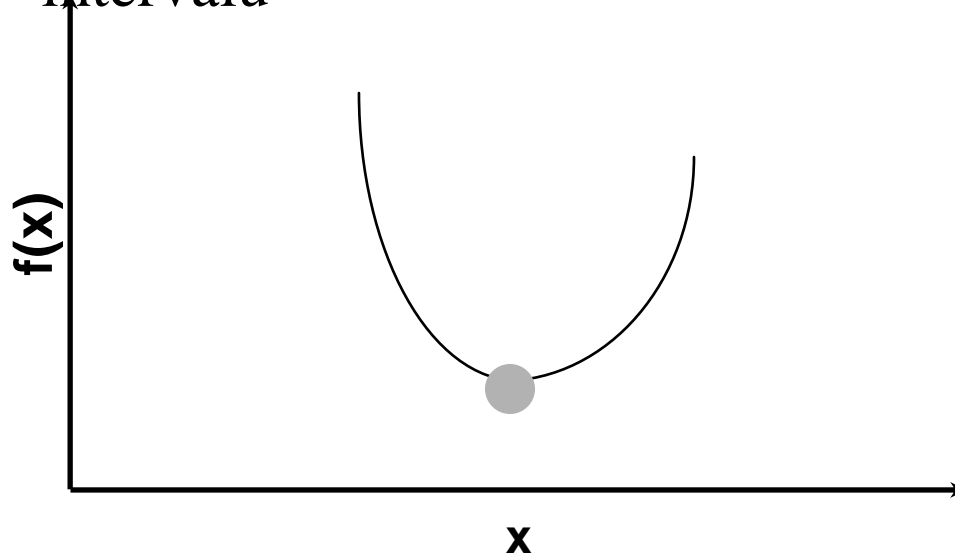
$$\max_{x \in M} f(x) = -\min_{x \in M} (-f(x))$$

Typy optimalizací

Lokální X globální:

Lokální optimalizace:

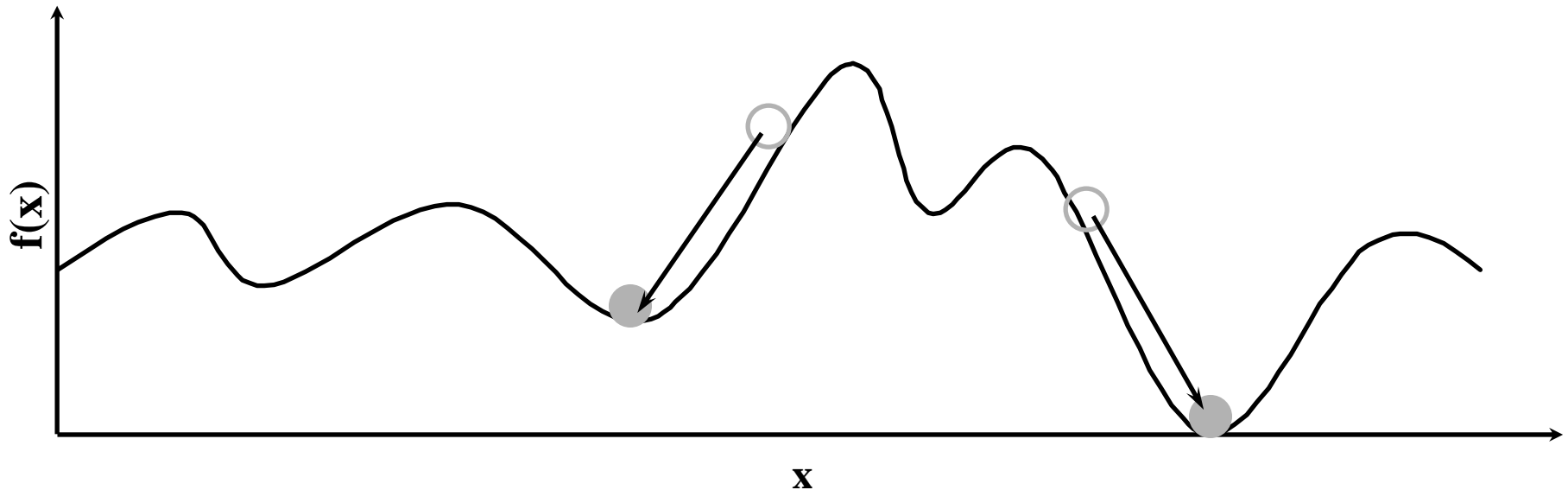
- Nalezení jediného minima, nacházejícího se v určitém intervalu



Typy optimalizací II

Lokální optimalizace – další možný přístup:

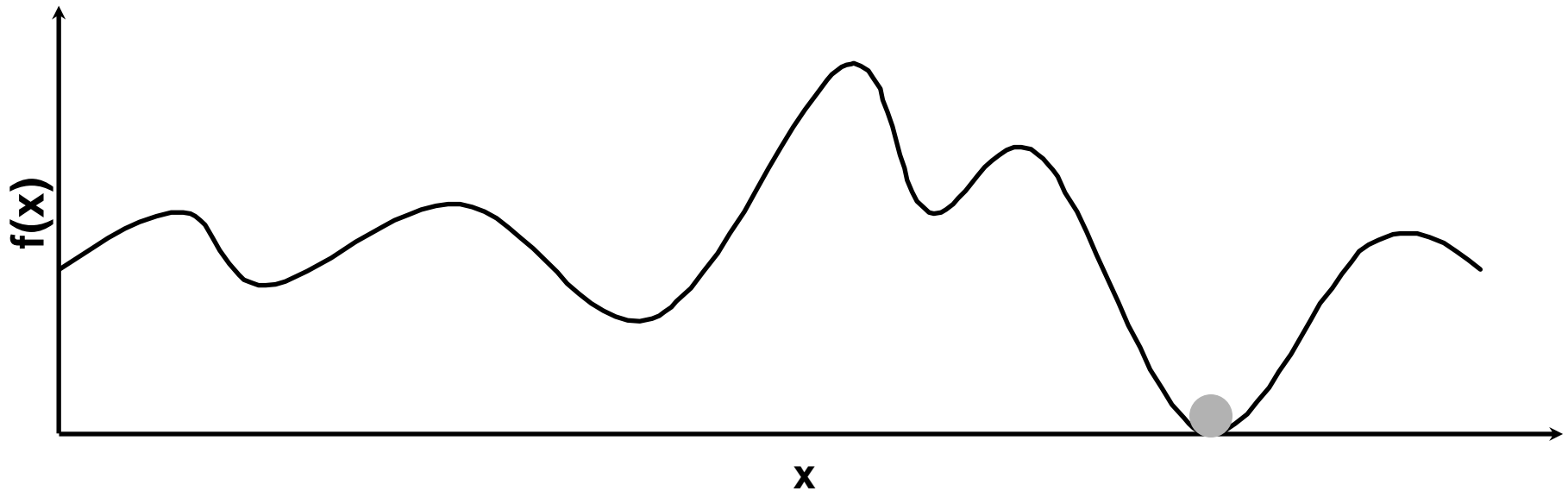
- Nalezení nejbližšího minima do kterého lze sestoupit ze vstupního bodu



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 $f(\mathbf{x})$ neexistuje žádná jiná podmínka, kterou by měla hledaná optimální hodnota \mathbf{x} splňovat.

S omezeními (constrained)

Vedle podmínky minimality pracujeme ještě s dalšími podmínkami.

Lineární X nelineární:

Lineární

$f(\mathbf{x})$ je lineární funkcí \mathbf{x}

Nelineární

jinak

Optimalizační metody

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

Optimalizační metody

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



Vzhledem k
omezenému času
probereme jen
vyznačené
metody

Optimalizační metody

Nederivační (ad hoc) metody

Jednoduché metody

Nelder-Meadova (simplexová) metoda

Nyní se budeme
věnovat jednoduchým
nederivačním metodám

Derivační metody

První derivace

Metoda největšího spádu + další spádové metody

Metoda konjugovaných gradientů

Druhá derivace

Newton-Raphsonova metoda

Quasi-Newtonova metoda

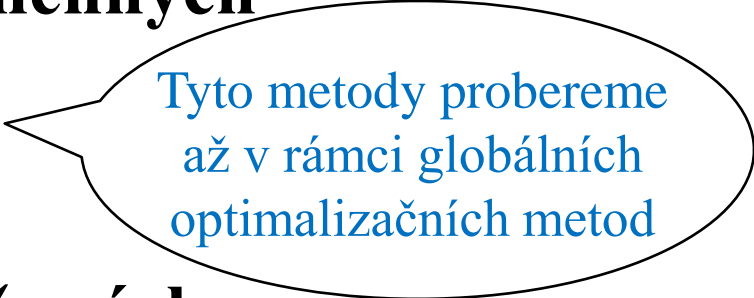
Jednoduché metody

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**



Tyto metody probereme až v rámci globálních optimalizačních metod

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

- 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.

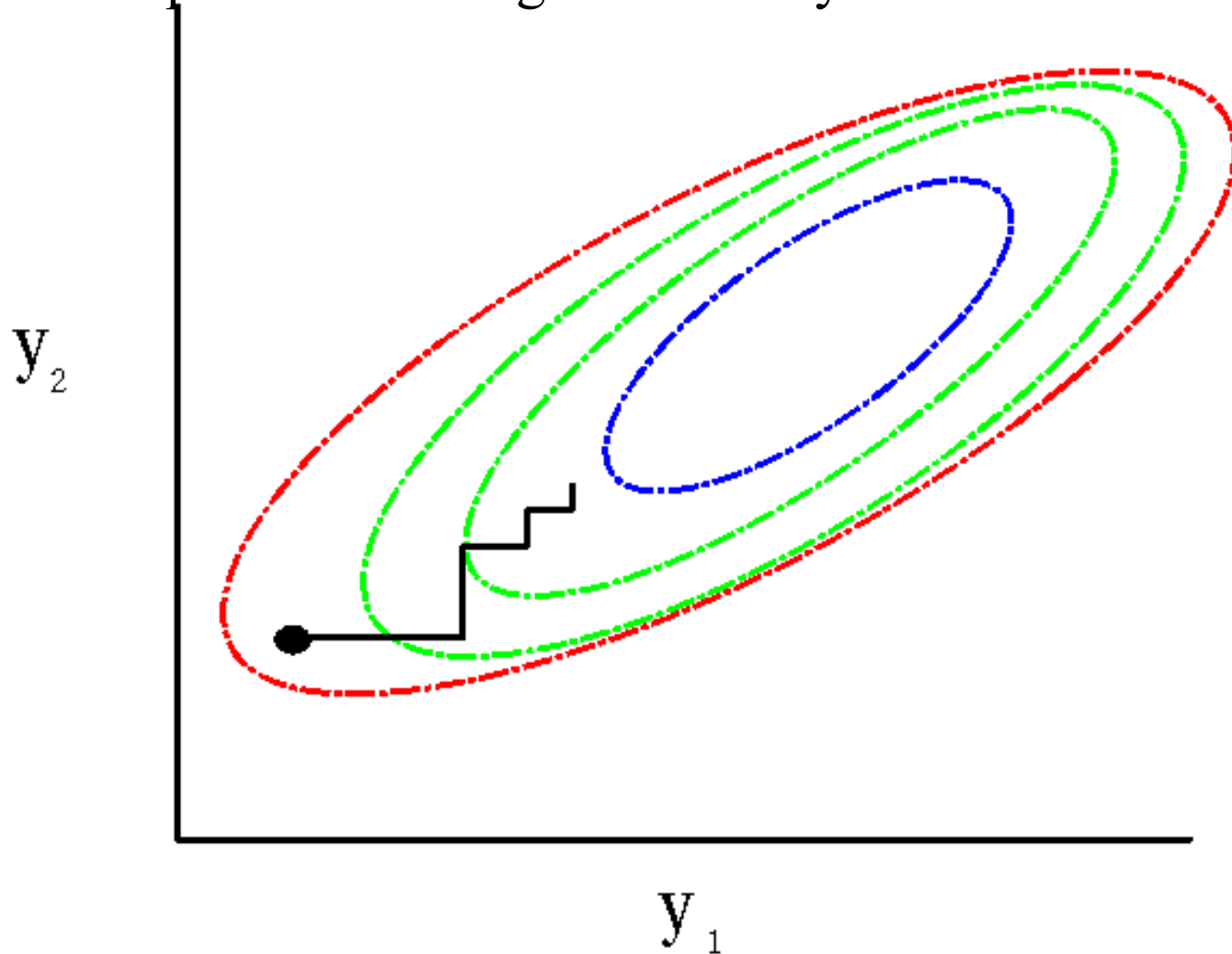
Postup optimalizace je v těchto případech charakterizován oscilačním průběhem (viz následující obrázek).

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:



Optimalizační metody

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

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

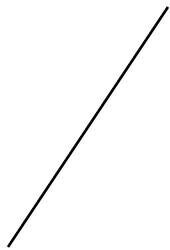
- obecně II

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.

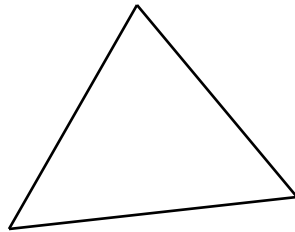
Zápis simplexu: $S = \{p_1, p_2, \dots, p_N\}$, kde $p_i \in \mathbb{R}_N$

Příklady simplexů:

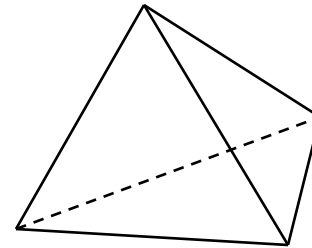
\mathbb{R} :



\mathbb{R}_2 :



\mathbb{R}_3 :

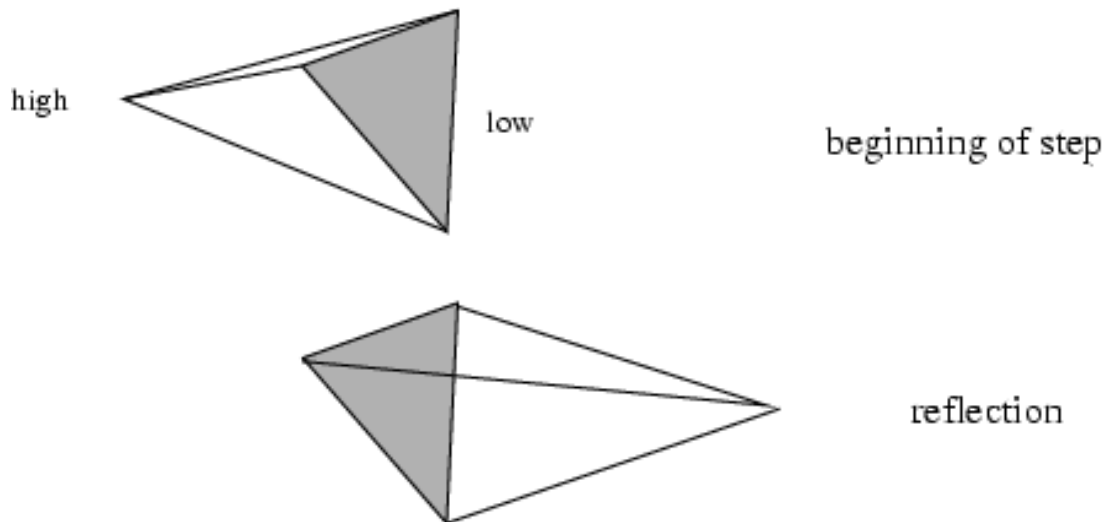


Nelder-Meadova metoda

- transformace

Reflexe:

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

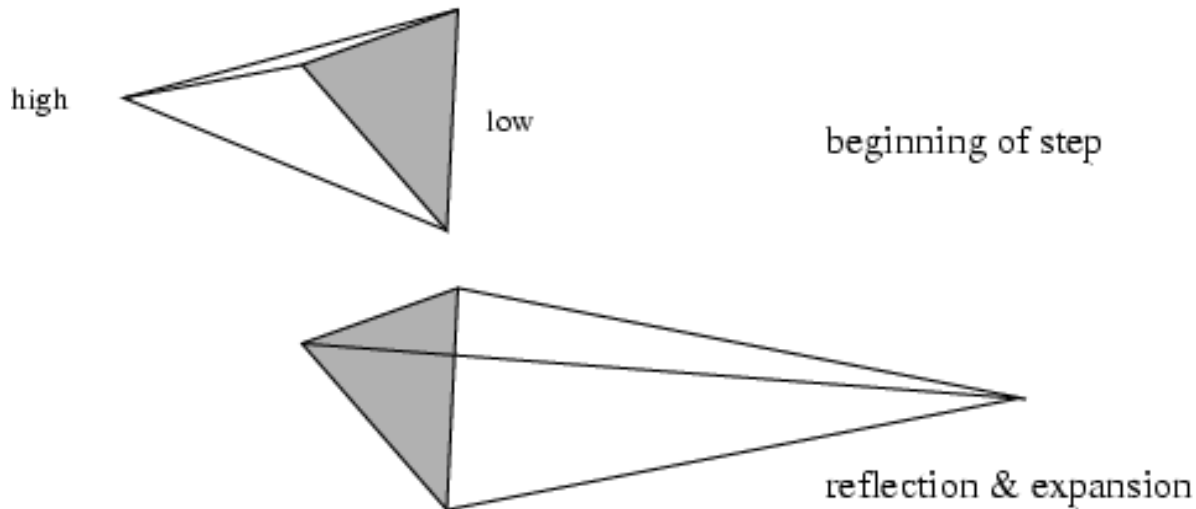


Nelder-Meadova metoda

- 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).

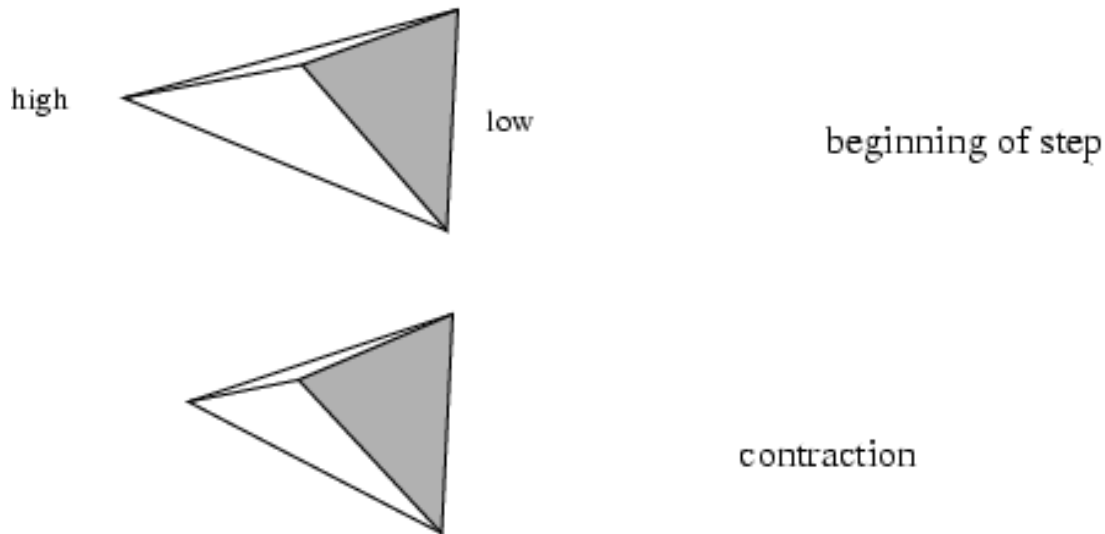


Nelder-Meadova metoda

- 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:

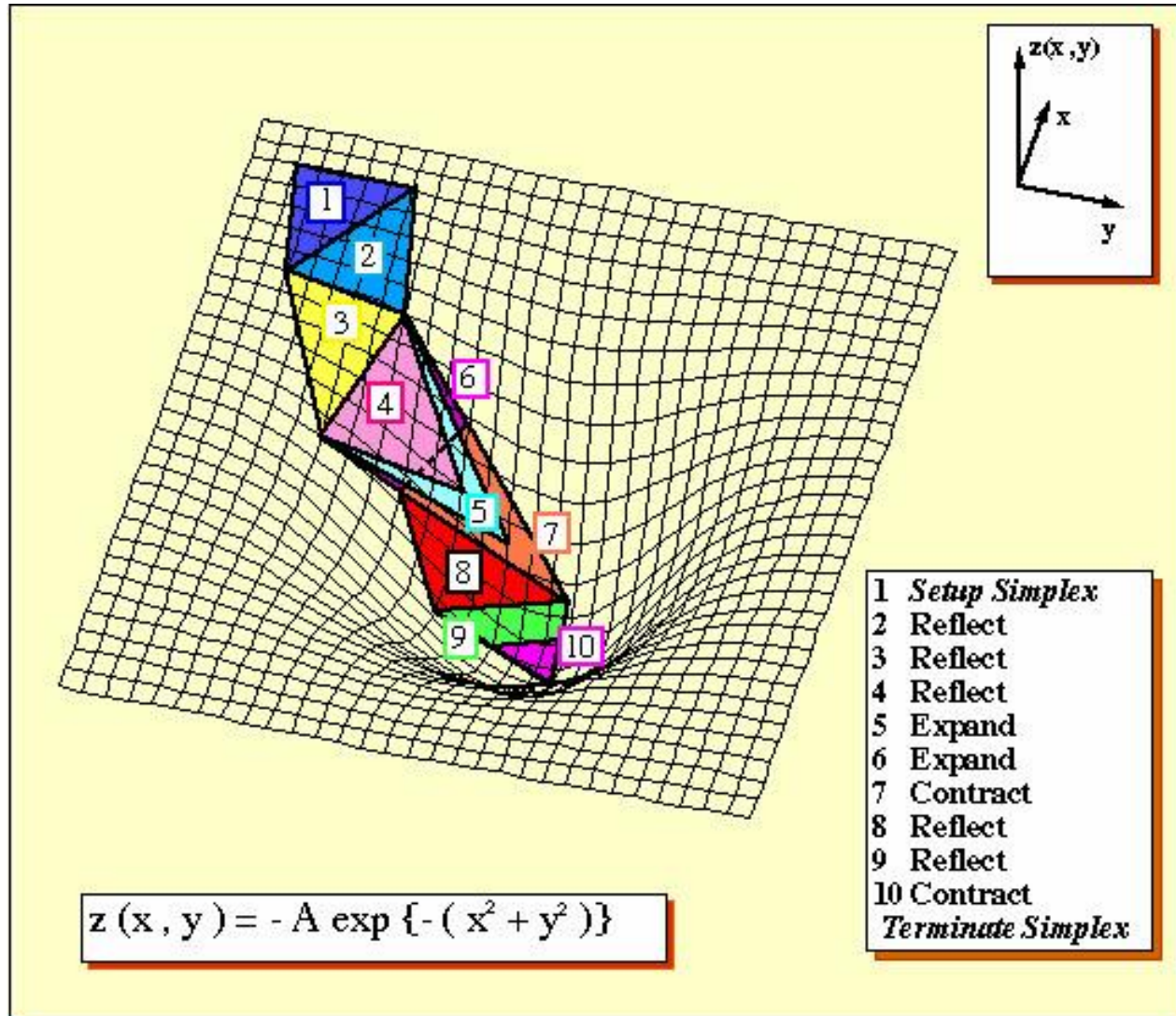
- Jednoduchá implementace
- Rychlý výpočet 1 iterace
- Rychlá konvergence v oblastech daleko od minima

Nevýhody:

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

Nelder-Meadova metoda

- příklad aplikace



Optimalizační metody

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

Matematické základy

Gradient:

- Vektor prvních parciálních derivací funkce f v bodě $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$
- Označujeme ho $\nabla f(\mathbf{x})$:

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

Poznámka: Funkce, kterými se budeme zabývat, budou mít spojité derivace, takže se nám gradient vždy podaří vypočítat :-).

Metoda největšího spádu

Anglicky označována **steepest descent method**.

Princip:

- Nacházím se v počátečním bodě výpočtu, tedy v bodě $\mathbf{x}^{(0)}$.
- Vydám se směrem, ve kterém studovaná funkce nejrychleji klesá. Tedy ve směru záporně vzatého gradientu funkce f v bodě $\mathbf{x}^{(0)}$ (tento gradient označujeme $\nabla f(\mathbf{x}^{(0)})$ nebo zjednodušeně $\mathbf{g}^{(0)}$).
- Poskočím tímto směrem malý kousek (definovaný konstantou α) do nového bodu ($\mathbf{x}^{(1)}$).
- V bodě $\mathbf{x}^{(1)}$ se opět vydám směrem největšího spádu – tedy ve směru záporně vzatého $\mathbf{g}^{(1)}$ neboli $-\mathbf{g}^{(1)}$. A poskočím malý kousek definovaný konstantou α do nového bodu ($\mathbf{x}^{(2)}$).
- Stejně postupujeme i v dalších krocích

Poznámka: Takto se kutálí kulička ze svahu.

Poznámka 2: Vždy poskočíme jen malý kousek, protože nevíme, jestli funkce v původním směru už v novém bodě nepřestává klesat nebo dokonce neroste. Proto v novém bodě opět vyhledám směr největšího spádu.

Metoda největšího spádu

Postup:

- zvolíme výchozí bod $x^{(0)}$

- k-tá iterace:

bod $x^{(k+1)}$ vypočítáme z bodu $x^{(k)}$ pomocí vztahu:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \alpha \cdot g^{(k)}, \text{ kde:}$$

$-g^{(k)}$ zjednodušený zápis $-\nabla f(x^{(k)})$,

určuje **směr přesunu** z bodu $x^{(k)}$

α koeficient, popisující **délku daného přesunu**

Metoda největšího spádu

- volba α v metodě největšího spádu

Metoda největšího spádu volí pro každý krok stejnou hodnotu α .

Konkrétně velmi malou hodnotu α .

Poznámka: Hodnoty α musí být dostatečně malá, aby metoda konvergovala (= blížila se k minimu).

Metoda největšího spádu

zhodnocení

Výhody:

- Implementačně jednoduché
- Nízká prostorová složitost

Nevýhody:

- Velmi pomalá konvergence (speciálně v oblastech malého spádu => nízkých hodnot gradientu).
- Chyby, způsobené zaokrouhlením. Mohou vést i k tomu, že se výpočet vůbec nedostane rozumně blízko k minimu. Ale při (ideální) přesné aritmetice metoda konverguje vždy k nějakému lokálnímu minimu.

Metoda největšího spádu

- příklad 1

Funkce:

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

Výchozí bod:

$$x^{(0)} = (2, 1)$$

Parametr α :

$$\alpha = 0,25$$

Gradient funkce (obecně):

$$g(x_1, x_2) = (2x_1, 4x_2)$$

Poznámka: $g(x_1, x_2) = \left(\frac{\partial(x_1^2 + 2x_2^2)}{\partial x_1}, \frac{\partial(x_1^2 + 2x_2^2)}{\partial x_2} \right)$

Metoda největšího spádu

- příklad 1

Výchozí bod:

$$\mathbf{x}^{(0)} = (2, 1)$$

1. iterace: výpočet $\mathbf{x}^{(1)}$:

$$\mathbf{g}^{(0)} = (2 \cdot \mathbf{x}_1^{(0)}, 4 \cdot \mathbf{x}_2^{(0)}) = (2 \cdot 2, 4 \cdot 1) = (4, 4)$$

$$\mathbf{x}^{(1)} = \mathbf{x}^{(0)} - \alpha \cdot \mathbf{g}^{(0)} = (2, 1) - 0,25 \cdot (4, 4) = (2, 1) - (1, 1) = (1, 0)$$

2. iterace: výpočet $\mathbf{x}^{(2)}$:

$$\mathbf{g}^{(1)} = (2 \cdot 1, 4 \cdot 0) = (2, 0)$$

$$\mathbf{x}^{(2)} = \mathbf{x}^{(1)} - \alpha \cdot \mathbf{g}^{(1)} = (1, 0) - 0,25 \cdot (2, 0) = (1, 0) - (0,5, 0) = (0,5, 0)$$

3. iterace: výpočet $\mathbf{x}^{(3)}$:

$$\mathbf{g}^{(2)} = (2 \cdot 0,5, 4 \cdot 0) = (1, 0)$$

$$\mathbf{x}^{(3)} = \mathbf{x}^{(2)} - \alpha \cdot \mathbf{g}^{(2)} = (0,5, 0) - 0,25 \cdot (1, 0) = (0,5, 0) - (0,25, 0) = (0,25, 0)$$

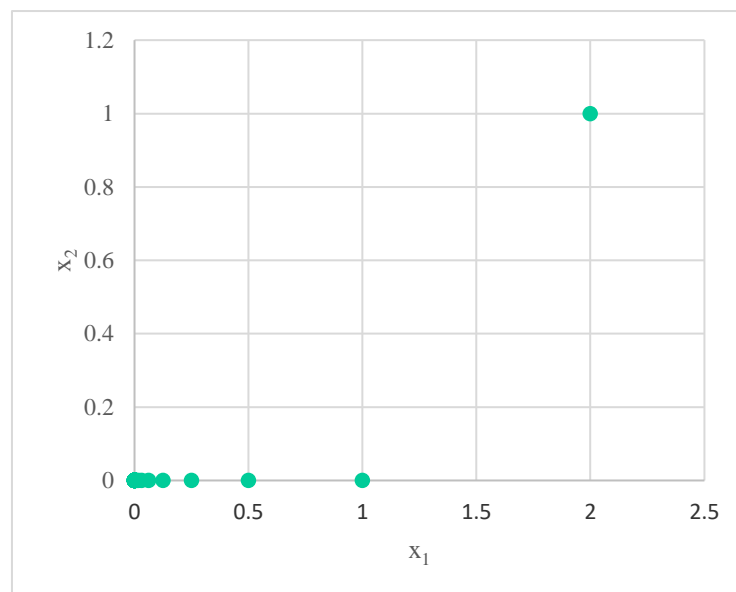
Metoda největšího spádu

- příklad 1

Prvních 20 iterací výpočtu:

Iterace	x_1	x_2	$g(x_1)$	$g(x_2)$	$f(x_1, x_2)$	α
0	2	1	4	4	6	
1	1	0	2	0	1	0.25
2	0.5	0	1	0	0.25	0.25
3	0.25	0	0.5	0	0.0625	0.25
4	0.125	0	0.25	0	0.015625	0.25
5	0.0625	0	0.125	0	0.003906	0.25
6	0.03125	0	0.0625	0	0.000977	0.25
7	0.015625	0	0.03125	0	0.000244	0.25
8	0.007813	0	0.015625	0	6.1E-05	0.25
9	0.003906	0	0.007813	0	1.53E-05	0.25
10	0.001953	0	0.003906	0	3.81E-06	0.25
11	0.000977	0	0.001953	0	9.54E-07	0.25
12	0.000488	0	0.000977	0	2.38E-07	0.25
13	0.000244	0	0.000488	0	5.96E-08	0.25
14	0.000122	0	0.000244	0	1.49E-08	0.25
15	6.1E-05	0	0.000122	0	3.73E-09	0.25
16	3.05E-05	0	6.1E-05	0	9.31E-10	0.25
17	1.53E-05	0	3.05E-05	0	2.33E-10	0.25
18	7.63E-06	0	1.53E-05	0	5.82E-11	0.25
19	3.81E-06	0	7.63E-06	0	1.46E-11	0.25
20	1.91E-06	0	3.81E-06	0	3.64E-12	0.25

Graf posunu bodu $x^{(k)}$ do minima:



Metoda největšího spádu

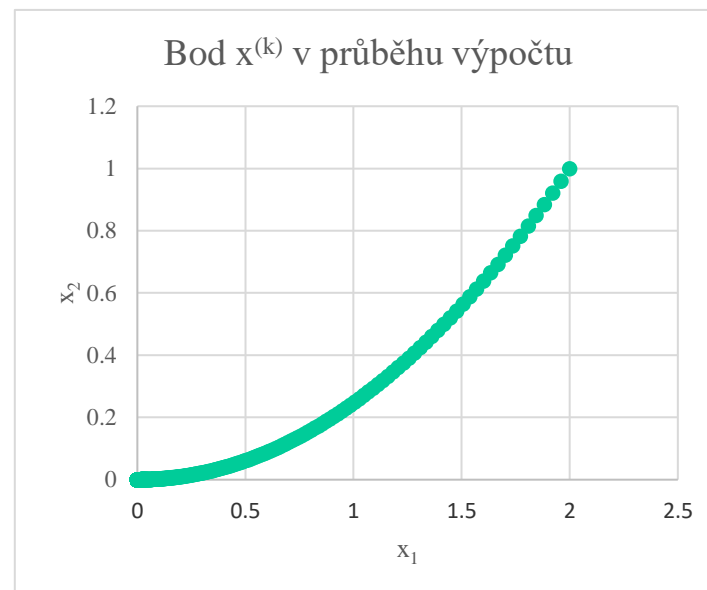
- příklad 1 b)

Nižší hodnota α ($\alpha = 0,01$) má za důsledek pomalejší přesun do minima.

Prvních 20 iterací výpočtu:

Iterace	x_1	x_2	$g(x_1)$	$g(x_2)$	$f(x_1, x_2)$	α
0	2	1	4	4	6	
1	1.96	0.96	3.92	3.84	5.6848	0.01
2	1.9208	0.9216	3.8416	3.6864	5.388166	0.01
3	1.882384	0.884736	3.764768	3.538944	5.108885	0.01
4	1.844736	0.849347	3.689473	3.397386	4.845831	0.01
5	1.807842	0.815373	3.615683	3.261491	4.597956	0.01
6	1.771685	0.782758	3.54337	3.131031	4.364286	0.01
7	1.736251	0.751447	3.472502	3.00579	4.143914	0.01
8	1.701526	0.72139	3.403052	2.885558	3.935997	0.01
9	1.667496	0.692534	3.334991	2.770136	3.739748	0.01
10	1.634146	0.664833	3.268291	2.659331	3.554437	0.01
11	1.601463	0.638239	3.202925	2.552957	3.379382	0.01
12	1.569433	0.61271	3.138867	2.450839	3.213948	0.01
13	1.538045	0.588201	3.07609	2.352805	3.057543	0.01
14	1.507284	0.564673	3.014568	2.258693	2.909617	0.01
15	1.477138	0.542086	2.954276	2.168346	2.769653	0.01
16	1.447595	0.520403	2.895191	2.081612	2.637171	0.01
17	1.418644	0.499587	2.837287	1.998347	2.511723	0.01
18	1.390271	0.479603	2.780541	1.918413	2.392891	0.01
19	1.362465	0.460419	2.72493	1.841677	2.280283	0.01
20	1.335216	0.442002	2.670432	1.76801	2.173534	0.01

Graf posunu bodu $x^{(k)}$ do minima:



Metoda největšího spádu

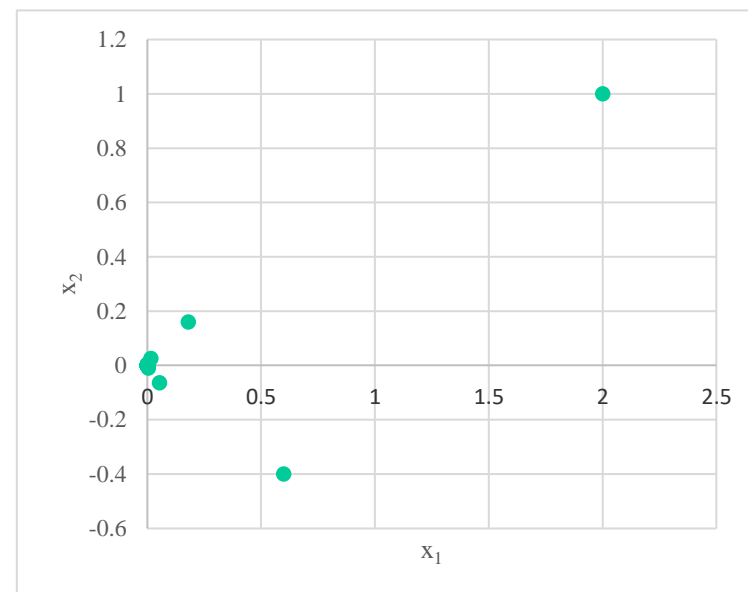
- příklad 1 c)

Vyšší hodnota α ($\alpha = 0,35$) má za důsledek rychlejší přesun do minima.

Prvních 20 iterací výpočtu:

Iterace	x_1	x_2	$g(x_1)$	$g(x_2)$	$f(x_1, x_2)$	α
0	2	1	4	4	6	
1	0.6	-0.4	1.2	-1.6	0.68	0.35
2	0.18	0.16	0.36	0.64	0.0836	0.35
3	0.054	-0.064	0.108	-0.256	0.011108	0.35
4	0.0162	0.0256	0.0324	0.1024	0.001573	0.35
5	0.00486	-0.01024	0.00972	-0.04096	0.000233	0.35
6	0.001458	0.004096	0.002916	0.016384	3.57E-05	0.35
7	0.000437	-0.00164	0.000875	-0.00655	5.56E-06	0.35
8	0.000131	0.000655	0.000262	0.002621	8.76E-07	0.35
9	3.94E-05	-0.00026	7.87E-05	-0.00105	1.39E-07	0.35
10	1.18E-05	0.000105	2.36E-05	0.000419	2.21E-08	0.35
11	3.54E-06	-4.2E-05	7.09E-06	-0.00017	3.53E-09	0.35
12	1.06E-06	1.68E-05	2.13E-06	6.71E-05	5.64E-10	0.35
13	3.19E-07	-6.7E-06	6.38E-07	-2.7E-05	9.02E-11	0.35
14	9.57E-08	2.68E-06	1.91E-07	1.07E-05	1.44E-11	0.35
15	2.87E-08	-1.1E-06	5.74E-08	-4.3E-06	2.31E-12	0.35
16	8.61E-09	4.29E-07	1.72E-08	1.72E-06	3.69E-13	0.35
17	2.58E-09	-1.7E-07	5.17E-09	-6.9E-07	5.9E-14	0.35
18	7.75E-10	6.87E-08	1.55E-09	2.75E-07	9.45E-15	0.35
19	2.32E-10	-2.7E-08	4.65E-10	-1.1E-07	1.51E-15	0.35
20	6.97E-11	1.1E-08	1.39E-10	4.4E-08	2.42E-16	0.35

Graf posunu bodu $x^{(k)}$ do minima:



Metoda největšího spádu

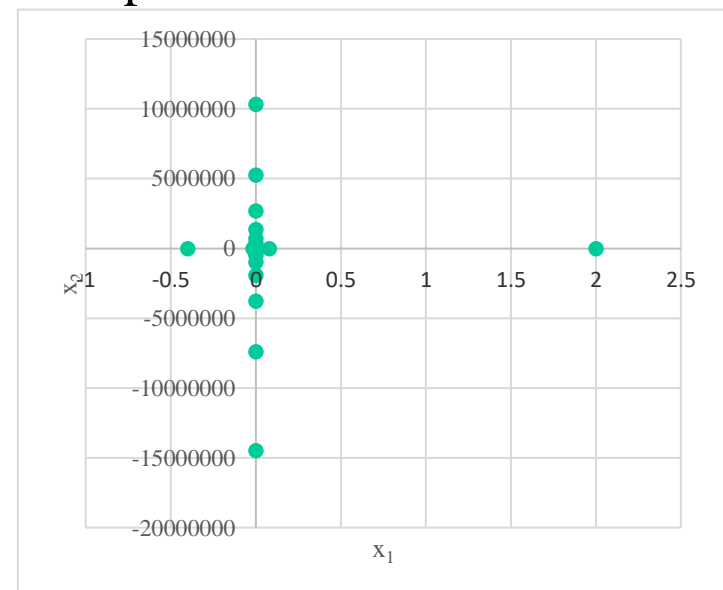
- příklad 1 d)

Příliš vysoká hodnota α ($\alpha = 0,6$) má za důsledek, že metoda nekonverguje k minimu.

Prvních 20 iterací výpočtu:

Iterace	x_1	x_2	$g(x_1)$	$g(x_2)$	$f(x_1, x_2)$	a
0	2	1	4	4	6	
1	-0.4	-1.4	-0.8	-5.6	4.08	0.6
2	0.08	1.96	0.16	7.84	7.6896	0.6
3	-0.016	-2.744	-0.032	-10.976	15.05933	0.6
4	0.0032	3.8416	0.0064	15.3664	29.51579	0.6
5	-0.00064	-5.37824	-0.00128	-21.513	57.85093	0.6
6	0.000128	7.529536	0.000256	30.11814	113.3878	0.6
7	-2.6E-05	-10.5414	-5.1E-05	-42.1654	222.2401	0.6
8	5.12E-06	14.75789	1.02E-05	59.03156	435.5907	0.6
9	-1E-06	-20.661	-2E-06	-82.6442	853.7577	0.6
10	2.05E-07	28.92547	4.1E-07	115.7019	1673.365	0.6
11	-4.1E-08	-40.4957	-8.2E-08	-161.983	3279.796	0.6
12	8.19E-09	56.69391	1.64E-08	226.7756	6428.399	0.6
13	-1.6E-09	-79.3715	-3.3E-09	-317.486	12599.66	0.6
14	3.28E-10	111.1201	6.55E-10	444.4803	24695.34	0.6
15	-6.6E-11	-155.568	-1.3E-10	-622.272	48402.86	0.6
16	1.31E-11	217.7953	2.62E-11	871.1813	94869.61	0.6
17	-2.6E-12	-304.913	-5.2E-12	-1219.65	185944.4	0.6
18	5.24E-13	426.8789	1.05E-12	1707.515	364451.1	0.6
19	-1E-13	-597.63	-2.1E-13	-2390.52	714324.2	0.6
20	2.1E-14	836.6826	4.19E-14	3346.73	1400075	0.6

Graf posunu bodu $x^{(k)}$ do minima:



Metoda největšího spádu

- příklad 1

Ve studijních materiálech naleznete i excelový soubor **metody_prvni_derivace_priklad1.xlsx**. V tomto souboru jsou výše uvedené grafy a tabulky.

Metoda největšího spádu

- příklad 2

Funkce:

$$f(x_1, x_2) = 2x_1 - 2x_2 + x_1x_2 + 2x_1^2 + x_2^2$$

Výchozí bod:

$$x^{(0)} = (0, 0)$$

Parametr α :

$$\alpha = 0,1$$

Gradient funkce (obecně):

$$g(x_1, x_2) = (2+x_2+4x_1, -2+x_1+2x_2)$$

Metoda největšího spádu

- příklad 2

Výchozí bod:

$$\mathbf{x}^{(0)} = (0, 0)$$

1. iterace: výpočet $\mathbf{x}^{(1)}$:

$$\mathbf{g}^{(0)} = (2+0+4 \cdot 0, -2+0+2 \cdot 0) = (2, -2)$$

$$\mathbf{x}^{(1)} = \mathbf{x}^{(0)} - \alpha \cdot \mathbf{g}^{(0)} = (0, 0) - 0,1 \cdot (2, -2) = (0, 0) - (0,2, -0,2) = (-0,2, 0,2)$$

2. iterace: výpočet $\mathbf{x}^{(2)}$:

$$\mathbf{g}^{(1)} = (2+0,2-4 \cdot 0,2, -2-0,2+2 \cdot 0,2) = (1,4, -1,8)$$

$$\mathbf{x}^{(2)} = \mathbf{x}^{(1)} - \alpha \cdot \mathbf{g}^{(1)} = (-0,2, 0,2) - 0,1 \cdot (1,4, -1,8) = (-0,2, 0,2) - (0,14, -0,18) = (-0,34, 0,38)$$

3. iterace: výpočet $\mathbf{x}^{(3)}$:

$$\mathbf{g}^{(2)} = (2+0,38-4 \cdot 0,34, -2-0,34+2 \cdot 0,38) = (1,02, -1,58)$$

$$\mathbf{x}^{(3)} = \mathbf{x}^{(2)} - \alpha \cdot \mathbf{g}^{(2)} = (-0,34, 0,38) - 0,1 \cdot (-0,34, 0,38) = (-0,442, 0,538)$$

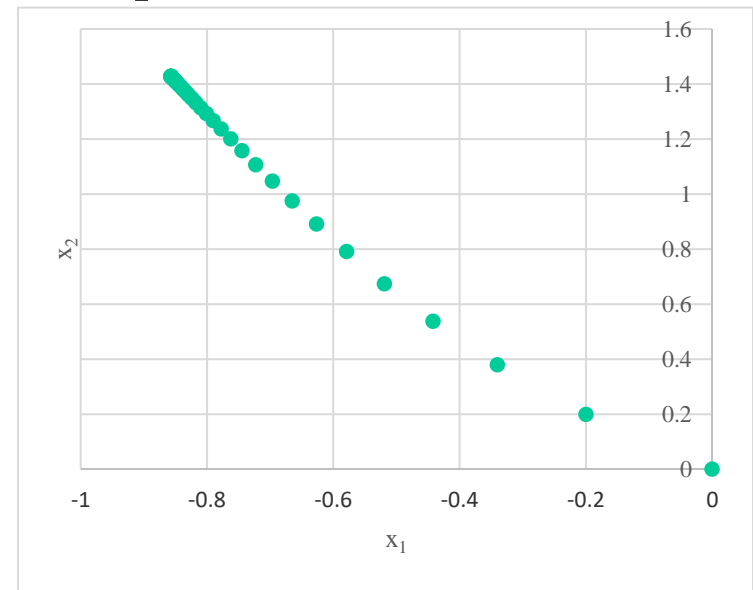
Metoda největšího spádu

- příklad 2

Prvních 20 iterací výpočtu:

Iterace	x_1	x_2	$g(x_1)$	$g(x_2)$	$f(x_1, x_2)$	α
0	0	0	2	-2	0	
1	-0.2	0.2	1.4	-1.8	-0.72	0.1
2	-0.34	0.38	1.02	-1.58	-1.1936	0.1
3	-0.442	0.538	0.77	-1.366	-1.51762	0.1
4	-0.519	0.6746	0.5986	-1.1698	-1.74351	0.1
5	-0.57886	0.79158	0.47614	-0.9957	-1.90234	0.1
6	-0.62647	0.89115	0.385254	-0.84417	-2.01444	0.1
7	-0.665	0.975567	0.31557	-0.71386	-2.09371	0.1
8	-0.69656	1.046954	0.260728	-0.60265	-2.14979	0.1
9	-0.72263	1.107219	0.216702	-0.50819	-2.18949	0.1
10	-0.7443	1.158038	0.18084	-0.42822	-2.21759	0.1
11	-0.76238	1.20086	0.151327	-0.36066	-2.23748	0.1
12	-0.77752	1.236927	0.126862	-0.30366	-2.25157	0.1
13	-0.7902	1.267293	0.106484	-0.25562	-2.26154	0.1
14	-0.80085	1.292855	0.089452	-0.21514	-2.2686	0.1
15	-0.8098	1.314369	0.075185	-0.18106	-2.2736	0.1
16	-0.81731	1.332475	0.063217	-0.15237	-2.27713	0.1
17	-0.82364	1.347711	0.053167	-0.12821	-2.27964	0.1
18	-0.82895	1.360532	0.044721	-0.10789	-2.28141	0.1
19	-0.83342	1.371321	0.037622	-0.09078	-2.28267	0.1
20	-0.83719	1.380399	0.031651	-0.07639	-2.28356	0.1

Graf posunu bodu $x^{(k)}$ do minima:



Metoda největšího spádu

- příklad 1

Ve studijních materiálech naleznete i excelový soubor **metody_prvni_derivace_priklad2.xlsx**. V tomto souboru je výše uvedený graf a tabulka.

Podmínky ukončení optimalizace

Minimalizaci lze ukončit, když je splněna alespoň jedna z těchto podmínek:

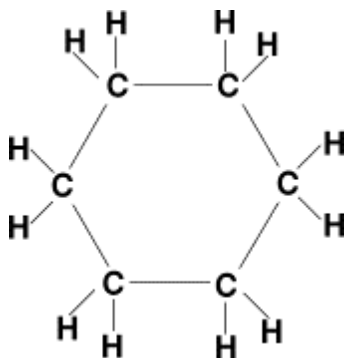
- Hodnota gradientu se blíží nule
Zdůvodnění: V minimu platí $\mathbf{g} = 0$.
- Bod \mathbf{x} se vzhledem k minulé iteraci posune jen minimálně
- Funkční hodnota $f(\mathbf{x})$ se vzhledem k minulé iteraci změní jen minimálně

Motivační příklad: Optimalizace geometrie molekuly

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

Konformace = uspořádání atomů v prostoru.

Strukturní vzorec:



Konformace:



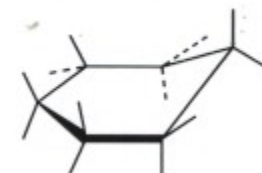
Židličková



Zkřížená židličková



Vaničková



Poloviční židličková

Motivační příklad: Optimalizace geometrie molekuly

**Čím je konformace stabilnější, tím nižší má
potenciální energii.**

Potenciální energie = energie daného uspořádání
atomů v prostoru.

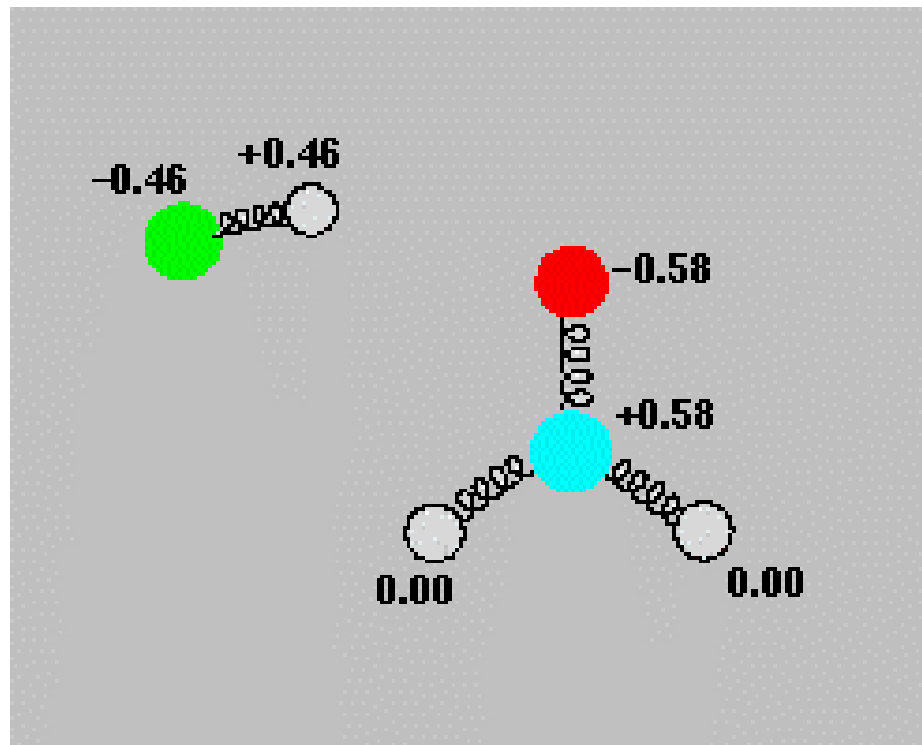
$E_{\text{pot}} = \phi(\text{souřadnic atomů})$

kde ϕ je potenciálová funkce

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

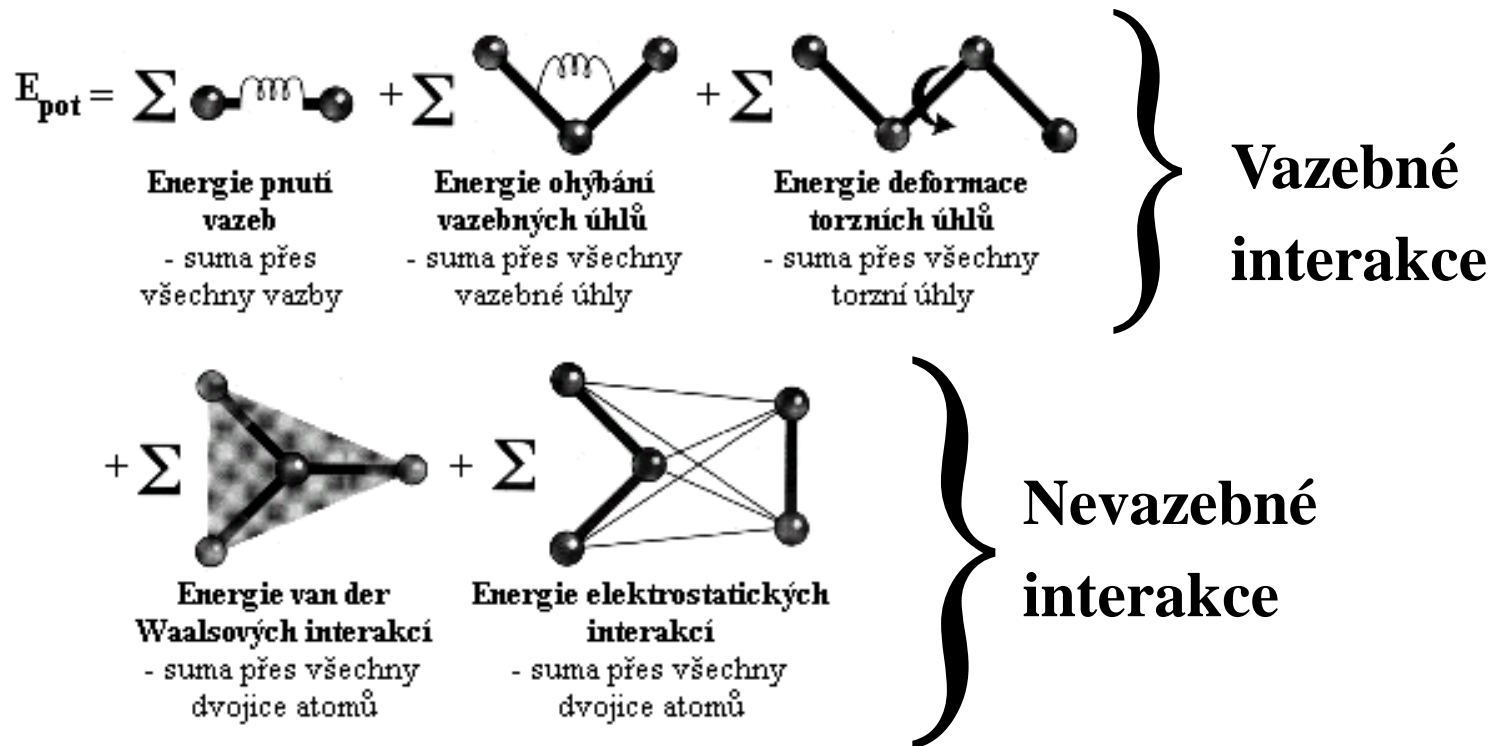
Motivační příklad: Optimalizace geometrie molekuly

Vytvoříme model molekuly:
Nabité koule, spojené pružinami.



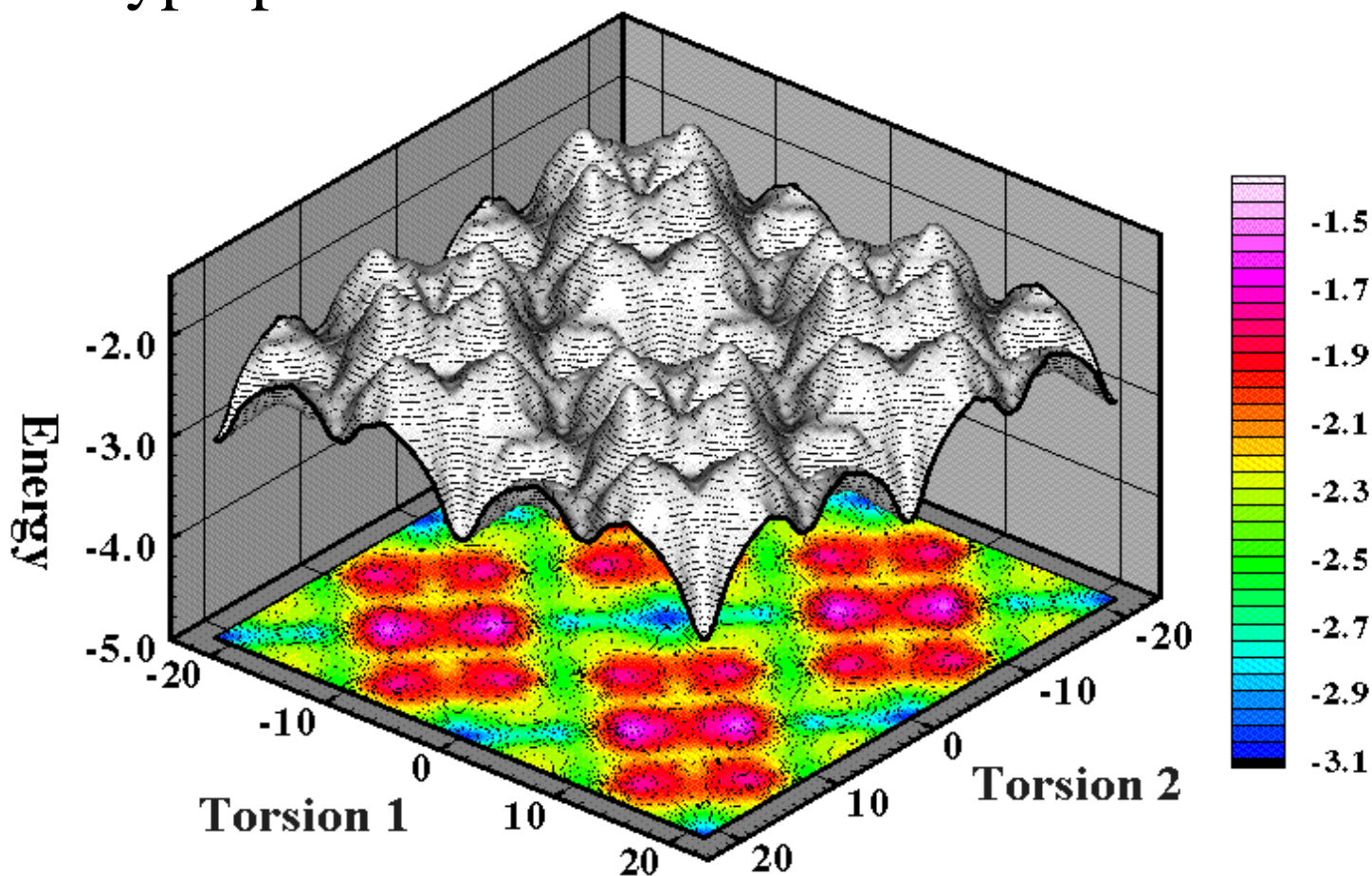
Motivační příklad: Optimalizace geometrie molekuly

Popíšeme vztah mezi souřadnicemi a E_{pot} :



Motivační příklad: Optimalizace geometrie molekuly

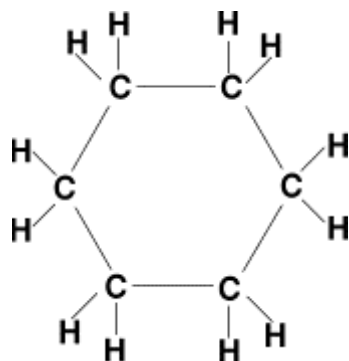
Grafem potenciálové funkce je
potenciálová hyperplocha
(PES):



Motivační příklad: Optimalizace geometrie molekuly

Otázka: Které prostorové uspořádání (konformace) cyklohexanu je energeticky nejvýhodnější?

Strukturní vzorec:



Možné konformace:



Židličková



Zkřížená židličková



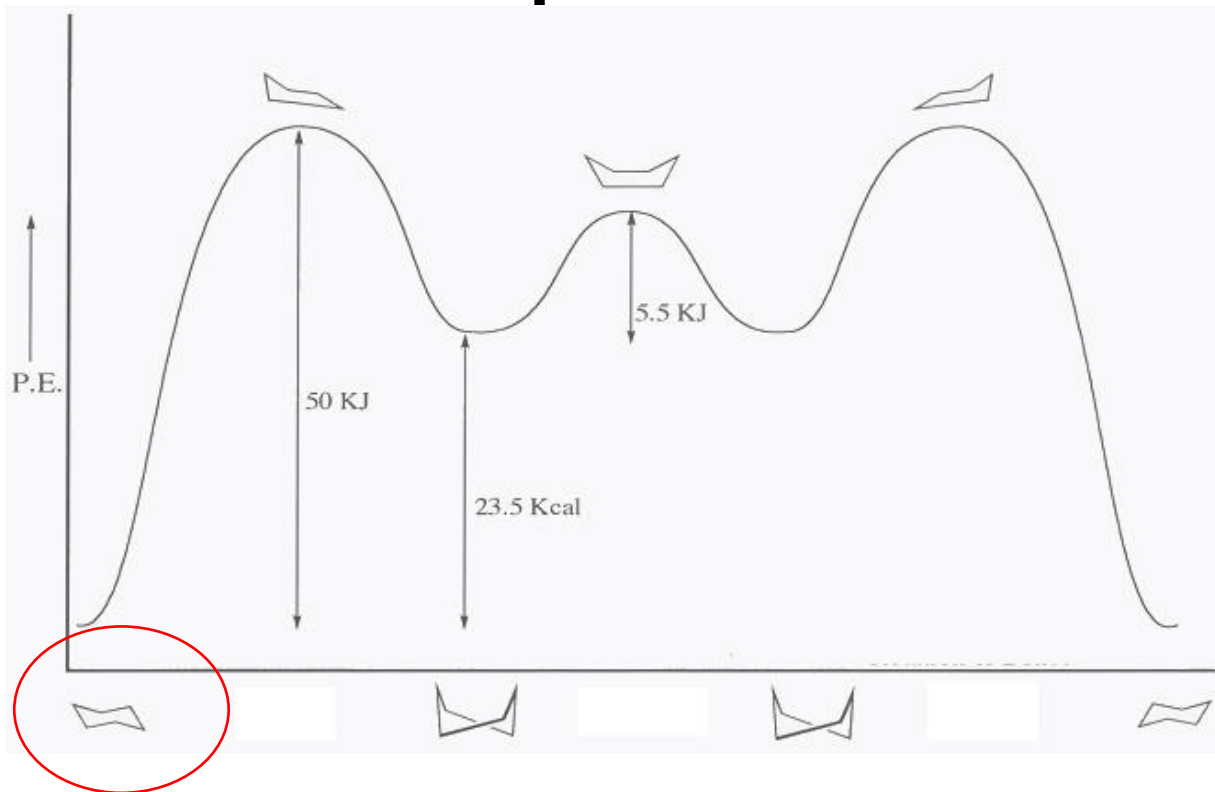
Vaničková



Poloviční židličková

Motivační příklad: Optimalizace geometrie molekuly

Hledáme minima potenciálové funkce.



*Nejnižší potenciální energii má židličková konformace
Tento výsledek souhlasí s experimentálními výsledky.*