Optimalizace a teorie her

Numerické metody optimalizace

Martin Bohata

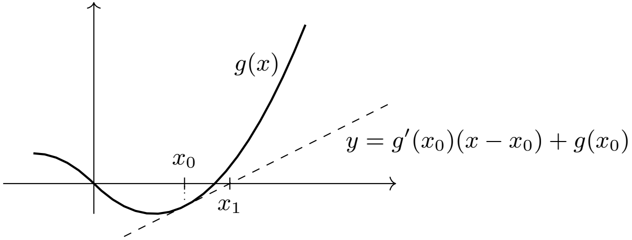
Katedra matematiky
FEL ČVUT v Praze
bohata@math.feld.cvut.cz

Newtonova metoda v jednorozměrné optimalizaci

Je dána rovnice $g(x) = 0$, kde $g \in C^1(\mathbb{R})$. Nechť $x_0 \in \mathbb{R}$. Položme

$$x_{k+1} = x_k - \frac{g(x_k)}{g'(x_k)},$$

$k \in \mathbb{N}_0$.



- Předpokládáme, že $g'(x_k) \neq 0$ pro každé $k \in \mathbb{N}_0$.
- Pokud x_0 je dostatečně blízko řešení $\hat{x}$ rovnice $g(x) = 0$, pak $x_k \to \hat{x}$.

Newtonova metoda v jednorozměrné optimalizaci

Je dána funkce $f \in C^2(\mathbb{R})$. Hledejme stacionární body funkce f, tj. řešme rovnici $f'(x) = 0$. Z Newtonovy metody pro řešení rovnic plyne, že

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f'(x_k)}{f''(x_k)}$$

Algoritmus

1. Zvolíme $\varepsilon > 0$ a $x_0 \in \mathbb{R}$. Položíme $k = 0$.
2. Vypočítáme $f'(x_k)$ a $f''(x_k)$.
3. Je-li $|f'(x_k)| < \varepsilon$, pak algoritmus končí a x_k je hledaná aproximace stacionárního bodu. V opačném případě přejdeme na další krok.
4. Položíme

   $$x_{k+1} = x_k - \frac{f'(x_k)}{f''(x_k)},$$

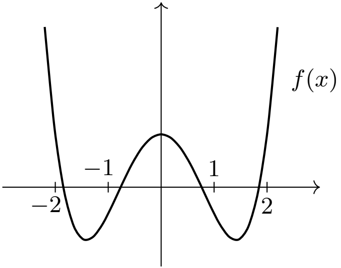
   (nutno zkontrolovat, že $f''(x_k) \neq 0$) hodnotu k zvýšíme o 1 a jdeme na krok 2.

Newtonova metoda v jednorozměrné optimalizaci

- Pro kvadratickou funkci dostaneme řešení v jediném kroku.

Příklad

Je dána funkce $f(x) = x^4 - 4x^2 + 2$.



1. Zvolíme-li $x_0 = \frac{1}{2}$, pak $x_1 = -\frac{1}{5}$, $x_2 \approx 0,085$, $x_3 \approx -6 \cdot 10^{-7}$, ...
2. Zvolíme-li $x_0 = 1$, pak $x_1 = 2$, $x_2 = \frac{8}{5}$, $x_3 \approx 1,442$, ...

Nepodmíněná optimalizace

V dalším se omezíme na minimalizační úlohy.
Chceme nalézt alespoň přibližně bod minima (alespoň lokálního) funkce $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$.

Postup:

- Zvolíme x_0 a konstruujeme posloupnost, jejíž členy jsou dány

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k,$$

  kde $\alpha_k \geq 0$ je **délka k-tého kroku** a $d_k \in \mathbb{R}^n$ je **směr k-tého kroku**.
- Vhodnou volbou délky kroku a směru se snažíme dosáhnout toho, aby $f(x_{k+1}) < f(x_k)$.

Otázky:

- Jak volit x_0, α_k a d_k, aby $(x_k)_{k=0}^{\infty}$ konvergovalo k bodu minima (alespoň lokálního)?
- Jak volit pravidlo pro zastavení algoritmu?

Nepodmíněná optimalizace – Metoda největšího spádu

V metodě největšího spádu předpokládáme, že $f \in C^1(\mathbb{R}^n)$.

Volba směru d_k:

- Chceme, aby $f(x_{k+1}) < f(x_k)$, a proto za směr d_k budeme volit směr poklesu, tj. prvek z $\mathcal{D}(f; x_k)$.
- Konkrétně volme $d_k = -\nabla f(x_k)$.
- Jestliže $\nabla f(x_k) \neq 0$, pak $d_k \in \mathcal{D}_0(f; x_k) \subseteq \mathcal{D}(f; x_k)$.
- Směr $d_k = -\nabla f(x_k)$ je směr největšího poklesu v bodě x_k.

Nepodmíněná optimalizace – Metoda největšího spádu

Jak volit délku kroku α_k?

- Pevná volba kroku $\alpha_k = \alpha$ pro každé $k \in \mathbb{N}_0$. Příliš velké α může zkazit konvergenci.
  (Je-li $f(x) = \frac{1}{2}\|x\|^2$, $\alpha = 11$ a $x_0 = (1,1)^T$, pak $x_k = ((-10)^k, (-10)^k)^T$.)
- $\alpha_k \in \operatorname{argmin}_{\alpha \geq 0} f(x_k - \alpha \nabla f(x_k))$.

Příklad

Ať $f(x) = \frac{1}{2}\langle Qx, x\rangle + \langle x, c\rangle$, kde $Q \in \mathbb{M}_n(\mathbb{R})$ je pozitivně definitní matice a $c \in \mathbb{R}^n$. Pak

$$\alpha_k = \frac{\|\nabla f(x_k)\|^2}{\langle Q\nabla f(x_k), \nabla f(x_k)\rangle} \in \operatorname*{argmin}_{\alpha \geq 0} f(x_k - \alpha \nabla f(x_k)).$$

Kritérium zastavení:

- $\|\nabla f(x_k)\| < \varepsilon$.
- Další možnosti jsou $\|x_{k+1} - x_k\| < \varepsilon$, $|f(x_{k+1}) - f(x_k)| < \varepsilon, \ldots$
- Možná je i kombinace více kritérií.

Nepodmíněná optimalizace – Metoda největšího spádu

Algoritmus

1. Zvolme $x_0 \in \mathbb{R}^n$, $\varepsilon > 0$. Položme $k = 0$.
2. Je-li $\|\nabla f(x_k)\| < \varepsilon$, pak algoritmus končí a x_k je hledaná aproximace. V opačném případě přejdeme na další krok.
3. Položíme $d_k = -\nabla f(x_k)$.
4. Nalezneme $\alpha_k \in \operatorname{argmin}_{\alpha \geq 0} f(x_k - \alpha \nabla f(x_k))$.
5. Položíme $x_{k+1} = x_k - \alpha_k \nabla f(x_k)$. Zvýšíme hodnotu k o 1 a jdeme na krok 2.

Pro uvedenou verzi algoritmu platí:

- $(x_{k+1} - x_k) \perp (x_{k+2} - x_{k+1})$ (díky volbě délky kroku pomocí minimalizační úlohy).
- Za vhodných předpokladů metoda konverguje ke stacionárnímu bodu.
- V blízkosti stacionárního bodu konverguje pomalu („zig-zag efekt“).

Nepodmíněná optimalizace – Metoda největšího spádu

Příklad

Je dána funkce

$$f(x, y) = \frac{1}{2}\left(x^2 + 2y^2\right).$$

Pokud položíme $(x_0, y_0)^T = (2, 1)^T$, pak

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix} = \frac{1}{3}\begin{pmatrix} 2 \\ -1 \end{pmatrix},$$
$$\begin{pmatrix} x_2 \\ y_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{9}\begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix},$$
$$\begin{pmatrix} x_3 \\ y_3 \end{pmatrix} = \frac{1}{27}\begin{pmatrix} 2 \\ -1 \end{pmatrix},$$
$$\vdots$$

Nepodmíněná optimalizace – Newtonova metoda

Zobecnění jednorozměrného případu. Požadavek $f \in C^2(\mathbb{R}^n)$.

- Směr v k-tém kroku je $d_k = -[\nabla^2 f(x_k)]^{-1} \nabla f(x_k)$.
- Je d_k skutečně směr poklesu? Jestliže $\nabla f(x_k) \neq 0$ a $\nabla^2 f(x_k)$ je pozitivně definitní, pak ano (dokonce $d_k \in \mathcal{D}_0(f; x_k)$).
- Délka kroku $\alpha_k = 1$.

Příklad

Ať $f(x,y) = x^2 + y^2 + xy^2$. Je-li $(x_0, y_0)^T = (1,1)^T$, pak $(x_1, y_1)^T = (0, \frac{1}{2})^T$, $(x_2, y_2)^T = (\frac{1}{6}, -\frac{1}{12})^T$,...

Podmíněná optimalizace – Metoda projekce gradientu

- Metoda nevětšího spádu „přímočaře“ zobecněná do podmíněné optimalizace.
- Předpoklady: $f \in C^1(\mathbb{R}^n)$ a $C \subseteq \mathbb{R}^n$ je neprázdná, uzavřená a konvexní.
- Nulovost gradientu již není vhodným kritériem pro zastavení.

Algoritmus

1. Zvolme $x_0 \in C$ a $\varepsilon > 0$. Položme $k = 0$.
2. Vypočteme $d_k = -\nabla f(x_k)$.
3. Nalezneme $\alpha_k \in \operatorname{argmin}_{\alpha \geq 0} f(x_k - \alpha \nabla f(x_k))$.
4. Položíme $x_{k+1} = P_C\left(x_k - \alpha_k \nabla f(x_k)\right)$.
5. Je-li $|f(x_{k+1}) - f(x_k)| < \varepsilon$, pak algoritmus končí a x_k je hledaná aproximace. V opačném případě zvýšíme hodnotu k o 1 a jdeme na krok 2.

Podmíněná optimalizace – Metoda projekce gradientu

Příklad

Ať $f(x,y) = x + \frac{3}{2}y^2 - 2y$, $C = \left\{(x,y)^T \in \mathbb{R}^2 \,\middle|\, x \geq 1\right\}$ a $(x_0, y_0) = (1,0)^T$. Volme $\alpha = \frac{1}{2}$. Pak

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} x_2 \\ y_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} x_3 \\ y_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{3}{4} \end{pmatrix}$$

$$\vdots$$

Lze ukázat, že pro $k \in \mathbb{N}$ je $\begin{pmatrix} x_k \\ y_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{2}{3}\left(1 - \left(-\frac{1}{2}\right)^k\right) \end{pmatrix}$.

Podmíněná optimalizace – Metoda penalizačních funkcí

Nechť $f, g_1, \ldots, g_m \in C^1(\mathbb{R}^n)$ a je dána úloha

$$\left.\begin{array}{ll} \text{minimalizujte} & f(x) \\ \text{za podmínek} & g_1(x) \leq 0, \\ & \vdots \\ & g_m(x) \leq 0. \end{array}\right\} (U)$$

- Chceme nahradit (U) úlohami nepodmíněné optimalizace.
- $p(x) = \sum_{i=1}^{m} [\max\{0, g_i(x)\}]^2 \ldots$ **penalizační funkce**.

Algoritmus

1. Zvolme $\varepsilon > 0$, $c_0 > 0$ a $\alpha > 1$. Položme $k = 0$.
2. Nalezněme bod minima x_k funkce $f(x) + c_k p(x)$ na $\mathbb{R}^n$.
3. Je-li $c_k p(x_k) < \varepsilon$, pak algoritmus končí a x_k je hledaná aproximace. V opačném případě položíme $c_{k+1} = \alpha c_k$, zvýšíme hodnotu k o 1 a jdeme na krok 2.

Podmíněná optimalizace – Metoda penalizačních funkcí

Příklad

Je dána funkce $f(x) = (x+1)^2$ a $M = \{x \in \mathbb{R} \,|\, x \geq 0\}$. Pak

$$p(x) = \max\{0, -x\}^2.$$

Volme $\varepsilon = \frac{1}{10}$, $c_0 = 1$, $\alpha = 10$.

- $x_0 = -\frac{1}{2}$. Protože $c_0 p(x_0) = \frac{1}{4} > \varepsilon$, položíme $c_1 = \alpha c_0 = 10$ a jdeme na další iteraci.
- $x_1 = -\frac{1}{11}$. Protože $c_1 p(x_1) \leq \frac{1}{11} < \varepsilon$ algoritmus končí.