

# Optimalizace

## 1. Optimalizační úlohy

---

Tomáš Kroupa    Tomáš Werner

2023 LS

Fakulta elektrotechnická  
ČVUT v Praze

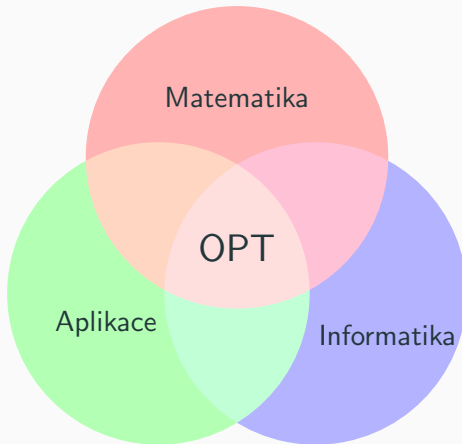
# O čem je optimalizace?

## Mathematical optimization

The selection of a best element with regard to some criterion from some set of available alternatives. *(Wikipedia)*

Optimalizační úloha je zadána

1. množinou prvků, ze kterých vybíráme,
2. kritériem, které prvky ohodnocuje reálným číslem a
3. požadavkem na minimalizaci/maximalizaci toho kritéria.



## Základní otázky

**PROČ?** AI, ML, robotika, řízení, statistika, teorie her

**JAK?** Programování

**CO?** Optimalizační úlohy jsou formulovány matematicky

- *Rozpoznávání a strojové učení*
- *Kombinatorická optimalizace*
- *Robotika*
- *Umělá inteligence v robotice*
- *Julia for Optimization and Learning*
- *Výpočetní teorie her*
- *Statistical Machine Learning*
- *Optimální a robustní řízení*

# O čem to bude

## 1. Aplikace lineární algebry

- Metoda nejmenších čtverců, lineární regrese
- PCA, ortogonální Prokrustův problém
- Maticové rozklady: QR, spektrální, Choleského, SVD

## 2. Analýza a numerické metody

- Podmínky optimality pro volné lokální extrémy
- Iterační metody: gradientní, Newtonova, Gauss-Newtonova, Levenberg-Marquardtova
- Omezení ve tvaru rovností, Lagrangeovy multiplikátory

## 3. Lineární programování

- Konvexní polyedry
- Simplexová metoda
- Dualita

## 4. Úvod do konvexní optimalizace

- Konvexní množiny a funkce
- Třídy konvexních úloh

## Programovací jazyky a balíky

- Python + NumPy + SciPy
- Matlab
- Rychle se prosazuje Julia + JuMP

## Solvery (řešiče)

- SeDuMi, GLPK, Gurobi, MOSEK

# Úvodní definice a příklady

---

# Úloha minimalizace

Minimalizuj  $f(x)$  za podmínky  $x \in X$

- Účelová funkce  $f: Y \rightarrow \mathbb{R}$
- Množina přípustných řešení  $X \subseteq Y$
- Minimum funkce  $f$  na množině  $X$  je prvek  $x^* \in X$  splňující

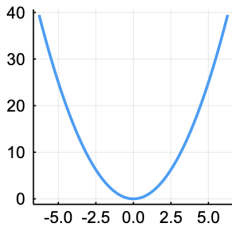
$$f(x^*) \leq f(x) \quad \forall x \in X$$

a množinu všech minim funkce  $f$  na  $X$  značíme  $\arg \min_{x \in X}$

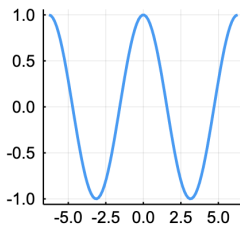


# Funkce a jejich minima

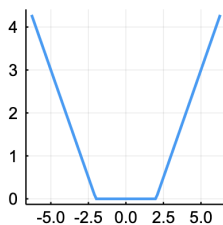
$x^2$



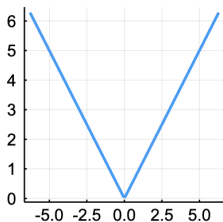
$\cos(x)$



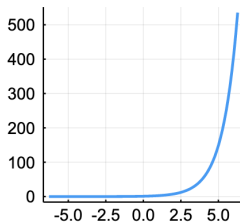
$\max(0, x-2, -2-x)$



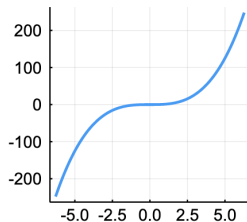
$\text{abs}(x)$



$\exp(x)$



$x^3$



# Úloha maximalizace

Maximalizuj  $f(x)$  za podmínky  $x \in X$

- **Maximum funkce**  $f$  na množině  $X$  je prvek  $x^* \in X$  splňující

$$f(x^*) \geq f(x) \quad \forall x \in X$$

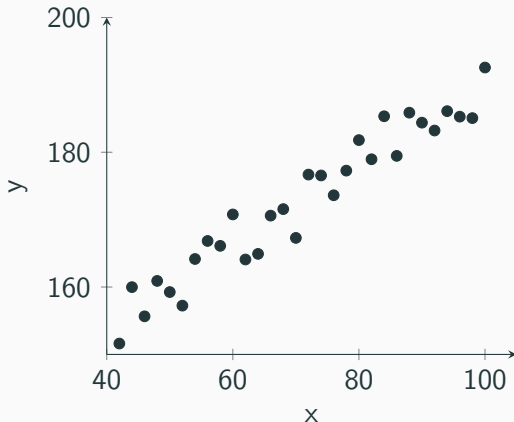
a množinu všech maxim funkce  $f$  na  $X$  značíme  $\arg \max_{x \in X} f(x)$

## Převod maximalizace na minimalizaci

$$\arg \max_{x \in X} f(x) = \arg \min_{x \in X} -f(x)$$

# Prokládáme body přímkou

Modelujeme vztah váhy  $x$  a výšky  $y$  na základě dat.



## Cíl

Hledáme přímku, která co nejtěsněji proloží černé body.

# Prokládáme body přímkou – formulace modelu

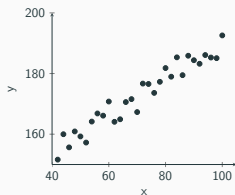
Máme  $m$  měření  $(x_i, y_i) \in \mathbb{R}^2$  váhy a výšky.

Vztah vyjádříme lineární funkcí

$$f(x, \theta_1, \theta_2) = \theta_1 + \theta_2 x,$$

kde  $\theta_1$  a  $\theta_2$  jsou neznámé parametry.

Soustava lineárních rovnic  $y_i = \theta_1 + \theta_2 x_i$ ,  $i = 1, \dots, m$ ,  
s neznámými  $\theta_1$  a  $\theta_2$  je vlivem náhody **přeurčená**.



## Úloha nejmenších čtverců

Minimalizuj  $\sum_{i=1}^m (y_i - f(x_i, \theta_1, \theta_2))^2$  za podmínky  $\theta_1, \theta_2 \in \mathbb{R}$

## Prokládáme body přímkou – formulace modelu maticově

$$\mathbf{y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_m \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{m \times 1} \quad \mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & x_1 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_m \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{m \times 2} \quad \boldsymbol{\theta} = \begin{bmatrix} \theta_1 \\ \theta_2 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{2 \times 1}$$

### Úloha nejmenších čtverců

Minimalizuj  $\|\mathbf{y} - \mathbf{A}\boldsymbol{\theta}\|^2$  za podmínky  $\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^2$

## Prokládáme body přímkou – řešení

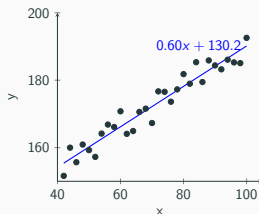
Pomocí **lineární algebry** lze úlohu reformulovat jako hledání řešení soustavy lineárních rovnic

$$\mathbf{A}^T \mathbf{A} \boldsymbol{\theta} = \mathbf{A}^T \mathbf{y}.$$

Ta má v našem případě jediné řešení  $\boldsymbol{\theta}^* = (\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T \mathbf{y}$ .

Optimální řešení úlohy nejmenších čtverců:

$$\theta_1^* = 130.2, \quad \theta_2^* = 0.6.$$



## Hledáme optimální směs zeleniny

Pro 3 druhy syrové zeleniny udává tabulka výživové hodnoty, ceny a nejmenší předepsaný obsah živin v jedné příloze jídla.

	<i>Mrkev</i>	<i>Bílé zelí</i>	<i>Okurka</i>	<b>Požadavek</b>
Vitamín A (mg/kg)	35	0.5	0.28	0.5 mg
Vitamín C (mg/kg)	60	300	80	15 mg
Vláknina (g/kg)	30	20	10	4 g
<b>Cena</b> (Kč/kg)	26	22	60	

### Cíl

Nalézt množství každého druhu zeleniny, které minimalizuje cenu přílohy jídla při splnění předepsaných výživových limitů.

## Hledáme optimální směs zeleniny – formulace modelu

	<i>Mrkev</i>	<i>Bílé zelí</i>	<i>Okurka</i>	<b>Požadavek</b>
Vitamín A (mg/kg)	35	0.5	0.28	0.5 mg
Vitamín C (mg/kg)	60	300	80	15 mg
Vláknina (g/kg)	30	20	10	4 g
<b>Cena</b> (Kč/kg)	26	22	60	

### Úloha lineárního programování

$$\min \quad 26x_1 + 22x_2 + 60x_3$$

$$\text{za podmíněk} \quad x_i \geq 0, \quad i = 1, 2, 3$$

$$35x_1 + 0.5x_2 + 0.28x_3 \geq 0.5$$

$$60x_1 + 300x_2 + 80x_3 \geq 15$$

$$30x_1 + 20x_2 + 10x_3 \geq 4$$



## Úloha lineárního programování

$$\min \quad 26x_1 + 22x_2 + 60x_3$$

$$\text{za podmíněk} \quad x_i \geq 0, \quad i = 1, 2, 3$$

$$35x_1 + 0.5x_2 + 0.28x_3 \geq 0.5$$

$$60x_1 + 300x_2 + 80x_3 \geq 15$$

$$30x_1 + 20x_2 + 10x_3 \geq 4$$

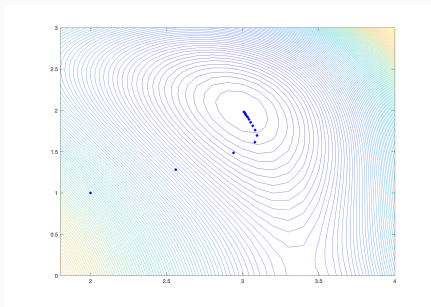
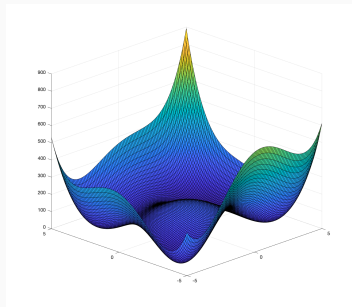
- Optimální řešení je  $(0.115, 0.027, 0)$  za cenu 3.592
- Při požadavku na okurku  $x_3 \geq 0.1$  dostaneme řešení  $(0.097, 0.004, 0.1)$  za cenu 8.618

# Minimalizujeme Himmelblauovu funkci

Funkce  $f(\mathbf{x}) = (x_1^2 + x_2 - 11)^2 + (x_1 + x_2^2 - 7)^2$  má 4 lokální minima (např. (3,2)) a 1 lokální maximum.

**Gradientní metoda** z bodu  $\mathbf{x}_0 = (2, 1)$  s krokem  $\alpha = 0.01$ :

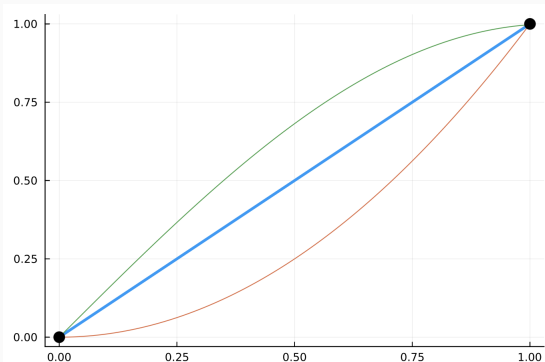
$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \alpha \nabla f(\mathbf{x}_k)$$



# Nejkratší křivka

## Cíl

Nalezněte nejkratší křivku spojující 2 body v rovině.



## Nejkratší křivka – formulace a řešení úlohy

- Uvažujme  $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^2$  a předpokládejme, že  $x_1 \neq y_1$ .
- **Křivka** spojující  $\mathbf{x}$  a  $\mathbf{y}$  je grafem spojitě diferencovatelné funkce  $f: [x_1, y_1] \rightarrow \mathbb{R}$ , kde  $f(x_1) = x_2$  a  $f(y_1) = y_2$ .
- **Délka křivky** je  $D(f) = \int_{x_1}^{y_1} \sqrt{1 + f'(t)^2} dt$

### Úloha variačního počtu

$$\min D(f)$$

kde  $f$  je spojitě diferencovatelná funkce vyhovující omezením výše

Úlohu řeší afinní funkce procházející body  $\mathbf{x}$  a  $\mathbf{y}$ .

Podle typu množiny přípustných řešení  $X$  mluvíme o

- **spojité optimalizaci**, kde  $X \subseteq \mathbb{R}^n$  je nespočetná množina,
- **diskrétní optimalizaci**, kde  $X$  je konečná/spočetná,
- **variačním počtu**, kde  $X$  obsahuje reálné funkce.

V tomto kurzu se budeme zabývat spojitou optimalizací.

# Obecně o úloze spojité optimalizace

---

## Obecný tvar

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x_1, \dots, x_n) \\ \text{za podmíněk} \quad & g_i(x_1, \dots, x_n) \leq 0, \quad i = 1, \dots, m \\ & h_i(x_1, \dots, x_n) = 0, \quad i = 1, \dots, \ell \\ & x_1, \dots, x_n \in \mathbb{R} \end{aligned}$$

Vektorový zápis:

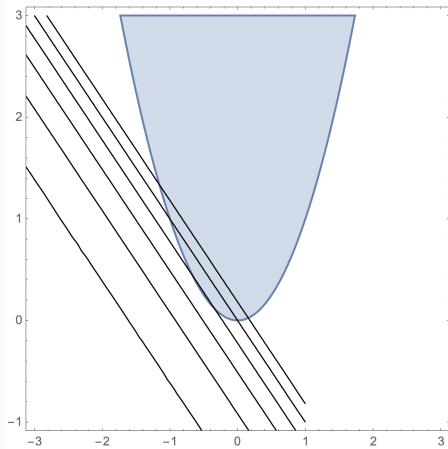
$$\min \{ f(\mathbf{x}) \mid \mathbf{g}(\mathbf{x}) \leq \mathbf{0}, \mathbf{h}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}, \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \}$$

# Příklad

Řešíme úlohu

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2} e^{x_1 + x_2}$$

za podmínky  $x_1^2 \leq x_2$ .



- Na obrázku jsou vrstevnice účelové funkce a množina přípustných řešení
- Globální minimum  $(-\frac{1}{2}, \frac{1}{4})$  lze snadno nalézt úvahou



$$\min \{ f(\mathbf{x}) \mid \underbrace{\mathbf{g}(\mathbf{x}) \leq \mathbf{0}, \mathbf{h}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}}_X, \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \}$$

## Je úloha přípustná?

Je množina  $X$  neprázdná?

## Existuje globální/lokální minimum?

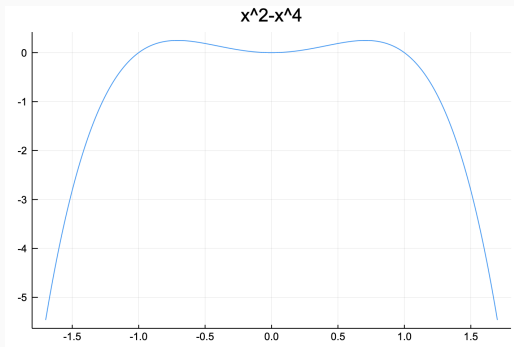
- Nabývá funkce  $f$  na  $X$  minima, neboli  $\arg \min_{\mathbf{x} \in X} f(\mathbf{x}) \neq \emptyset$ ?
- Jak velká je množina  $\arg \min_{\mathbf{x} \in X} f(\mathbf{x})$ ?
- Pokud  $\arg \min_{\mathbf{x} \in X} f(\mathbf{x}) = \emptyset$ , spokojíme se s lokálním minimem?

# Příklad

Řešíme úlohu

$$\min_{x \in \mathbb{R}} x^2 - x^4$$

bez omezujících podmínek.



- Globální minimum neexistuje:  $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} x^4 \left( \frac{1}{x^2} - 1 \right) = -\infty$
- Nutná podmínka  $f'(x) = 2x - 4x^3 = 2x(1 - 2x^2) = 0$
- Lokální extrém může nastat pouze v bodech  $0, \frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}}$
- Jen bod 0 je lokální minimum, protože  $f''(0) = 2$

# Různé formy řešení optimalizačních úloh

## Analytický tvar

Globální minimum úlohy nejmenších čtverců pro lineární regresi je vektor parametrů  $\theta^* = (\mathbf{A}^\top \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^\top \mathbf{y} \in \mathbb{R}^2$ .

## Algoritmus

Globální minimum v úloze lineárního programování je směs zeleniny  $\mathbf{x}^* \in \mathbb{R}^3$  na výstupu simplexové metody.

## Iterační metoda

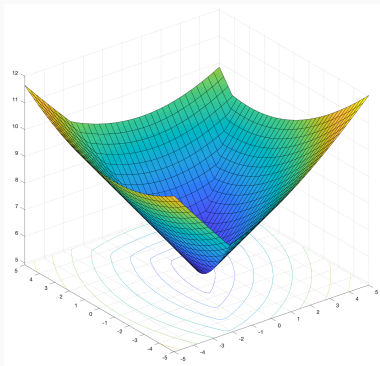
Lokální minimum  $\mathbf{x}^*$  funkce  $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  aproximuje posloupnost  $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots$  generovaná gradientní metodou.

# Úloha na optimální umístění

Hledáme lokaci pro heliport, z něhož dolétne helikoptéra po úsečce do nejvzdálenějšího z míst  $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_m \in \mathbb{R}^2$  v nejkratším čase:

## Definice úlohy

Minimalizuj  $f(\mathbf{x}) = \max_{i=1}^m \|\mathbf{x} - \mathbf{a}_i\|$  za podmínky  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2$



Účelová funkce je konvexní, ale nehladká. Minimum existuje.

$$\mathbf{a}_1 = (0, 0), \mathbf{a}_2 = (5, -1), \\ \mathbf{a}_3 = (1, -4), \mathbf{a}_4 = (-4, 3)$$

# Ekvivalentní úlohy

- Formulujeme úlohy, které jsou ekvivalentní té předchozí
- Najděte nejmenší kruh obsahující body  $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_m \in \mathbb{R}^2$ :

## Úloha s nehladkými omezeními

Min  $r$     z.p.  $\|\mathbf{x} - \mathbf{a}_i\| \leq r, i = 1, \dots, m, \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^2, r \in \mathbb{R}$

## Kvadratické programování s kvadrat. omezeními (QCQP)

Min  $r^2$     z.p.  $\|\mathbf{x} - \mathbf{a}_i\|^2 \leq r^2, i = 1, \dots, m, \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^2, r \in \mathbb{R}$

## Kvadratické programování (QP)

Min  $\rho + \|\mathbf{x}\|^2$     z.p.  $\rho + 2\mathbf{a}^\top \mathbf{x} \geq \|\mathbf{a}\|^2, \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^2, \rho \in \mathbb{R}$