Otimização sem restrição

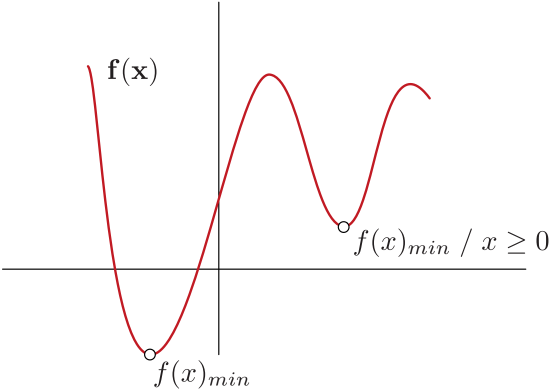
INF1608 – Análise Numérica

Departamento de Informática, PUC-Rio

Problema de otimização

Achar o *mínimo* (ou o *máximo*) de uma **função objetiva**

- Pode ou não estar submetido a restrições



- Minimização: achar $\max f(x)$ equivale a achar $\min -f(x)$

Nosso foco

Otimização sem restrição

- Métodos que não fazem uso de gradientes
  - Empregados quando gradientes não estão disponíveis
  - Métodos
    1. Método da Seção Áurea
    2. Interpolação Parabólica Sucessiva
    3. Método Nelder-Mead
- Métodos que fazem uso do gradiente da função ($\nabla f(x)$)
  - Tendem a convergir mais rápido
  - Métodos
    1. Método de Newton
    2. Método de Máximo Declive
    3. Método de Gradientes Conjugados

Otimização sem gradientes

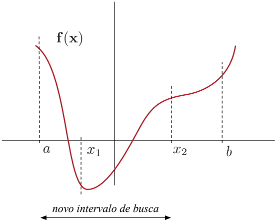
Método da Seção Áurea

Determinar min $f(x)$ no intervalo $[a, b]$, onde $f(x)$ é unimodal

- Inspirado no método da bisseção para determinação de raízes
- Parte-se de dois valores x_1 e x_2

$$a < x_1 < x_2 < b$$

- Se $f(x_1) \leq f(x_2)$, ajusta intervalo para $[a, x_2]$
- Senão, ajusta intervalo para $[x_1, b]$



Método da Seção Áurea

Como escolher os valores x_1 e x_2?

- Assumindo $[a, b] = [0, 1]$

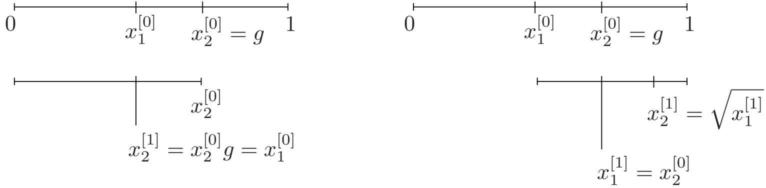
Intuitivamente:

- Serem simétricos, já que não temos conhecimento de $f(x)$

$$x_1 = 1 - x_2$$

- Aproveitar $f(x_i)$ na próxima iteração

$$x_1 = x_2^2$$



Método da Seção Áurea

Combinando os dois critérios intuitivos

$$\begin{cases} x_1 = 1 - x_2 \\ x_1 = x_2^2 \end{cases}$$

$$x_2^2 + x_2 - 1 = 0$$

- Raiz positiva
  - Razão de ouro

$$g = \frac{\sqrt{5} - 1}{2} \approx 0.618$$

Método da Seção Áurea

Intervalo $[0, 1]$

- $x_1 = 1 - g$
- $x_2 = g$

Generalizando: intervalo $[a, b]$

- $x_1 = a + (1 - g)(b - a)$
- $x_2 = a + g(b - a)$

$[a, b]$ são atualizados a cada iteração

Método da Seção Áurea

Redução do intevalo de busca por iteração:

$$l_1 = g\ l_0, \quad \text{onde} \quad l_0 = b - a$$

- Após k iterações:

$$l_k = g^k(b-a)$$

- Erro da solução

$$E = \frac{g^k(b-a)}{2}$$

  - Solução representada pelo meio do intervalo após k iterações

Convergência garantida, linear

- Determinação de raízes via método da bisseção: $\gamma = 0.5$
- Otimização via método da seção áurea: $\gamma = 0.618$
  - Convergência mais lenta que bisseção

Método da Seção Áurea

Dada f unimodal com mínimo em $[a, b]$

$$
\begin{aligned}
& g = \frac{\sqrt{5}-1}{2} \\
& \textbf{for } k = 1, 2, 3, \cdots \\
& \quad \textbf{if } f(a + (1-g)(b-a)) < f(a + g(b-a)) \\
& \quad\quad b = a + g(b-a) \\
& \quad \textbf{else} \\
& \quad\quad a = a + (1-g)(b-a) \\
& \quad \textbf{end} \\
& \textbf{end} \\
& \textbf{return } \frac{a+b}{2}
\end{aligned}
$$

- Implementação eficiente avalia a função $+1$ vez por iteração

Interpolação Parabólica Sucessiva

Método busca usar os valores de $f(x)$ avaliados nas iterações

- Método da seção áurea só compara valores

Ideia

- Criar modelo local e assumir como função objetivo
  - Similar aos métodos *Secante* e *IQI* para determinação de raízes

Modelo local: parábola

- Inicia com 3 estimativas próximas ao mínimo: r, s, t
- Calcula parábola interpolante (por diferenças divididas)

Interpolação Parabólica Sucessiva

Cria sucessivas parábolas avaliando o ponto de mínimo

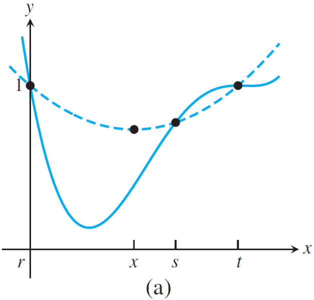


Figure 13.4 Successive Parabolic Interpolation. (a) A parabola is drawn through the three current points r, s, t, and the minimum x of the parabola is used to replace the current s. (b) The step is repeated with the new r, s, t.

Interpolação Parabólica Sucessiva

Determinação da parábola via Diferenças Divididas de Newton

$$\begin{array}{c|ccc} r & f(r) & & \\ & & d_1 & \\ s & f(s) & & d_3 \\ & & d_2 & \\ t & f(t) & & \end{array}$$

$$d_1 = \frac{f(s) - f(r)}{s - r},\ d_2 = \frac{f(t) - f(s)}{t - s},\ d_3 = \frac{d_2 - d_1}{t - r}$$

$$P(x) = f(r) + d_1(x - r) + d_3(x - r)(x - s)$$

Interpolação Parabólica Sucessiva

P(x) = f(r) + d1(x-r) + d3(x-r)(x-s)

Para achar o mínimo, faz-se $P'(x) = 0$, chegando a:

$$x = \frac{r+s}{2} - \frac{(f(s)-f(r))(t-r)(t-s)}{2[(s-r)(f(t)-f(s))-(f(s)-f(r))(t-s)]}$$

- x substitui o **menos recente** ou pior estimativa entre r, s e t.

Características:

- Convergência não garantida
- Tende a ser mais rápido que seção áurea

Nota:

- Como a função é localmente horizontal perto do mínimo, é comum $f(x_k) = f(x_{k+1})$ dentro da precisão de *double*, quando x_k se aproxima da solução: *Erro* $\approx 10^{-7}$.

Interpolação Parabólica Sucessiva

Algoritmo: com x substituindo a estimativa menos recente

- Dadas 3 estimativas iniciais: r, s e t

for $= 1, 2, 3, \cdots$

$$x = \frac{r+s}{2} - \frac{(f(s)-f(r))(t-r)(t-s)}{2[(s-r)(f(t)-f(s)) - (f(s)-f(r))(t-s)]}$$

$$r = s$$

$$s = t$$

$$t = x$$

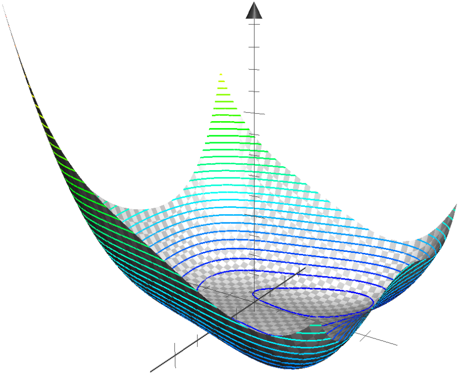
end

Método Nelder-Mead

(*Downhill simplex method*)

Determinação de valor mínimo de função com múltiplas variáveis

$$\min f(\mathbf{x}), \quad \text{onde } \mathbf{x} \text{ é vetor de dimensão } n$$



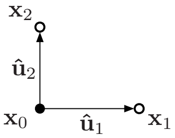
Método Nelder-Mead

- Estimativas iniciais de $n+1$ vetores

$$\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1 \dots \mathbf{x}_n \in R^n$$

- Estratégia simples para obtenção de $n+1$ estimativas iniciais
  - $\mathbf{x}_0$ estimativa inicial
  - $\mathbf{x}_i = \mathbf{x}_0 + \delta \hat{\mathbf{u}}_i$

Espaço 2D:



$$\hat{\mathbf{u}}_1 = \{1, 0\}$$
$$\hat{\mathbf{u}}_2 = \{0, 1\}$$

Método Nelder-Mead

Dadas as estimativas $\mathbf{x}_i$, com $i = 0, 1, \cdots, n$

1. Ordena estimativas: $f_i = f(\mathbf{x}_i)$

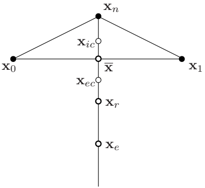
$$f_0 < f_1 < \cdots < f_n$$

2. Remove $\mathbf{x}_n$ do conjunto de estimativas (menos "ótima")
   - Determina centróide de pontos restantes: $\bar{\mathbf{x}}$
3. **Reflete** $\mathbf{x}_n$ em relação a centróide $\bar{\mathbf{x}}$

$$\mathbf{x}_r = 2\bar{\mathbf{x}} - \mathbf{x}_n$$

   - Substitui $\mathbf{x}_n$

Método Nelder-Mead



- Dadas as estimativas ordenadas, substitui a pior
  - Se $f_0 < f_r < f_{n-1}$, faz **substituição**:
    - Substitui $\mathbf{x}_n$ por $\mathbf{x}_r$
  - Senão, se $f_r < f_0$, faz **expansão/extrapolação**:
    - $\mathbf{x}_e = 3\bar{\mathbf{x}} - 2\mathbf{x}_n$
    - Substitui $\mathbf{x}_n$ pelo menor $f(\mathbf{x})$ entre $\mathbf{x}_r$ e $\mathbf{x}_e$
  - Senão, se $fr > f_{n-1}$, faz **contração** (interna ou externa):
    - $\mathbf{x}_{ic} = 0.5\bar{\mathbf{x}} + 0.5\mathbf{x}_n$
    - $\mathbf{x}_{ec} = 1.5\bar{\mathbf{x}} - 0.5\mathbf{x}_n$
    - Substitui $\mathbf{x}_n$ pelo menor $f(\mathbf{x})$ entre $\mathbf{x}_r$, $\mathbf{x}_{ic}$ e $\mathbf{x}_{ec}$
  - Se ainda não melhorar, faz **encolhimento** em torno de $\mathbf{x}_0$
    - Descarta $\mathbf{x}_r$, $\mathbf{x}_{ic}$ e $\mathbf{x}_{ec}$
    - Altera todos os pontos com exceção do $\mathbf{x}_0$
    - $\mathbf{x}_i = \mathbf{x}_0 + 0.5(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_0)$
- Repete processo até convergência
  - Ou até alcançar um número máximo de iterações

Método Nelder-Mead

Critério de parada:

- Número fixo de iterações: k_{max}
- Dentro de uma tolerância:
  - Redução da amplitude da função

$$\|f_0 - f_n\| < \epsilon$$

  - Redução do desvio padrão dos valores da função

$$v_i = f(\mathbf{x}_i)$$

$$\sigma = \sqrt{\frac{\sum_{i=0}^{n}(v_i - \overline{v})^2}{n}}$$

  - Redução do "volume" do simplexo
    - Em 2D, área do triângulo: $\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2$

$$Vol = \left| \frac{1}{n!} det \begin{bmatrix} \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0 & \mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_0 & \cdots & \mathbf{x}_n - \mathbf{x}_0 \end{bmatrix} \right|$$

Otimização sem restrições **com gradiente**

Derivadas definem se função está diminuindo ou crescendo

Derivadas parciais definem direção de maior variação

Métodos:

- Newton
- Máximo Declive
- Gradientes Conjugados

Otimização sem restrições **com gradiente**

Método de Newton

- Mínimo da função $f(x)$ ocorre em $f'(x) = 0$
  - Aplica Newton-Raphson para determinação de raízes em $f'(x)$

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

- Nesse caso, ao invés de procurarmos raiz de $f(x)$, procuramos a raiz de $f'(x)$, que define o ponto mínimo.
- Precisamos da segunda derivada $f''(x)$.
- Deve ser verificado se $f'(x) = 0$ é ponto de mínimo, pois também pode ser ponto de máximo ou ponto de inflexão.
- Se vizinhança for unimodal e possuir mínimo, função converge.

Método de Newton

- Funções com múltiplas variáveis: $f(\mathbf{x})$

- Gradiente

$$\nabla f = \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f}{\partial x_2} \\ \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial x_n} \end{bmatrix}$$

- Matriz Hessian

$$H = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2} & \cdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_1} & \ddots & \\ \vdots & & \end{bmatrix}$$

Iterações de Newton-Raphson

$$\begin{cases} H(\mathbf{x}_k)\mathbf{v} = -\nabla f(\mathbf{x}_k) \\ \mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \mathbf{v} \end{cases}$$

- Se H estiver disponível, esse é o método geralmente preferível

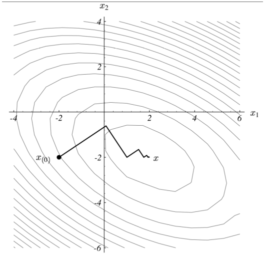
Método do Máximo Declive

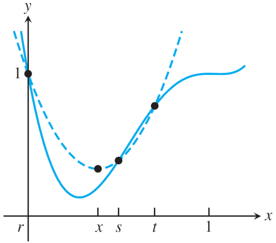
(Método do Gradiente)

Avançar sempre na direção contrária ao gradiente

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

- Como determinar α?
  - Busca valor mínimo de $f(\mathbf{x})$ na direção $-\nabla f(\mathbf{x})$
  - Emprega um método de uma variável
    - Por exemplo, Interpolação Parabólica Sucessiva





Método do Máximo Declive

Algoritmo

- Dada estimativa inicial $\mathbf{x}_0$

$$
\begin{aligned}
&\textbf{for } k = 0, 1, 2, 3, \cdots \\
&\qquad \mathbf{v} = \nabla f(\mathbf{x}_k) \\
&\qquad \text{Minimize} \quad f(\mathbf{x} - \alpha \mathbf{v}) \quad \text{for scalar} \quad \alpha = \alpha^* \\
&\qquad \mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \alpha^* \mathbf{v}
\end{aligned}
$$

- Avanço em zig-zag, pouco eficiente

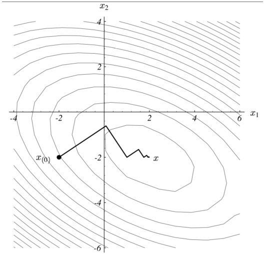


Figura extraída de "An Introduction to the Conjugate Gradient Method Without the Agonizing Pain", Shewchuk, 1994

Busca por Gradiente Conjugado

Método dos Gradientes Conjugados para Sistemas Lineares

- Resolver

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b}$$

- Onde $f(x)$ é calculado pela forma quadrática

$$f(x) = \frac{1}{2}\mathbf{x}^T A\mathbf{x} - \mathbf{b}^T\mathbf{x} + c$$

Nesse caso, a partir da matriz A, vetor b, e estimativa x:

- Gradiente

$$\nabla f(\mathbf{x}) = A\mathbf{x} - \mathbf{b}$$

- Resíduo expresso pelo gradiente

$$\mathbf{r} = \mathbf{b} - A\mathbf{x} = -\nabla f(\mathbf{x})$$

Busca por Gradiente Conjugado

Generalização de gradientes conjugados para qualquer $f(\mathbf{x})$

- $\mathbf{d}_k = -\nabla f(\mathbf{x})$
- $\alpha_k = \alpha$ que minimiza $f(\mathbf{x}_k + \alpha \mathbf{d}_k)$

Algoritmo

$$
\begin{aligned}
&\mathbf{x}_0 = \text{estimativa inicial} \\
&\mathbf{d}_0 = \mathbf{r}_0 = -\nabla f(\mathbf{x}_0) \\
&\textbf{for } k = 0, 1, \cdots \\
&\quad \textbf{if } ||\mathbf{r}_k||_2 < tol \\
&\quad\quad \textbf{return} \\
&\quad \alpha_k = \alpha \quad \text{que minimiza} \quad f(\mathbf{x}_k + \alpha \mathbf{d}_k) \\
&\quad \mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{d}_k \\
&\quad \mathbf{r}_{k+1} = -\nabla f(\mathbf{x}_{k+1}) \\
&\quad \beta_k = \frac{\mathbf{r}_{k+1}^T \mathbf{r}_{k+1}}{\mathbf{r}_k^T \mathbf{r}_k} \\
&\quad \mathbf{d}_{k+1} = \mathbf{r}_{k+1} + \beta_k \mathbf{d}_k
\end{aligned}
$$