Optimalizace

Metody hledání volných lokálních extrémů

Tomáš Kroupa, Mirko Navara

24. 4. 2024

FEL ČVUT

Obsah

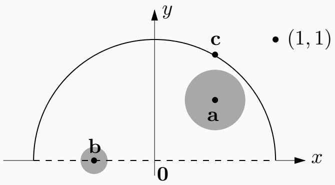
Vnitřek a hranice množiny

Nechť $X \subseteq \mathbb{R}^n$. Bod $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ je její

- vnitřní bod, pokud $\exists \varepsilon > 0 : B_\varepsilon(\mathbf{x}) \subseteq X$,
- vnější bod, pokud $\exists \varepsilon > 0 : B_\varepsilon(\mathbf{x}) \subseteq \mathbb{R}^n \setminus X$, tj. $B_\varepsilon(\mathbf{x}) \cap X = \emptyset$,
- hraniční bod, pokud
  $\forall \varepsilon > 0 : B_\varepsilon(\mathbf{x}) \cap X \neq \emptyset,\ B_\varepsilon(\mathbf{x}) \cap (\mathbb{R}^n \setminus X) \neq \emptyset$.

Které body jsou vnitřní a které hraniční?

$$X = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 \mid x^2 + y^2 \leq 1,\ y > 0\} \ \cup\ \{(1, 1)\}$$



Extrémy funkce na množině

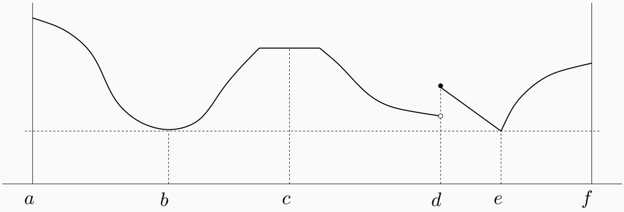
Funkce $f\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ nabývá na množině $X \subseteq \mathbb{R}^n$ v bodě $\mathbf{x} \in X$

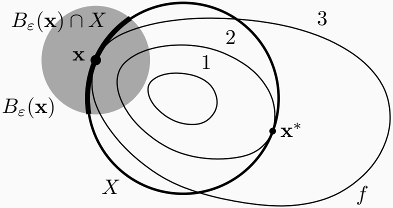
- minima, pokud $f(\mathbf{x}) \le f(\mathbf{y})$ pro všechna $\mathbf{y} \in X$,
- lokálního minima, pokud existuje $\varepsilon > 0$ tak, že $f(\mathbf{x}) \le f(\mathbf{y})$ pro všechna $\mathbf{y} \in X \cap B_\varepsilon(\mathbf{x})$.

(Lokální) minimum v bodě $\mathbf{x}$ je

- volné, pokud $\mathbf{x}$ je vnitřním bodem množiny X,
- vázané, pokud $\mathbf{x}$ je hraničním bodem množiny X.

Extrémy funkce na množině – příklady





Podmínka prvního řádu

Stacionární bod $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ funkce $f\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ splňuje $f'(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$.

Věta

Nechť $X \subseteq \mathbb{R}^n$, $\mathbf{x} \in X$, je vnitřní bod množiny X a $f\colon X \to \mathbb{R}$ je diferencovatelná v $\mathbf{x}$. Je-li $\mathbf{x}$ lokální extrém funkce f na X, platí

$$f'(\mathbf{x}) = \mathbf{0}\,,$$

tj. $\mathbf{x}$ je stacionární bod funkce f.

Stacionární body se celkem dobře hledají, takže mnoho úloh se budeme snažit převést na řešení soustavy rovnic $f'(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$.
K rozhodnutí, zda stacionární bod je extrém, nám mohou (ale nemusí!) pomoci druhé derivace.

Parciální derivace druhého řádu

Věta

Nechť $f\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ a $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$. Jestliže druhé parciální derivace

$$\frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_i\,\partial x_j} = \mathrm{D}_j\mathrm{D}_i f(\mathbf{x})\,, \qquad \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_j\,\partial x_i} = \mathrm{D}_i\mathrm{D}_j f(\mathbf{x})$$

v bodě $\mathbf{x}$ existují a jsou v bodě $\mathbf{x}$ spojité, potom jsou si rovny.

Hessova matice je

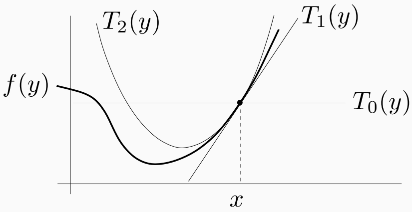
$$f''(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_1\,\partial x_1} & \dots & \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_1\,\partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_n\,\partial x_1} & \dots & \frac{\partial^2 f(\mathbf{x})}{\partial x_n\,\partial x_n} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathrm{D}_1\mathrm{D}_1 f(\mathbf{x}) & \dots & \mathrm{D}_n\mathrm{D}_1 f(\mathbf{x}) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathrm{D}_1\mathrm{D}_n f(\mathbf{x}) & \dots & \mathrm{D}_n\mathrm{D}_n f(\mathbf{x}) \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n\times n}$$

Obvykle symetrická, je maticí nějaké kvadratické formy.

Determinant Hessovy matice, $\det f''(\mathbf{x})$, se nazývá hessián.

Taylorův polynom pro funkci $f\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$

Hledáme polynom k-tého stupně $T_k\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, který má v bodě $\mathbf{x}$ všechny parciální derivace až do řádu k stejné jako funkce f.



Taylorovy polynomy v bodě x do stupně 2

$$T_0(\mathbf{y}) = f(\mathbf{x})$$

$$T_1(\mathbf{y}) = f(\mathbf{x}) + f'(\mathbf{x})\,(\mathbf{y}-\mathbf{x})$$

$$T_2(\mathbf{y}) = f(\mathbf{x}) + f'(\mathbf{x})\,(\mathbf{y}-\mathbf{x}) + \frac{1}{2}\,(\mathbf{y}-\mathbf{x})^{\mathsf{T}}\, f''(\mathbf{x})\,(\mathbf{y}-\mathbf{x})$$

Podmínky druhého řádu

Věta

Nechť $X \subseteq \mathbb{R}^n$, $\mathbf{x} \in X$ je vnitřní bod množiny X a $f\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ je dvakrát diferencovatelná v $\mathbf{x}$. Je-li $\mathbf{x}$ stacionární bod, platí:

- Pokud je $\mathbf{x}$ lokální minimum, pak je Hessova matice $f''(\mathbf{x})$ pozitivně semidefinitní.
- Pokud je $f''(\mathbf{x})$ pozitivně definitní, pak je $\mathbf{x}$ ostré lokální minimum.
- Pokud je $f''(\mathbf{x})$ indefinitní, pak $\mathbf{x}$ není lokální extrém, ale sedlový bod.

Iterační metody minimalizace funkce

Hledáme lokální minimum funkce f: $\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ 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 parametr $\alpha_k > 0$, určující délku kroku $\alpha_k \|\mathbf{v}_k\|$.

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 $f'(\mathbf{x}_k)\,\mathbf{v}_k < 0$ (tj. $\nabla f(\mathbf{x}_k)^{\mathrm{T}}\,\mathbf{v}_k < 0$).

Gradientní metoda minimalizace funkce

Iterace gradientní metody

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

- Směr $-\nabla f(\mathbf{x}_k)$ je sestupný.
- Optimální parametr α_k lze nalézt minimalizací funkce

  $$\varphi_k(\alpha) := f(\mathbf{x}_k + \alpha\, \mathbf{v}_k) ,$$

  ale často to nestojí za velké úsilí.
- Můžeme zvolit α velké a exponenciálně zmenšovat, dokud nedocílíme pokles kritéria (pokud každý pokus stojí stejně!).
- Robustní metoda.
- Může konvergovat velmi pomalu.
- Alternativa: metoda sdružených gradientů – zapamatuje si směr předchozích kroků a využije pro další postup.

Newtonova metoda řešení soustavy rovnic

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

$$T_{1,k}(\mathbf{x}_{k+1}) = \mathbf{g}(\mathbf{x}_k) + \mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)\,(\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k) = \mathbf{0}\,.$$

Iterace

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

- Jacobiho matice $\mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)$ musí být regulární (raději dobře podmíněná).
- Konvergence rychlá, ale nezaručená.
- Nutno začít s dobrou počáteční aproximací řešení, $\mathbf{x}_0$.

Newtonova metoda minimalizace funkce

Hledáme možné lokální minimum dvakrát diferencovatelné funkce $f\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ jako řešení rovnice $\mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$, kde $\mathbf{g}(\mathbf{x}) := \nabla f(\mathbf{x}) = f'(\mathbf{x})^\mathsf{T}$.

Iterace Newtonovy metody

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

obecněji

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

Pro srovnání:

Iterace gradientní metody

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

Newtonova metoda minimalizace funkce

Hledáme možné lokální minimum dvakrát diferencovatelné funkce f jako řešení rovnice $\mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$, kde $\mathbf{g}(\mathbf{x}) := \nabla f(\mathbf{x}) = f'(\mathbf{x})^{\mathsf{T}}$.

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

- Používá afinní aproximaci zobrazení $\mathbf{g} = f'$, a tedy kvadratickou aproximaci funkce f.
- Doporučuje i délku kroku.
- Zatímco při řešení obecné soustavy $\mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ může být Jacobiho matice $\mathbf{g}'(\mathbf{x}_k)$ zobrazení $\mathbf{g}$ libovolná, zde je *symetrická*, neboť je to Hessova matice $f''(\mathbf{x}_k)$ funkce f.
- Přesto může být výpočet této matice a její inverze pracný.
- Je-li $f'(\mathbf{x}_k) = \mathbf{0}$, pak jsme našli stacionární bod (řešení?).

Kdy je Newtonův směr sestupný (mimo stacionární body)

Pro $f'(\mathbf{x}_k) \neq \mathbf{0}$ je Newtonův směr $-f''(\mathbf{x}_k)^{-1} f'(\mathbf{x}_k)^\mathsf{T}$ sestupný, pokud je matice $f''(\mathbf{x}_k)$ pozitivně definitní.

Obecněji:

Tvrzení

Je-li $\mathbf{x} \in \mathbb{R}$, $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$, a $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ symetrická pozitivně definitní matice, pak úhel $\angle(\mathbf{x}, \mathbf{A}\,\mathbf{x})$ je ostrý.

Důkaz

Výraz

$$\mathbf{x}^\mathsf{T}\,\mathbf{A}\,\mathbf{x}$$

je současně skalárním součinem vektorů $\mathbf{x}$, $\mathbf{A}\,\mathbf{x}$ i pozitivně definitní kvadratickou formou, takže je kladný.

Totéž platí i pro inverzní matici $\mathbf{A}^{-1}$.

Jak snadno najít sestupný směr diferencovatelné funkce

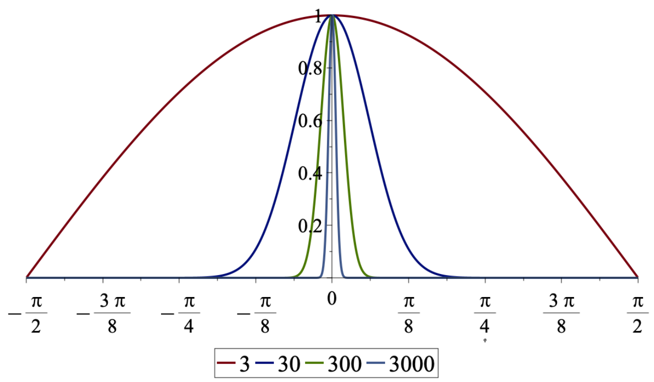
Pro náhodně zvolený vektor $\mathbf{v}_k \in \mathbb{R}^n$ vypočteme směrovou derivaci

- je-li nulová, možná už jsme ve stacionárním bodě;
- je-li záporná, $\mathbf{v}_k$ je sestupný směr;
- je-li kladná, $-\mathbf{v}_k$ je sestupný směr.

Mohli bychom tedy směr volit náhodně, ale snažili jsme se postupovat lépe a rychleji.

Prokletí dimenzionality

Ve velké dimenzi jsou skoro všechny směry skoro kolmé:



Tvar (neznormované!) hustoty rozdělení zeměpisných šířek z rovnoměrného rozdělení na sféře v *n* dimenzích

Alternativa: Soustřeďme se na menší počet dimenzí, v tom umíme vybrat směr a nedá to moc práce.

Opakujme pro další dimenze
$\implies$ BCD = *block coordinate descent*.

Někdy se dá úloha rozložit na více menších, které se neovlivňují, nebo se aspoň ovlivňují málo.

Vhodné dimenze umí vybrat PCA = *principal component analysis*.

Reference

- T. Werner. *Optimalizace* (kapitola 8). Elektronická skripta. FEL ČVUT, 17. 10. 2022. https://cw.fel.cvut.cz/wiki/_media/courses/b0b33opt/opt.pdf
- J. Hamhalter a J. Tišer. *Diferenciální počet funkcí více proměnných*. FEL ČVUT, 2005. https://math.fel.cvut.cz/en/people/tiser/dipocet.pdf
- G. Goh. *Why Momentum Really Works.* https://distill.pub/2017/momentum/
- *Matlab Activities for Multivariable Calculus.* https://mse.redwoods.edu/darnold/math50c/matlab/
- M. Navara. *Matematika spojitého světa*. Elektronická skripta. FEL ČVUT, 2011. https://cmp.felk.cvut.cz/~navara/MSS/MSS_print.pdf