

Obsah

1	Optimalizační metody	4
1.1	Základní rozdělení metod	4
1.2	Minimalizace podle počtu proměnných	4
1.3	Optimalizace s omezením	4
1.4	Matematické programování	4
2	Metody bez derivací	6
2.1	Základní úloha	6
2.2	Unimodalita funkce	6
2.3	Interval řešení	6
2.4	Přesnost výpočtu	6
2.5	Charakteristika metod bez derivací	7
2.6	Přehled základních metod	7
3	Trisekce	8
3.1	Základní myšlenka	8
3.2	Rozdělení intervalu	8
3.3	Rozhodovací pravidlo	8
3.4	Podmínky použití	8
3.5	Přesnost a ukončení	9
3.6	Vlastnosti metody	9
3.7	Zařazení mezi metody	9
4	Zlatý řez	10
4.1	Základní myšlenka	10
4.2	Zlatý poměr	10
4.3	Volba bodů v intervalu	10
4.4	Rozhodovací pravidlo	10
4.5	Podmínky použití	11
4.6	Přesnost a ukončení	11
4.7	Vlastnosti metody	11
4.8	Zařazení mezi metody	11
5	Fibonacciho metoda	12
5.1	Základní myšlenka	12
5.2	Fibonacciho posloupnost	12
5.3	Volba bodů v intervalu	12
5.4	Rozhodovací pravidlo	12
5.5	Přesnost a ukončení	13
5.6	Podmínky použití	13
5.7	Vlastnosti metody	13
5.8	Zařazení mezi metody	13

6	Metody s derivacemi	14
6.1	Základní úloha	14
6.2	Kořen a minimum funkce	14
6.3	Charakter metod s derivacemi	14
6.4	Počáteční bod	15
6.5	Přesnost a ukončení	15
6.6	Výpočet derivací	15
6.7	Vlastnosti metod	15
6.8	Zařazení mezi metody	16
7	Newtonova metoda (1D)	17
7.1	Základní princip	17
7.2	Newtonova metoda pro hledání kořene	17
7.2.1	Vlastnosti	17
7.3	Newtonova metoda pro hledání minima	17
7.4	Podmínky použití	18
7.5	Počáteční bod	18
7.6	Přesnost a ukončení	18
7.7	Výhody a nevýhody	18
7.8	Zařazení mezi metody	19
8	Metody s více proměnnými	20
8.1	Základní formulace úlohy	20
8.2	Minimum funkce více proměnných	20
8.3	Gradient	20
8.4	Hessova matice	20
8.5	Základní skupiny metod	21
8.6	Charakteristika metod	21
9	Metoda největšího spádu	22
9.1	Základní úloha	22
9.2	Základní myšlenka	22
9.3	Iterační vztah	22
9.4	Volba velikosti kroku	22
9.5	Podmínky použití	22
9.6	Vlastnosti metody	23
9.7	Přesnost a ukončení	23
9.8	Zařazení mezi metody	23
10	Newtonova–Rhapsonova metoda	24
10.1	Základní úloha	24
10.2	Základní myšlenka	24
10.3	Iterační vztah	24
10.4	Podmínky použití	24

10.5	Pozitivně definitní Hessova matice	25
10.6	Počáteční bod	25
10.7	Přesnost a ukončení	25
10.8	Vlastnosti metody	25
10.9	Zařazení mezi metody	25
11	Nelder–Meadova metoda (simplex)	26
11.1	Základní úloha	26
11.2	Základní myšlenka	26
11.3	Počáteční simplex	26
11.4	Hodnocení bodů	26
11.5	Základní operace se simplexem	26
11.5.1	Reflexe	26
11.5.2	Expanze	27
11.5.3	Kontrakce	27
11.5.4	Redukce	27
11.6	Podmínky použití	27
11.7	Přesnost a ukončení	27
11.8	Vlastnosti metody	27
11.9	Zařazení mezi metody	28
12	Lagrangeovy multiplikátory	29
12.1	Základní úloha	29
12.2	Základní myšlenka	29
12.3	Nutná podmínka extrému	29
12.4	Lagrangian	29
12.5	Postup výpočtu	30
12.6	Podmínky použití	30
12.7	Vlastnosti metody	30
12.8	Použití	30
12.9	Zařazení mezi metody	30
13	Matematické programování	31
13.1	Základní formulace úlohy	31
13.2	Lineární omezení	31
13.3	Lineární účelová funkce	31
13.4	Lineární programování (LP)	31
13.5	Kvadratické programování (QP)	32
13.6	Nelineární programování (NLP)	32
13.7	Charakteristika matematického programování	32

1 Optimalizační metody

Optimalizační metody slouží k hledání minima nebo maxima účelové funkce

$$\min f(x).$$

Tato kapitola představuje **přehledovou mapu témat**, nikoli detailní výklad. Slouží k rychlé orientaci a připomenutí hlavních oblastí předmětu.

1.1 Základní rozdělení metod

- **Metody bez derivací**
 - nevyžadují znalost derivací, pracují pouze s hodnotami funkce
 - typicky minimalizace jedné proměnné
 - unimodalita, interval a, b
 - přehled v souboru Metody bez derivací
- **Metody s derivacemi**
 - využívají první a často i druhou derivaci
 - hledání kořenů a minim pomocí iteračních metod
 - přehled v souboru Metody s derivacemi

1.2 Minimalizace podle počtu proměnných

- **Jedna proměnná**
 - základní principy optimalizace
 - interval, přesnost, unimodalita
 - bezderivační a derivační metody
- **Více proměnných (bez omezení)**
 - proměnná $x \in \mathbb{R}^n$
 - gradient, Hessova matice
 - gradientní metody, Newtonovy metody
 - přehled v souboru Metody s více proměnnými

1.3 Optimalizace s omezením

- **Rovnostní omezení**
 - pohyb po omezené množině
 - kolmost gradientů
 - metoda Lagrangeových multiplikátorů

1.4 Matematické programování

- **Lineární programování (LP)**
 - lineární účelová funkce
 - lineární omezení

- **Kvadratické programování (QP)**

- kvadratická účelová funkce

- pozitivně definitivní matice

- **Nelineární programování (NLP)**

- nelineární funkce a omezení

- více lokálních extrémů

- shrnuto v souboru Matematické programování

Tento soubor slouží jako **orientační uzel (mapa)**, ze kterého vedou odkazy na jednotlivá detailní témata.

2 Metody bez derivací

Metody bez derivací slouží k minimalizaci funkce jedné proměnné v situacích, kdy nejsou k dispozici derivace nebo je nechceme používat. Pracují výhradně s hodnotami funkce a jejich cílem je postupně zúžit interval, ve kterém se nachází minimum.

2.1 Základní úloha

- hledáme minimum funkce jedné proměnné
- obecný tvar úlohy

$$\min f(x), \quad x \in \langle a, b \rangle \text{ nebo } x \in \mathbb{R}$$

- výsledkem je hodnota x^* , pro kterou má funkce nejmenší hodnotu

2.2 Unimodalita funkce

- **unimodální funkce** má právě jedno minimum
- funkce:
 - nejprve klesá
 - poté roste
- unimodalita je **základní podmínkou** použití metod bez derivací
- minimum je bod, kde se chování funkce mění z klesajícího na rostoucí

2.3 Interval řešení

- **interval** $\langle a, b \rangle$ určuje oblast, ve které minimum hledáme
- funkce musí být:
 - spojitá
 - ideálně unimodální v celém intervalu
- metody bez derivací:
 - interval postupně zmenšují
 - minimum zůstává vždy uvnitř aktuálního intervalu

2.4 Přesnost výpočtu

- přesnost určuje kritérium ukončení algoritmu
- vyjadřuje, jak „dost dobrý“ výsledek požadujeme

Používaná kritéria:

- **Délka intervalu**

$$|a - b| < \epsilon$$

- **Velikost derivace**
→ používá se hlavně u metod s derivacemi

$$|f'(x)| < \epsilon$$

- **Změna mezi iteracemi**

$$|x_{k+1} - x_k| < \epsilon$$

2.5 Charakteristika metod bez derivací

- **nevyžadují derivace**
- pracují pouze s hodnotami $f(x)$
- porovnávají funkční hodnoty v různých bodech
- iterativně zužují interval s minimem
- jsou:
 - robustní
 - jednoduché na pochopení
- nevýhody:
 - pomalejší než derivační metody
 - použitelné především pro jednu proměnnou

2.6 Přehled základních metod

- **Trisekce**
 - rozdělení intervalu na třetiny
 - jednoduchá, ale pomalejší
- **Zlatý řez**
 - efektivní rozdělení intervalu pomocí konstantního poměru
 - méně výpočtů funkčních hodnot
- **Fibonacciho metoda**
 - optimalizovaná varianta zlatého řezu
 - vyšší přesnost
 - složitější implementace

Jednotlivé metody jsou podrobně rozpracovány v samostatných kapitolách: - Trisekce - Zlatý řez - Fibonacciho metoda

3 Trisekce

Metoda trisekce je **bezderivační metoda** pro minimalizaci **unimodální funkce jedné proměnné**. Patří mezi nejjednodušší intervalové metody a slouží především k pochopení základního principu zúžování intervalu s minimem.

3.1 Základní myšlenka

- minimum funkce leží v intervalu $\langle a, b \rangle$
- interval se v každém kroku rozdělí na **tři části**
- porovnáním funkčních hodnot se jedna třetina intervalu zahodí
- minimum zůstává vždy uvnitř nového, menšího intervalu

3.2 Rozdělení intervalu

V každé iteraci se zvolí dva body:

$$u = a + \frac{b-a}{3}, \quad v = b - \frac{b-a}{3}$$

- platí $a < u < v < b$
- spočítají se hodnoty $f(u)$ a $f(v)$

3.3 Rozhodovací pravidlo

- pokud $f(u) < f(v)$
→ minimum leží v intervalu $\langle a, v \rangle$
- pokud $f(u) > f(v)$
→ minimum leží v intervalu $\langle u, b \rangle$
- v každém kroku se délka intervalu zmenší na $\frac{2}{3}$ původní délky

3.4 Podmínky použití

- funkce je:
 - **spojitá**
 - **unimodální** na intervalu $\langle a, b \rangle$
- derivace nejsou potřeba
- známe počáteční interval, ve kterém leží minimum

3.5 Přesnost a ukončení

- algoritmus končí, pokud:

$$|a - b| < \epsilon$$

- výsledkem je interval obsahující bod minima
- za aproximaci minima se často bere střed intervalu

3.6 Vlastnosti metody

- **výhody**

- velmi jednoduchá
- snadná implementace
- robustní

- **nevýhody**

- pomalejší než zlatý řez
- v každé iteraci vyžaduje dva nové výpočty $f(x)$
- nevyužívá dříve vypočtené hodnoty

3.7 Zařazení mezi metody

- metoda **bez derivací**
- minimalizace **jedné proměnné**
- intervalová metoda

→ slouží jako základ pro efektivnější metody, zejména Zlatý řez

4 Zlatý řez

Metoda zlatého řezu je **bezderivační intervalová metoda** pro minimalizaci **unimodální funkce jedné proměnné**. Oproti trisekci je efektivnější, protože **znovu využívá již vypočtené funkční hodnoty** a snižuje počet volání funkce.

4.1 Základní myšlenka

- minimum funkce leží v intervalu $\langle a, b \rangle$
- interval se zužuje pomocí **pevného poměru**
- v každé iteraci se zahazuje část intervalu, ve které minimum neleží
- jedna funkční hodnota se přenáší do další iterace

4.2 Zlatý poměr

- používá se konstanta

$$\varphi = \frac{\sqrt{5} - 1}{2} \approx 0,618$$

- doplňkový poměr

$$1 - \varphi \approx 0,382$$

4.3 Volba bodů v intervalu

V každé iteraci se volí body:

$$u = a + (1 - \varphi)(b - a), \quad v = a + \varphi(b - a)$$

- platí $a < u < v < b$
- počítají se hodnoty $f(u)$ a $f(v)$
- při zúžení intervalu se **jeden z bodů znovu použije**

4.4 Rozhodovací pravidlo

- pokud $f(u) < f(v)$
→ minimum leží v intervalu $\langle a, v \rangle$
- pokud $f(u) > f(v)$
→ minimum leží v intervalu $\langle u, b \rangle$
- nový interval je kratší než původní v konstantním poměru

4.5 Podmínky použití

- funkce je:
 - spojitá
 - **unimodální** na intervalu $\langle a, b \rangle$
- derivace nejsou potřeba
- známe interval obsahující minimum

4.6 Přesnost a ukončení

- algoritmus se ukončí, pokud platí

$$|a - b| < \varepsilon$$

- výsledkem je interval obsahující minimum
- aproximací minima je obvykle střed intervalu

4.7 Vlastnosti metody

- **výhody**
 - méně výpočtů funkčních hodnot než trisekce
 - efektivní a stabilní
 - jednoduchá implementace
- **nevýhody**
 - pomalejší než derivační metody
 - použitelná pouze pro jednu proměnnou

4.8 Zařazení mezi metody

- metoda **bez derivací**
 - minimalizace **jedné proměnné**
 - intervalová metoda
- efektivnější varianta metody Trisekce
→ základ pro Fibonacciho metodu

5 Fibonacciho metoda

Fibonacciho metoda je **bezderivační intervalová metoda** pro minimalizaci **unimodální funkce jedné proměnné**. Představuje optimalizovanou variantu metody zlatého řezu, která využívá **Fibonacciho posloupnost** k přesně řízenému zmenšování intervalu.

5.1 Základní myšlenka

- minimum funkce leží v intervalu $\langle a, b \rangle$
- počet iterací je **předem dán**
- interval se zužuje pomocí poměrů vycházejících z Fibonacciho posloupnosti
- metoda minimalizuje počet výpočtů funkčních hodnot

5.2 Fibonacciho posloupnost

- posloupnost je definována vztahem

$$F_0 = 0, \quad F_1 = 1, \quad F_k = F_{k-1} + F_{k-2}$$

- poměry po sobě jdoucích členů se blíží zlatému poměru
- tyto poměry určují polohu testovacích bodů v intervalu

5.3 Volba bodů v intervalu

- pro zvolený počet kroků N se v každé iteraci určují body pomocí poměrů

$$u = a + \frac{F_{N-2}}{F_N}(b - a), \quad v = a + \frac{F_{N-1}}{F_N}(b - a)$$

- porovnávají se hodnoty $f(u)$ a $f(v)$
- interval se zúží podobně jako u zlatého řezu

5.4 Rozhodovací pravidlo

- pokud $f(u) < f(v)$
→ minimum leží v intervalu $\langle a, v \rangle$
- pokud $f(u) > f(v)$
→ minimum leží v intervalu $\langle u, b \rangle$
- jeden bod se přenáší do další iterace

5.5 Přesnost a ukončení

- počet iterací N se volí tak, aby výsledná délka intervalu splňovala

$$|a - b| < \varepsilon$$

- přesnost je tedy **řízena dopředu** volbou N
- výsledkem je interval obsahující bod minima

5.6 Podmínky použití

- funkce je:
 - spojitá
 - **unimodální** na intervalu $\langle a, b \rangle$
- derivace nejsou potřeba
- známe požadovanou přesnost ε

5.7 Vlastnosti metody

- **výhody**
 - velmi efektivní
 - minimální počet výpočtů $f(x)$
 - přesně řízená přesnost
- **nevýhody**
 - složitější implementace
 - nutnost znát požadovanou přesnost předem
 - méně flexibilní než zlatý řez

5.8 Zařazení mezi metody

- metoda **bez derivací**
- minimalizace **jedné proměnné**
- intervalová metoda

→ optimalizovaná varianta Zlatého řezu

6 Metody s derivacemi

Metody s derivacemi slouží k hledání **kořenů** a **minim funkcí** pomocí informací o derivacích účelové funkce. Oproti metodám bez derivací jsou zpravidla **rychlejší**, ale kladou vyšší nároky na hladkost funkce a volbu počátečního bodu.

6.1 Základní úloha

- minimalizace funkce jedné proměnné

$$\min f(x)$$

- nebo hledání kořene funkce

$$f(x) = 0$$

- metody jsou obvykle **iterační**
- vyžadují **počáteční bod** x_0

6.2 Kořen a minimum funkce

- **kořen funkce**

- hodnota x , pro kterou platí

$$f(x) = 0$$

- funkce protíná nebo se dotýká osy x

- **minimum funkce**

- bod, kde má funkce nejmenší hodnotu
- v minimu platí

$$f'(x^*) = 0, \quad f''(x^*) > 0$$

- hledání minima se často převádí na hledání kořene derivace

6.3 Charakter metod s derivacemi

- využívají:
 - **první derivaci**
 - často i **druhou derivaci**
- rozdíl mezi metodami není v principu, ale v cíli:
 - hledání kořene
 - hledání minima
- typickým zástupcem je **Newtonova metoda**

6.4 Počáteční bod

- **počáteční bod** x_0 je nutný pro iterační metody
- musí:
 - ležet v oblasti, kde existují derivace
 - být rozumně blízko řešení
- špatná volba může vést:
 - ke konvergenci k maximu
 - k inflexnímu bodu
 - k divergenci metody

6.5 Přesnost a ukončení

- výpočet se ukončuje při splnění některého z kritérií:
 - **velikost derivace**
$$|f'(x_k)| < \varepsilon$$
 - **změna mezi iteracemi**
$$|x_{k+1} - x_k| < \varepsilon$$
 - **maximální počet iterací**

6.6 Výpočet derivací

- **analytický**
 - derivace dány vzorcem
 - rychlý a přesný
- **numerický**
 - derivace jsou pouze odhadnuty
 - pomalejší
 - méně stabilní

6.7 Vlastnosti metod

- **výhody**
 - rychlá konvergence
 - vysoká přesnost
- **nevýhody**
 - nutnost znalosti derivací
 - citlivost na počáteční bod
 - vyšší nároky na hladkost funkce

6.8 Zařazení mezi metody

- metody s **derivacemi**
- minimalizace **jedné proměnné**
- iterační metody

→ konkrétní postup je rozpracován v kapitole Newtonova metoda

7 Newtonova metoda (1D)

Newtonova metoda je **iterační derivační metoda** používaná pro hledání **kořene funkce** nebo **minima funkce jedné proměnné**. Patří mezi nejdůležitější metody optimalizace díky své **rychlé konvergenci** v okolí řešení.

7.1 Základní princip

- metoda vychází z **lokální lineární aproximace** funkce
- v každém kroku se:
 - aproximuje funkce tečnou
 - průsečík tečny s osou x určí nový odhad řešení
- metoda vyžaduje **počáteční bod** x_0

7.2 Newtonova metoda pro hledání kořene

- hledáme bod, kde platí

$$f(x) = 0$$

- iterační vztah má tvar

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

7.2.1 Vlastnosti

- velmi rychlá konvergence v okolí kořene
- citlivá na volbu počátečního bodu
- může divergovat nebo konvergovat k jinému kořeni

7.3 Newtonova metoda pro hledání minima

- minimum funkce nastává v bodě, kde

$$f'(x^*) = 0$$

- úloha se převede na hledání kořene derivace
- iterační vztah má tvar

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

7.4 Podmínky použití

- funkce je:
 - diferencovatelná
 - ideálně **alespoň dvakrát diferencovatelná**
- v bodě minima platí
$$f''(x^*) > 0$$
- derivace existují v okolí řešení

7.5 Počáteční bod

- volba počátečního bodu x_0 je **kritická**
- špatná volba může vést:
 - ke konvergenci k maximu
 - k inflexnímu bodu
 - k divergenci metody
- počáteční bod volíme:
 - v blízkosti očekávaného minima
 - v oblasti, kde existují derivace

7.6 Přesnost a ukončení

- výpočet se ukončí, pokud platí alespoň jedna z podmínek:

$$|x_{k+1} - x_k| < \varepsilon$$

$$|f'(x_k)| < \varepsilon$$

- případně po dosažení maximálního počtu iterací

7.7 Výhody a nevýhody

- **výhody**
 - velmi rychlá konvergence
 - vysoká přesnost
- **nevýhody**
 - nutnost znalosti derivací
 - citlivost na počáteční bod
 - může selhat daleko od řešení

7.8 Zařazení mezi metody

- metoda s **derivacemi**
- minimalizace **jedné proměnné**
- iterační metoda

→ zobecnění metody pro více proměnných je uvedeno v kapitole Newtonova–Rhapsonova metoda

8 Metody s více proměnnými

Metody s více proměnnými se zabývají minimalizací funkcí, jejichž argumentem je vektor proměnných. Navazují na metody jedné proměnné, ale pracují s geometricky složitějšími objekty, jako jsou gradienty a matice druhých derivací.

8.1 Základní formulace úlohy

- obecná optimalizační úloha má tvar

$$\min f(x), \quad x \in \mathbb{R}^n$$

- proměnná x je vektor
- úloha **nemá omezení vazbami**
- hledáme lokální nebo globální minimum funkce

8.2 Minimum funkce více proměnných

- minimum je bod, kde má funkce nejmenší hodnotu v okolí
- nutná podmínka minima

$$\nabla f(x^*) = 0$$

- postačující podmínka (lokální minimum)
 - Hessova matice je **pozitivně definitní**

8.3 Gradient

- **gradient** je vektor prvních parciálních derivací

$$\nabla f(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial x_n} \end{pmatrix}$$

- určuje směr **největšího růstu** funkce
- směr největšího poklesu je opačný směr gradientu

8.4 Hessova matice

- **Hessova matice** je matice druhých parciálních derivací

$$H(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n^2} \end{pmatrix}$$

- popisuje lokální zakřivení funkce
- používá se v Newtonových metodách

8.5 Základní skupiny metod

- **Gradientní metody**
 - využívají pouze gradient
 - jednoduché, ale pomalejší
 - viz Metoda největšího spádu
- **Newtonovy metody**
 - využívají gradient i Hessovu matici
 - velmi rychlé v okolí minima
 - viz Newtonova–Rhapsonova metoda
- **Bezderivační metody**
 - nevyžadují derivace
 - pracují pouze s hodnotami funkce
 - vhodné pro malé dimenze
 - viz Nelder–Meadova metoda

8.6 Charakteristika metod

- metody jsou většinou **iterační**
- vyžadují **počáteční bod** x_0
- konvergence závisí na:
 - vlastnostech funkce
 - volbě počátečního bodu
 - použité metodě

9 Metoda největšího spádu

Metoda největšího spádu je **iterační derivační metoda** pro minimalizaci **funkce více proměnných bez omezení**. Patří mezi základní gradientní metody a slouží jako výchozí nástroj pro pochopení chování optimalizačních algoritmů ve vícerozměrném prostoru.

9.1 Základní úloha

- minimalizace funkce tvaru

$$\min f(x), \quad x \in \mathbb{R}^n$$

- funkce nemá omezení vazbami
- gradient funkce je znám

9.2 Základní myšlenka

- **gradient** určuje směr největšího růstu funkce
- pro minimalizaci se postupuje **opačným směrem**
- v každém kroku se provede posun ve směru záporného gradientu

9.3 Iterační vztah

- obecný tvar kroku

$$x_{k+1} = x_k - \alpha_k \nabla f(x_k)$$

- α_k je **velikost kroku**
- volba kroku zásadně ovlivňuje chování metody

9.4 Volba velikosti kroku

- **konstantní krok**
 - jednoduchý
 - může vést k pomalé konvergenci nebo kmitání
- **proměnný krok**
 - volen např. minimalizací podél směru gradientu
 - stabilnější chování metody

9.5 Podmínky použití

- gradient existuje v celé oblasti řešení
- funkce je:
 - spojitá
 - diferencovatelná
- metoda konverguje zejména pro **konvexní funkce**

9.6 Vlastnosti metody

- **výhody**
 - jednoduchá
 - robustní
 - levná jedna iterace
- **nevýhody**
 - pomalá konvergence
 - klikatí se v úzkých údolích
 - silná závislost na volbě kroku

9.7 Přesnost a ukončení

- výpočet se ukončí, pokud platí

$$|\nabla f(x_k)| < \varepsilon$$

nebo

$$|x_{k+1} - x_k| < \varepsilon$$

- případně po dosažení maximálního počtu iterací

9.8 Zařazení mezi metody

- metoda s **derivacemi**
- minimalizace **více proměnných**
- gradientní metoda

→ rychlejší, ale náročnější alternativa je Newtonova–Rhapsonova metoda

10 Newtonova–Rhapsonova metoda

Newtonova–Rhapsonova metoda je **iterační derivační metoda** pro minimalizaci **funkce více proměnných bez omezení**. Oproti gradientním metodám využívá kromě gradientu také **Hessovu matici**, což jí umožňuje velmi rychlou konvergenci v okolí minima.

10.1 Základní úloha

- minimalizace funkce tvaru

$$\min f(x), \quad x \in \mathbb{R}^n$$

- funkce nemá omezení vazbami
- gradient i Hessova matice jsou známy

10.2 Základní myšlenka

- funkce je v okolí aktuálního bodu **nahrazena kvadratickou aproximací**
- minimum této aproximace lze určit analyticky
- nový bod vznikne skokem přímo k minimu aproximující funkce

10.3 Iterační vztah

- obecný iterační krok má tvar

$$x_{k+1} = x_k - H^{-1}(x_k) \nabla f(x_k)$$

- $H(x_k)$ je Hessova matice funkce v bodě x_k
- metoda využívá informaci o zakřivení funkce

10.4 Podmínky použití

- funkce je:
 - diferencovatelná
 - alespoň dvakrát diferencovatelná v okolí řešení
- gradient existuje
- Hessova matice:
 - je invertibilní
 - je ideálně **pozitivně definitní**

10.5 Pozitivně definitní Hessova matice

- v bodě minima musí platit

$$v^T H v > 0, \quad v \neq 0$$

- funkce má v okolí bodu **miskovitý tvar**
- všechna vlastní čísla Hessovy matice jsou kladná
- v opačném případě může metoda směřovat:
 - k maximu
 - k sedlovému bodu

10.6 Počáteční bod

- volba počátečního bodu x_0 je **kritická**
- metoda:
 - je velmi rychlá blízko minima
 - může selhat daleko od minima
- špatný počátek může vést k divergenci

10.7 Přesnost a ukončení

- výpočet se ukončí při splnění některého z kritérií:

$$|\nabla f(x_k)| < \varepsilon$$

$$|x_{k+1} - x_k| < \varepsilon$$

- případně po dosažení maximálního počtu iterací

10.8 Vlastnosti metody

- **výhody**
 - velmi rychlá konvergence (kvadratická)
 - malý počet iterací
- **nevýhody**
 - drahý výpočet (Hessova matice, inverze)
 - citlivost na počáteční bod
 - může selhat mimo okolí minima

10.9 Zařazení mezi metody

- metoda s **derivacemi**
 - minimalizace **více proměnných**
 - Newtonova metoda
- bezderivační alternativa je Nelder–Meadova metoda

11 Nelder–Meadova metoda (simplex)

Nelder–Meadova metoda je **bezderivační metoda** pro minimalizaci **funkce více proměnných bez omezení**. Využívá geometrickou představu **simplexu** a pracuje pouze s hodnotami funkce, nikoli s jejími derivacemi.

11.1 Základní úloha

- minimalizace funkce tvaru

$$\min f(x), \quad x \in \mathbb{R}^n$$

- funkce nemá omezení vazbami
- derivace nejsou známy nebo je nechceme používat

11.2 Základní myšlenka

- metoda pracuje s **simplexem**:
 - v n -rozměrném prostoru má simplex $n + 1$ vrcholů
- v každém kroku se:
 - vyhodnotí funkční hodnoty ve vrcholech
 - porovnají se hodnoty
 - nejhorší bod je nahrazen lepším
- simplex se postupně posouvá směrem k minimu

11.3 Počáteční simplex

- volí se $n + 1$ bodů:
 - musí vyplnit okolí hledaného minima
- kvalita počátečního simplexu výrazně ovlivňuje chování metody

11.4 Hodnocení bodů

- ve vrcholech simplexu se spočítají hodnoty funkce
- body se seřadí podle velikosti funkčních hodnot:

$$f(x_{\text{nejlepší}}) < f(x_{\text{prostřední}}) < f(x_{\text{nejhorší}})$$

11.5 Základní operace se simplexem

11.5.1 Reflexe

- **základní krok metody**
- nejhorší bod se odrazí přes těžiště zbylých bodů
- pokud je nový bod lepší než prostřední, je přijat

11.5.2 Expanze

- pokud je reflexní bod lepší než nejlepší
- simplex se zkusí rozšířit dále stejným směrem
- typický koeficient:

$$\alpha > 1 \quad (\text{často } \alpha = 2)$$

11.5.3 Kontrakce

- pokud reflexe nepřinese zlepšení
- simplex se zmenší směrem k lepším bodům
- typický koeficient:

$$\beta \in (0, 1) \quad (\text{často } \beta = 0,5)$$

11.5.4 Redukce

- použije se, pokud selžou předchozí kroky
- celý simplex se smrskne k nejlepšímu bodu
- používá se výjimečně

11.6 Podmínky použití

- funkce musí být **spočitatelná**
- derivace nejsou potřeba
- metoda je vhodná pro:
 - malé dimenze (typicky $n < 10$)

11.7 Přesnost a ukončení

- výpočet se ukončí, pokud platí

$$\max f(x_i) - \min f(x_i) < \varepsilon$$

- nebo po dosažení maximálního počtu iterací

11.8 Vlastnosti metody

- **výhody**
 - jednoduchá implementace
 - bez derivací
 - použitelná pro složité funkce
- **nevýhody**
 - pomalá
 - nespolehlivá ve vyšších dimenzích
 - nemá teoretické záruky konvergence

11.9 Zařazení mezi metody

- metoda **bez derivací**
- minimalizace **více proměnných**
- geometrická metoda (simplex)

→ alternativa k derivačním metodám, zejména Metodě největšího spádu

12 Lagrangeovy multiplikátory

Metoda Lagrangeových multiplikátorů slouží k hledání **extrémů funkce více proměnných s omezením**. Jedná se o **analytickou derivační metodu**, která umožňuje určit kandidáty minima nebo maxima na omezené množině.

12.1 Základní úloha

- hledáme extrém funkce
$$\min f(x)$$
- za rovnostního omezení
$$g(x) = 0$$
- proměnná $x \in \mathbb{R}^n$

12.2 Základní myšlenka

- pohybujeme se pouze po množině dané omezením
- v bodě extrému platí:
 - **gradient funkce je rovnoběžný s gradientem omezení**
- gradienty jsou tedy **lineárně závislé**

12.3 Nutná podmínka extrému

- existuje skalár λ tak, že

$$\nabla f(x) = \lambda \nabla g(x)$$

- λ je **Lagrangeův multiplikátor**
- multiplikátor vyjadřuje citlivost extrému na změnu omezení

12.4 Lagrangián

- zavede se pomocná funkce

$$L(x, \lambda) = f(x) + \lambda g(x)$$

- extrémy se hledají řešením soustavy rovnic

$$\nabla L(x, \lambda) = 0$$

12.5 Postup výpočtu

- 1) zavedení Lagrangiánu
- 2) výpočet parciálních derivací podle všech proměnných a multiplikátoru
- 3) řešení soustavy rovnic
- 4) získání **kandidátů extrému**

12.6 Podmínky použití

- funkce $f(x)$ i omezení $g(x)$ jsou diferencovatelné
- gradient omezení není nulový
- metoda řeší **pouze rovnostní omezení**

12.7 Vlastnosti metody

- **výhody**
 - elegantní
 - přesná
 - analytická
- **nevýhody**
 - složitější výpočty
 - neřeší nerovnostní omezení
 - poskytuje pouze kandidáty extrému

12.8 Použití

- optimalizace více proměnných
- úlohy s rovnostním omezením
- známé analytické derivace

12.9 Zařazení mezi metody

- metoda s **derivacemi**
- optimalizace s **omezením**
- analytická metoda

→ obecnější rámec optimalizace s omezeními je uveden v kapitole Matematické programování

13 Matematické programování

Matematické programování představuje **obecný rámec optimalizace s omezeními**, ve kterém hledáme minimum nebo maximum účelové funkce při splnění rovnostních a nerovnostních vazeb. Na rozdíl od klasických analytických metod je kladen důraz na **strukturu úlohy** a systematické algoritmy.

13.1 Základní formulace úlohy

- obecná optimalizační úloha má tvar

$$\min f(x)$$

- za podmínek

$$g(x) = 0, \quad h(x) \leq 0$$

- proměnné jsou omezeny vazbami
- řešení leží v **přípustné oblasti**

13.2 Lineární omezení

- lineární omezení mají tvar

$$Ax \leq b$$

- vytvářejí **oblast přípustných řešení**
- v prostoru:
 - v 2D mnohoúhelník
 - ve vyšších dimenzích polyedr
- optimalizace probíhá pouze uvnitř této oblasti

13.3 Lineární účelová funkce

- lineární funkce:
 - přímka (2D)
 - rovina (3D)
- minimum nebo maximum vzniká na **hranici přípustné oblasti**
- vnitřek oblasti není překážkou

13.4 Lineární programování (LP)

- **účelová funkce**
 - lineární
- **omezení**

– lineární

- **proměnné**

– spojité

Použití: - ekonomika - plánování výroby - alokace zdrojů

Vlastnosti: - úloha je **konvexní** - platí: - lokální minimum = globální minimum

13.5 Kvadratické programování (QP)

- **účelová funkce**

– kvadratická

$$\min \frac{1}{2} x^T Q x + c^T x$$

- **omezení**

– lineární

Použití: - kvadratické členy v zadání - aproximace nelineárních úloh

Vlastnosti: - pokud je matice Q **pozitivně definitivní** - úloha je konvexní - řešení je jednoznačné

13.6 Nelineární programování (NLP)

- **účelová funkce**

– nelineární

- **omezení**

– lineární i nelineární

Použití: - výskyt funkcí typu: - sin, cos, exp - vyšší mocniny

Vlastnosti: - může existovat více lokálních minim - bez konvexity: - není zaručeno globální řešení - často se používají: - Lagrangeovy multiplikátory

13.7 Charakteristika matematického programování

- optimalizace s omezeními

- důraz na:

– strukturu účelové funkce

– typ omezení

- volba metody závisí na:

– linearitě

- konvexitě
- rozměru úlohy

Tato kapitola uzavírá přehled optimalizačních metod a poskytuje **systematický pohled** na optimalizaci s omezeními používanou v technické a aplikované matematice.