Optimalizace

Metody hledání volných lokálních extrémů

Tomáš Kroupa, Lukáš Adam

FEL ČVUT

Obsah

Iterační metody

Hledáme lokální minimum funkce $f\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ pomocí konstrukce posloupnosti bodů $\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \ldots \in \mathbb{R}^n$. Volíme počáteční bod $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^n$, směr hledání $\mathbf{v}_k \in \mathbb{R}^n$ a délku kroku $\alpha_k > 0$.

Iterace

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{v}_k$$

- Sestupná metoda splňuje $f(\mathbf{x}_{k+1}) < f(\mathbf{x}_k)$
- Sestupný směr $\mathbf{v}_k$ splňuje $f'(\mathbf{x}_k)\mathbf{v}_k < 0$
- Optimální délku kroku α_k lze nalézt minimalizací funkce

$$\varphi(\alpha_k) := f(\mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{v}_k)$$

Metoda největšího spádu

Iterace

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \alpha_k \nabla f(\mathbf{x}_k)$$

- Směr $-\nabla f(\mathbf{x}_k)$ je sestupný
- Robustní
- Může konvergovat velmi pomalu nebo dokonce divergovat

Implementační detaily

- Zastavovací podmínka:
  - Předem daný počet iterací.
  - Zastavení, když je reziduál malý. Například norma gradientu nebo hodnota funkce (když je známá optimální hodnota).

- Délka kroku α_k:
  - Fixní konstantní, například $\alpha_k = 0.1$.
  - Fixní klesající, například $\alpha_k = \frac{1}{k}$.
  - Adaptivní, například Armijo podmínka

    $$f\big(x_k - \alpha_k \nabla f(x_k)\big) \le f(x_k) - c\alpha_k \|\nabla f(x_k)\|^2$$

    pro nějaké $c \in (0,1)$ malé.

Newtonova metoda

Hledáme řešení soustavy rovnic $\mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$, kde $\mathbf{g}\colon\ \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ je diferencovatelné zobrazení.

Iterace

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)^{-1}\mathbf{g}(\mathbf{x}_k)$$

- Jacobiho matice musí být regulární
- Rychlá konvergence
- Nutno začít s dobrou aproximací $\mathbf{x}_0$ řešení

Newtonova metoda na minimalizaci funkce

Hledáme lokální minimum dvakrát diferencovatelné funkce $f\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ pomocí řešení rovnice $f'(\mathbf{x})^\mathsf{T} = \mathbf{0}$.

Iterace

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - f''(\mathbf{x}_k)^{-1} f'(\mathbf{x}_k)^\mathsf{T}$$

- Newtonův směr $\mathbf{v}_k := -f''(\mathbf{x}_k)^{-1} f'(\mathbf{x}_k)^\mathsf{T}$ je sestupný, pokud $\mathbf{x}_k$ není stacionární bod a matice $f''(\mathbf{x}_k)$ je pozitivně definitní
- Čistá Newtonova metoda ($\alpha_k := 1$)
- Pro velká n je drahé počítat Hessián a jeho inverzi

Reference

T. Werner. *Optimalizace* (kapitola 9). Elektronická skripta. FEL ČVUT, 2020.

G. Goh. *Why Momentum Really Works.* `https://distill.pub/2017/momentum/`

Matlab Activities for Multivariable Calculus. `https://mse.redwoods.edu/darnold/math50c/matlab/`