

Optimalizace

Ondřej Schindler



Co nás dneska čeká

- 1) Zavedení pojmů: Optimalizovatelný problém, dimenzionalita problému, prostor parametrů, objektivní funkce
- 2) Optimalizace
- 3) Optimalizační metody

Co nás dneska čeká?

- 1) **Zavedení pojmů: Optimalizovatelný problém, dimenzionalita problému, prostor parametrů, objektivní funkce**
- 2) Optimalizace
- 3) Optimalizační metody

Optimalizovatelný problém

- Více řešení
- Porovnatelná kvalita řešení
- (Dobrá definice problému)

Optimalizovatelný problém

S optimalizovatelnými problémy se setkáváme **každý den!**

“Na světě se nestane nic, v čem by nebylo vidět smysl nějakého minima nebo maxima.” (Euler)

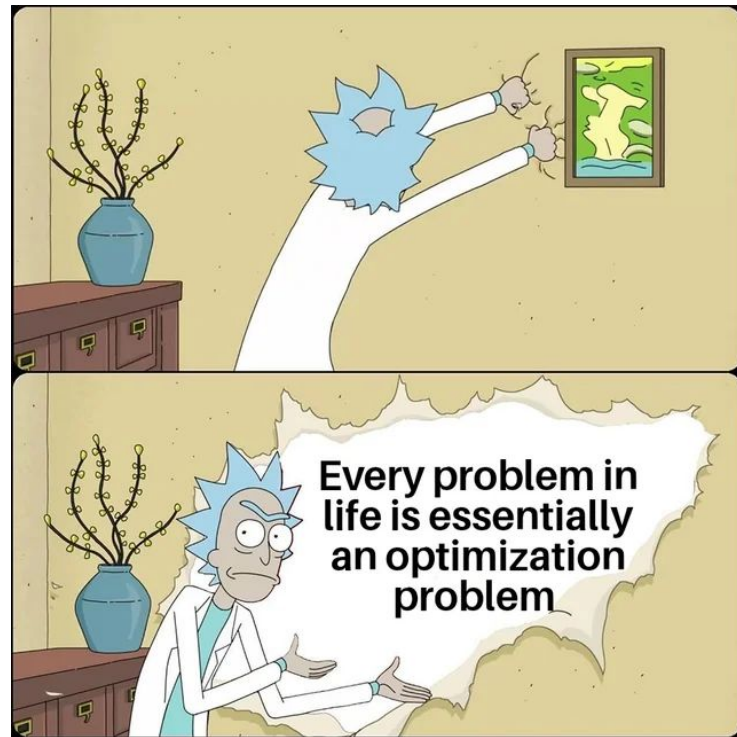
“Náš svět je nejlepší ze všech možných světů, a proto lze jeho zákony vyjádřit extrémálními principy.” (Leibnitz)

Optimalizovatelný problém

S optimalizovatelnými problémy se setkáváme **každý den!**



“Jaký je váš optimalizovatelný problém?”



Optimalizovatelný problém

S optimalizovatelnými problémy se setkáváme **každý den!**

Jak zalévat kytku? Jak osolit jídlo? Jak se učit? Jak se obléct? Jaký mít účes?

V kolik hodin jít spát? Co jíst? Jaký materiál na nůž vybrat?

Optimalizovatelný problém

S optimalizovatelnými problémy se setkáváme **každý den!**

Jak zalévat kytku? Jak osolit jídlo? Jak se učit? Jak se obléct? Jaký mít účes?

V kolik hodin jít spát? Co jíst?

Jaký materiál na nůž vybrat?

Jsou to dobře definované problémy?



Lépe definovaný optimalizovatelný problém

Jak zalévat kytku?

&

Jak často jaké množství vody přidat do 100ml květináče (30% rašeliny, 70% mulče), ve kterém je zasazená měsíc stará květina Matricaria chamomilla pokud je vlhkost okolního vzduchu 60%, okolní teplota 23°C a květina má světlo 18 hodin denně?



Lépe definovaný optimalizovatelný problém

Jak osolit jídlo?

Jak se učit?

Jak se obléct?

Jaký mít účes?

V kolik hodin jít spát?

Co jíst?

Jaký materiál na nůž vybrat?



DŽÍN	OPTIMALIZACE
Plní přání	Hledá optimální řešení problému
Je v láhvi	Je na (super)počítači
Poslouchá majitele láhve	Poslouchá programátora
Udělá přesně co se mu řekne	Udělá přesně co se jí řekne
Pro moudré je vlastnictví láhve přínosem	Pro moudré je optimalizace přínosem
Pro pošetilé je vlastnictví láhve zkázou	Pro pošetilé je optimalizace zkázou

Jak se dostat z Komárova na Campus?

Dimezionalita problému

- Počet proměnných ovlivňujících kvalitu řešení

Jak často jaké množství vody přidat do 100ml květináče (30% rašeliny, 70% mulče), ve kterém je zasazená měsíc stará květina Matricaria chamomilla pokud je vlhkost okolního vzduchu 60%, okolní teplota 23°C a květina má světlo 18 hodin denně?

Dimezionalita problému

- Počet proměnných ovlivňujících kvalitu řešení

Jak často jaké množství vody přidat do 100ml květináče (30% rašeliny, 70% mulče), ve kterém je zasazená měsíc stará květinu Matricaria chamomilla pokud je vlhkost okolního vzduchu 60%, okolní teplota 23°C a květina má světlo 18 hodin denně? (2)

Optimalizace struktury molekuly?

Dimezionalita problému

- Počet proměnných (parametrů) ovlivňujících kvalitu řešení

Jak často jaké množství vody přidat do 100ml květináče (30% rašeliny, 70% mulče), ve kterém je zasazená měsíc stará květinu Matricaria chamomilla pokud je vlhkost okolního vzduchu 60%, okolní teplota 23°C a květina má světlo 18 hodin denně? (2)

Optimalizace struktury molekuly? (~3N)

Trénování umělé inteligence?

Dimezionalita problému

- Počet proměnných (parametrů) ovlivňujících kvalitu řešení

Jak často jaké množství vody přidat do 100ml květináče (30% rašeliny, 70% mulče), ve kterém je zasazená měsíc stará květinu Matricaria chamomilla pokud je vlhkost okolního vzduchu 60%, okolní teplota 23°C a květina má světlo 18 hodin denně? (2)

Optimalizace struktury molekuly? ($\sim 3N$)

Trénování umělé inteligence? ($\sim 10^6$)



Prostor parametrů

- N dimenzionální prostor, kde N je počet parametrů problému
- Každý parametr je reprezentován jednou dimenzí
- Každý jeden bod v tomto prostoru reprezentuje jedno konkrétní řešení problému

Prostor parametrů

- N dimenzionální prostor, kde N je počet parametrů problému
 - Každý parametr je reprezentován jednou dimenzí
 - Každý jeden bod v tomto prostoru reprezentuje jedno konkrétní řešení problému
- Jak ohodnotit dané řešení?

Objektivní funkce

- Vstupem je sada parametrů (bod prostoru parametrů, jedno řešení) a výstupem je reálné číslo jehož hodnota určuje kvalitu daného řešení (objektivní hodnota)
- Hodnoty objektivní funkce tvoří hyperplochu
- Obvykle čím menší tím lepší (minimalizace)
- Hodnota objektivní funkce tohoto čísla pak vyjadřuje kvalitu řešení
- Účelová funkce, cílová funkce, kritériální funkce, nákladová funkce, hodnotící funkce...

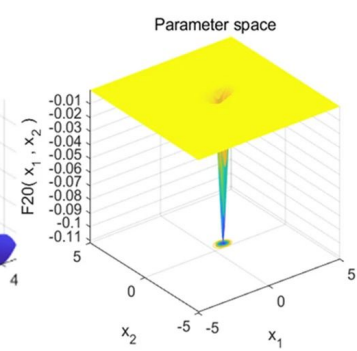
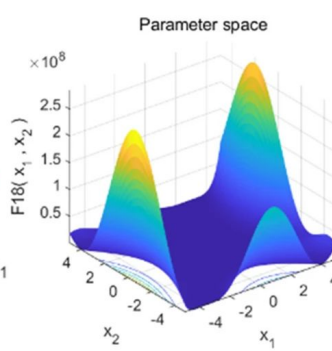
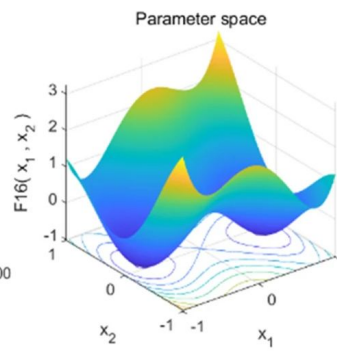
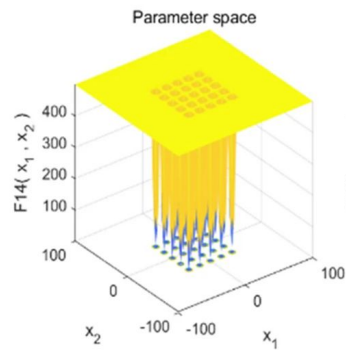
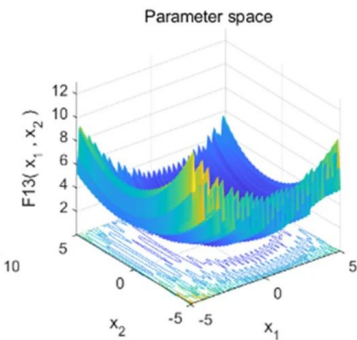
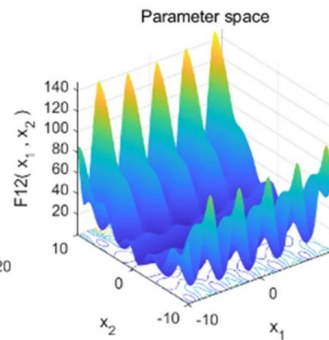
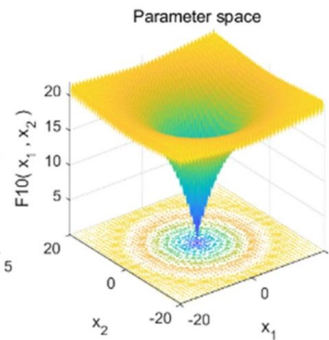
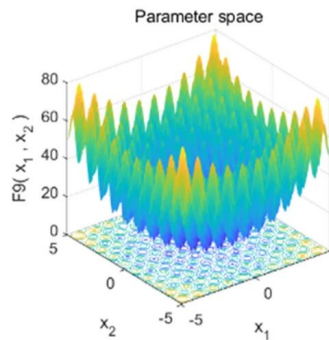
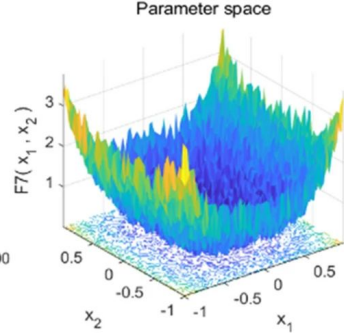
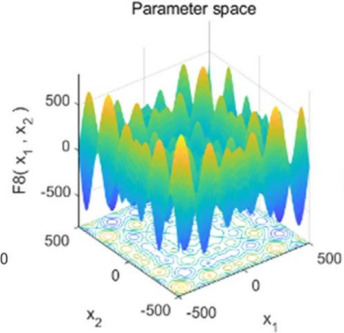
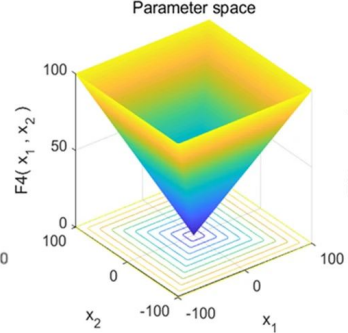
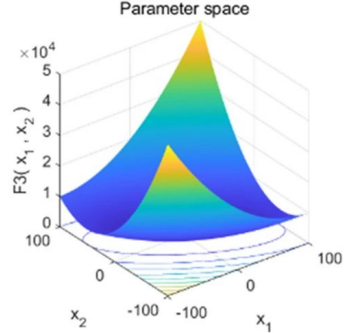
Tvar objektivní funkce

- Závisí na problému!
- Její tvar je stejně důležitý jako definice samotného problému!

Optimalizace struktury molekuly? → Energie molekuly

*Zalévání Chamomilly? → **Hmotnost rostliny? Plocha listů? Počet semen?***

Trénování Alphafoldu? → Statistika (RMSE, Pearsonův korelační koeficient)



Co nás dneska čeká?

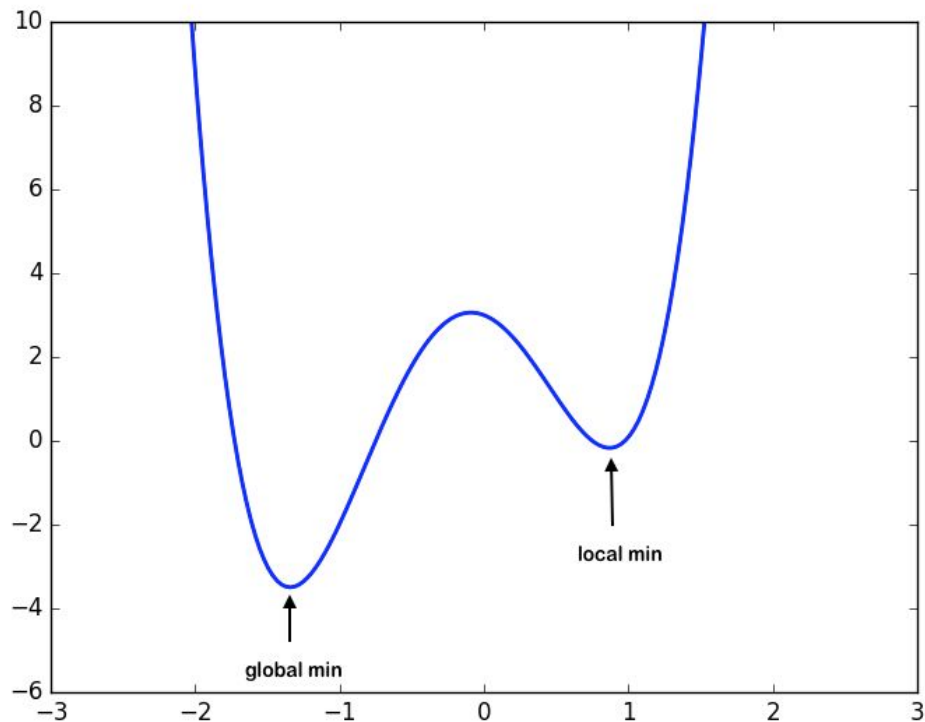
1) Zavedení pojmů: Optimalizovatelný problém, dimenzionalita problému, prostor parametrů, objektivní funkce

2) Optimalizace

3) Optimalizační metody

Optimalizace

Hledání extrémů objektivní funkce.

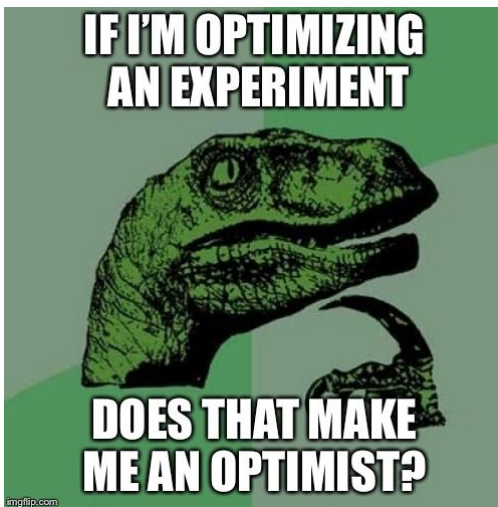
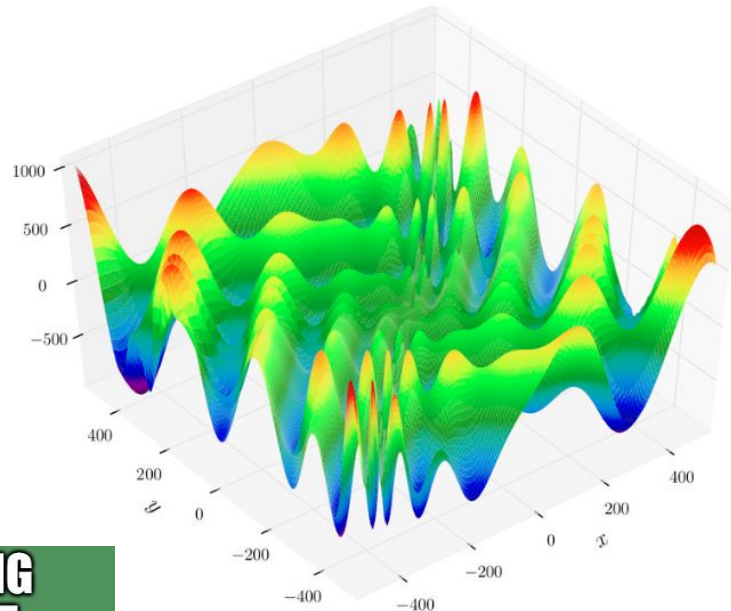


Co je náročného na optimalizaci?

- hluboké porozumění optimalizovaného problému
- vytvoření objektivní funkce
- znalost optimalizačních metod

Proč optimalizovat?

- Přesnější řešení
- Optimalizace vícerozměrných problémů
- Pokročilé optimalizační metody
- (Super)počítače



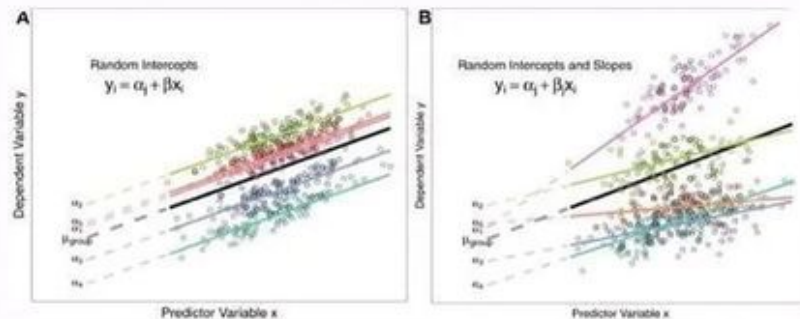
Optimalizace v bioinformatice

- Prokládání bodů křivkou
- Kvantová mechanika
- Molekulová dynamika
- Force-fieldy
- Hrubozrnné modely
- Struktura proteinu
- Empirické metody
- QSPR/QSAR modelování
- Strojové učení
- ...

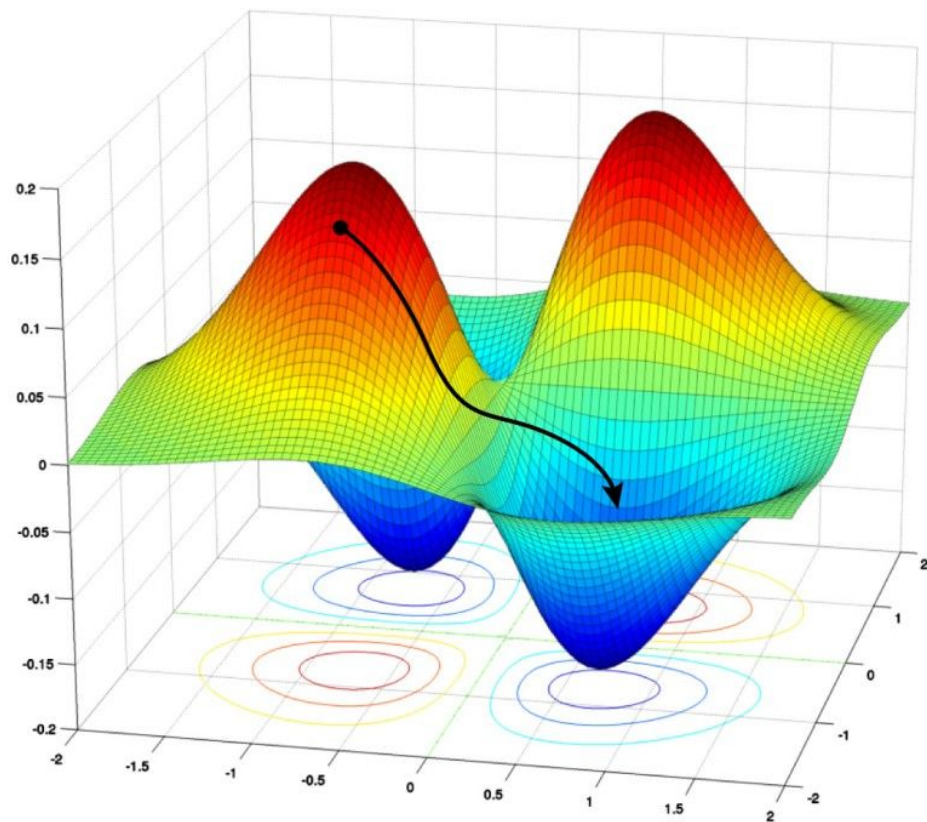
The modelling you know as a child



The modelling you know as an adult

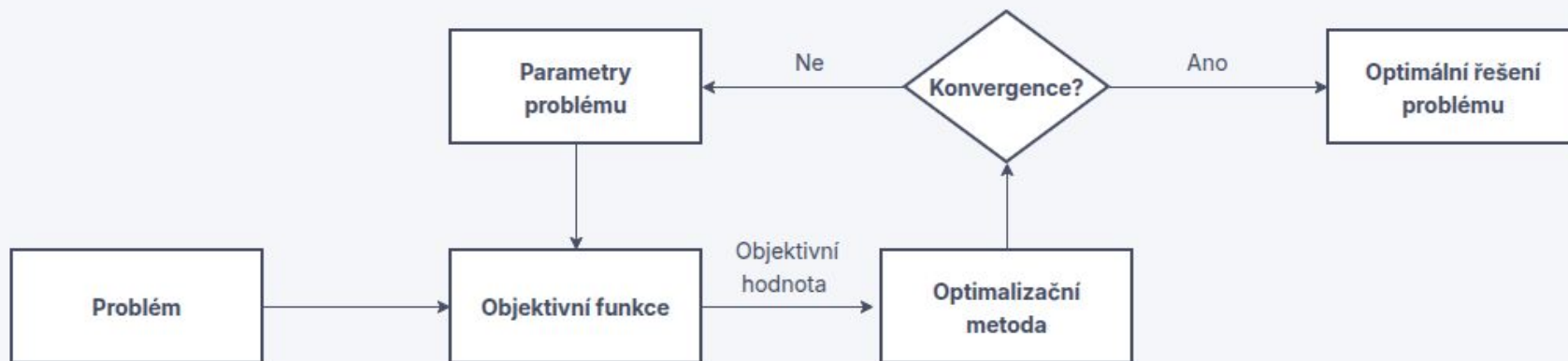


Optimalizace



Optimalizace

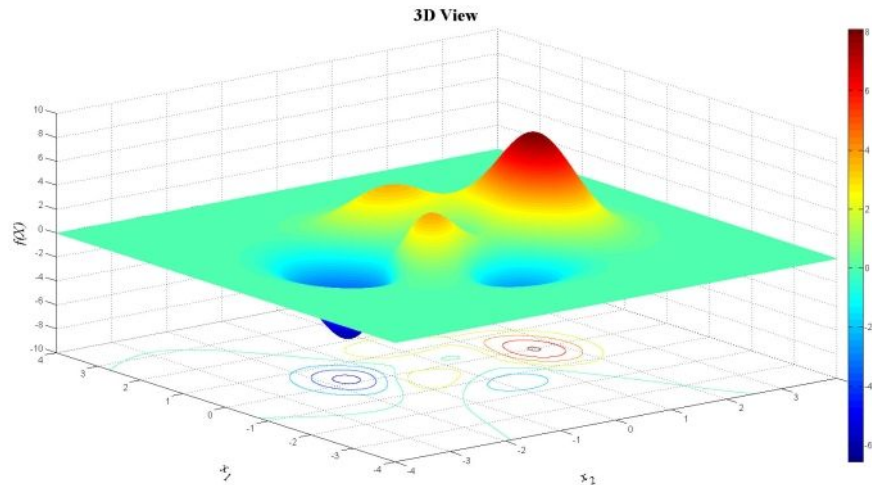
Iterativní hledání extrémů objektivní funkce.



Konvergence v optimalizaci

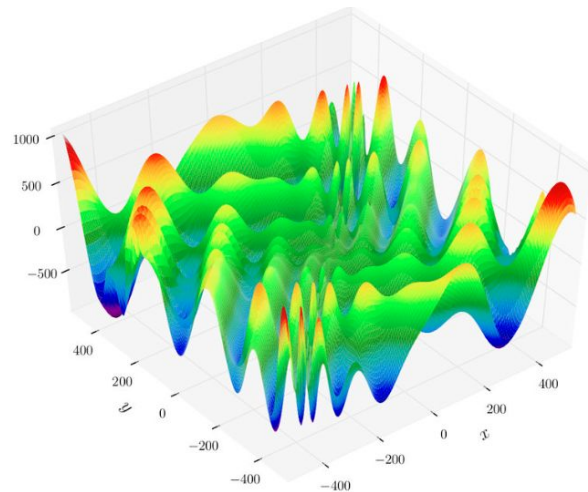
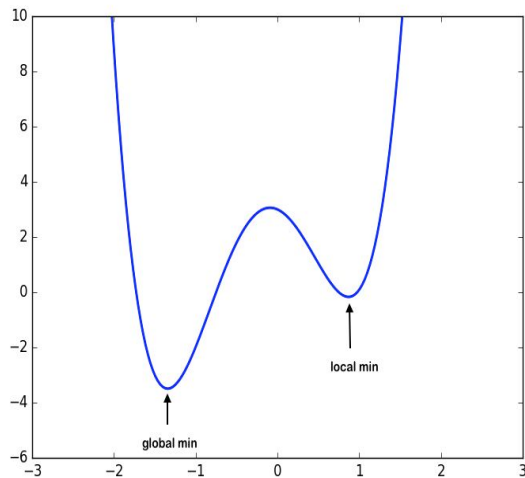
“Změna je již natolik malá, že jsme ochotni jí zanedbat.”

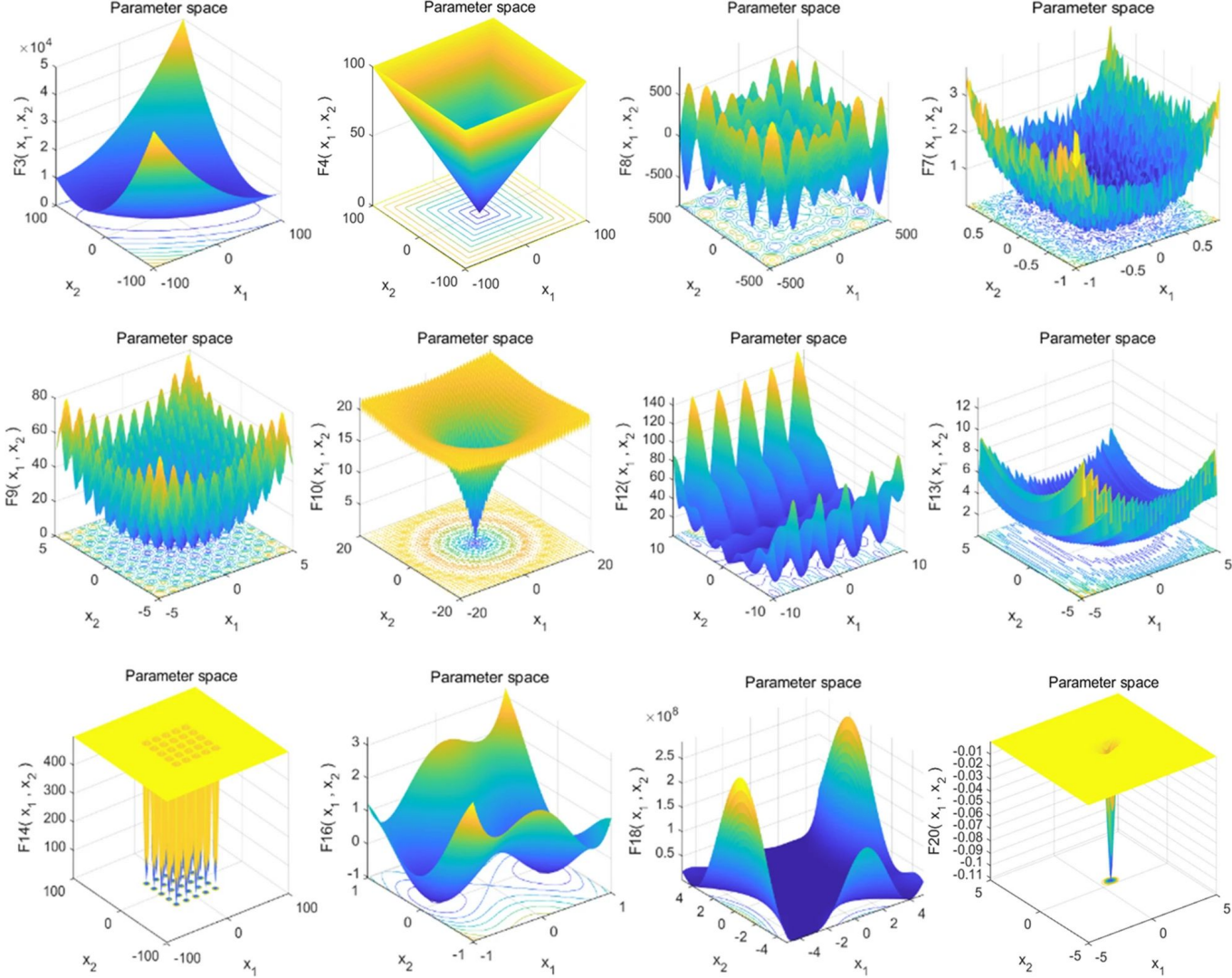
- Změna objektivní funkce
- Změna parametrů



Kritéria konvergence mohou zásadně ovlivnit výsledek optimalizace!

Optimalizace	LOKÁLNÍ	GLOBÁLNÍ
Cíl optimalizace	Lokální minimum	Globální minimum
Jistota nalezení	Ano	Ne
Rychlost	Rychlá	Pomalá
Vstup	Sada parametrů	Omezený prostor
Paralelizovatelnost	Špatná	Dobrá





Speciální případy optimalizací

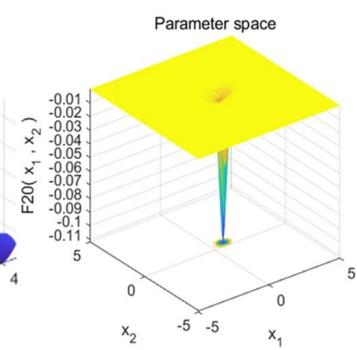
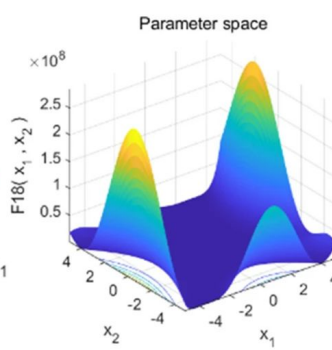
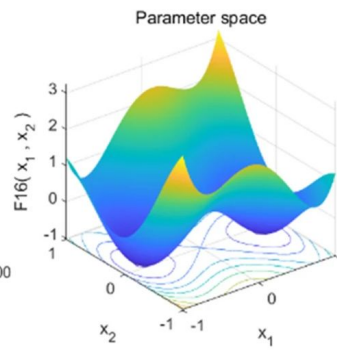
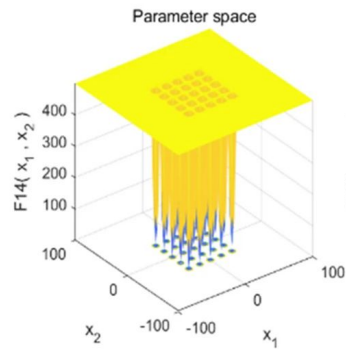
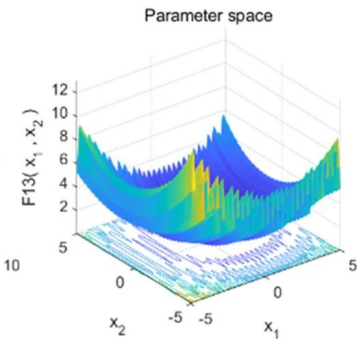
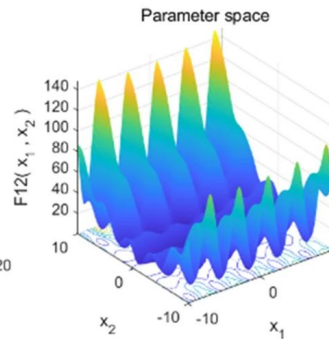
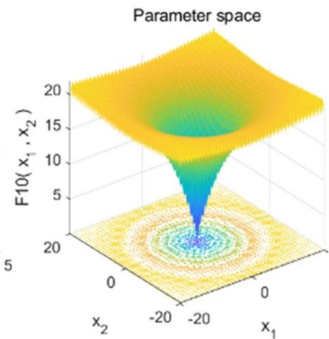
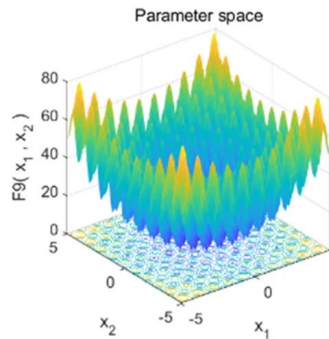
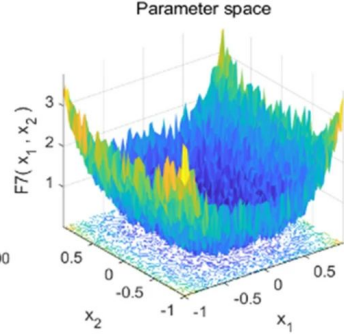
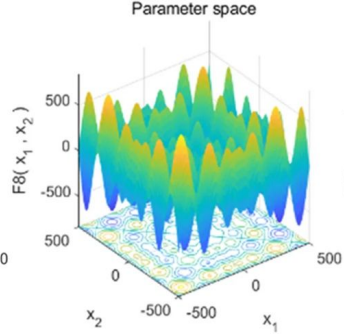
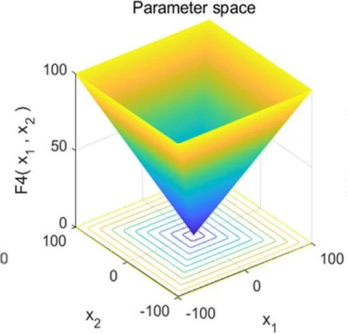
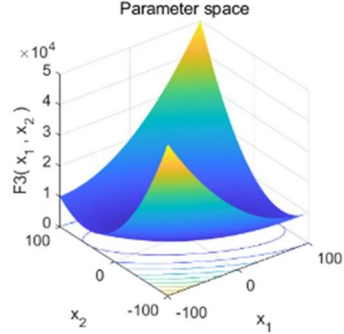
- 1) **Diskrétní optimalizace** - hodnoty objektivní funkce nabývají pouze celočíselných hodnot
- 2) **Optimalizace s omezením** - parametry vůči sobě jsou v nějakém vztahu

Co nás dneska čeká?

- 1) Zavedení pojmů: Optimalizovatelný problém, dimenzionalita problému, prostor parametrů, objektivní funkce
- 2) Optimalizace
- 3) **Optimalizační metody**

Poznámky pro začátek

- Optimalizační metody dělíme na lokální a globální
- Optimalizačních metod existuje mnoho
- Není potřeba všechny znát, protože spousta jich je speciálních (vyvinutých pro konkrétní typ objektivní funkce)
- Optimalizační metody mají většinou své vlastní parametry (optimalizace nastavení optimalizační metody)



Lokálně optimalizační metody

- Hledají lokální minimum
- Pokud zkonvergují, víme, že lokální minimum našly
- Jsou rychlé
- Vstupem je sada parametrů (jedno řešení problému)
- Obecně jsou hůře paralelizovatelné

Random optimalizace

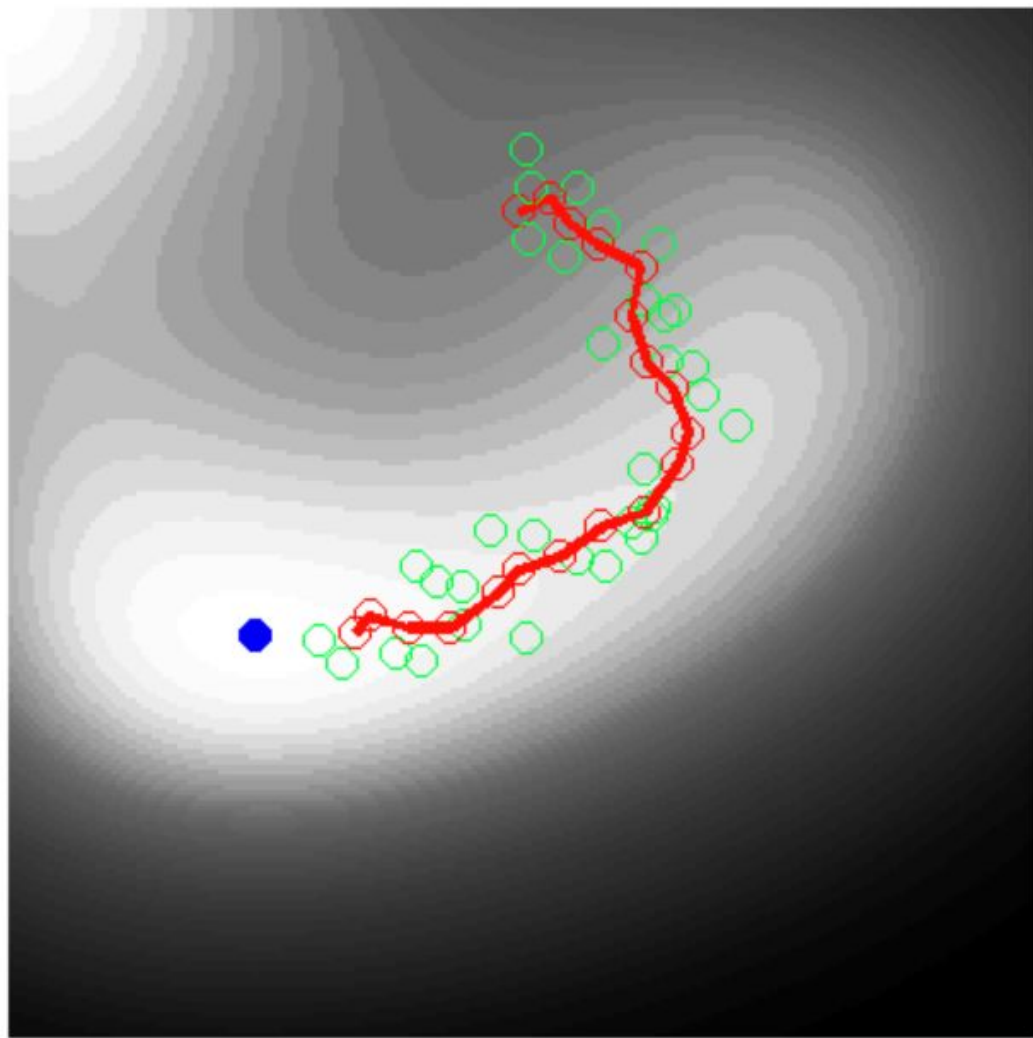
- Lokálně optimalizační metoda
- Generujeme náhodné body kolem bodu se zatím nejlepší dosaženou objektivní hodnotou

Výhody:

- Robustní
- Paralelizovatelná

Nevýhody:

- Pomalá
- V některých případech extrémně pomalu konverguje



Simplexová metoda

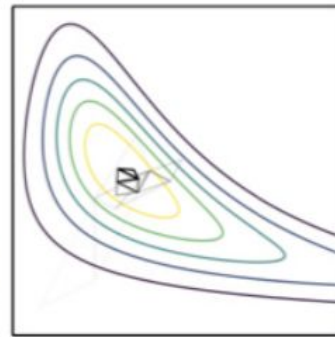
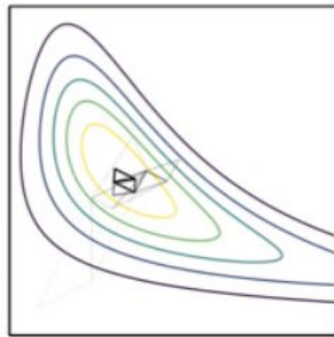
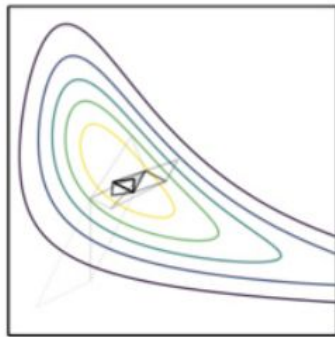
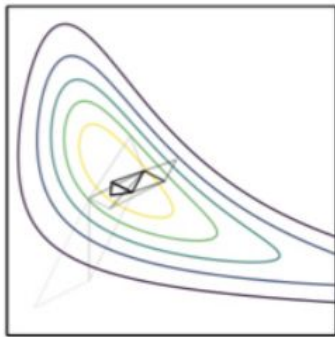
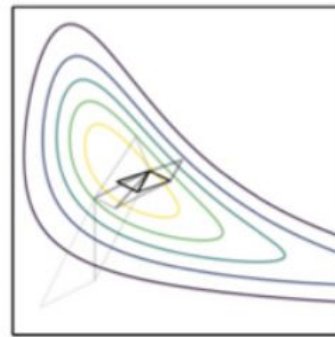
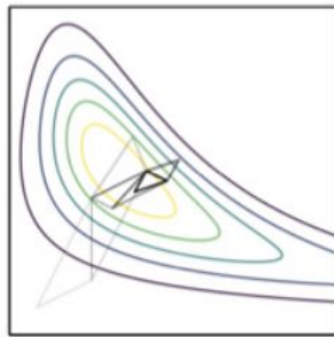
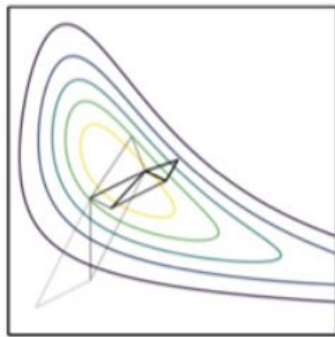
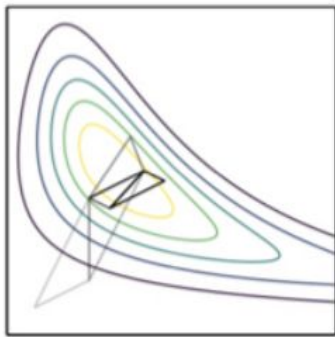
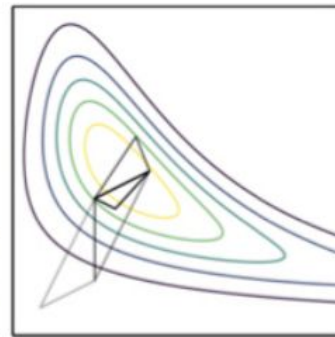
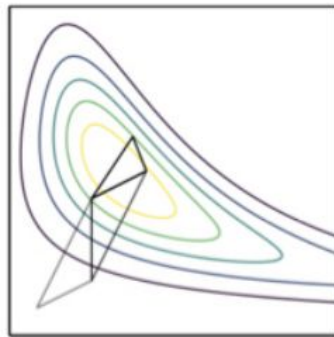
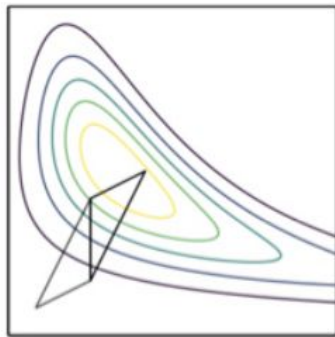
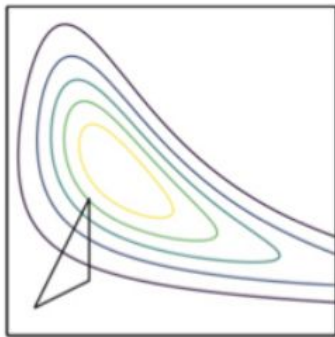
- Lokálně optimalizační metoda
- Pohybujeme po hyperploše simplexem tak, že vrchol s nejvyšší objektivní hodnotou projektujeme skrze rovinu tvořenou ostatními vrcholy

Výhody:

- Robustní

Nevýhody:

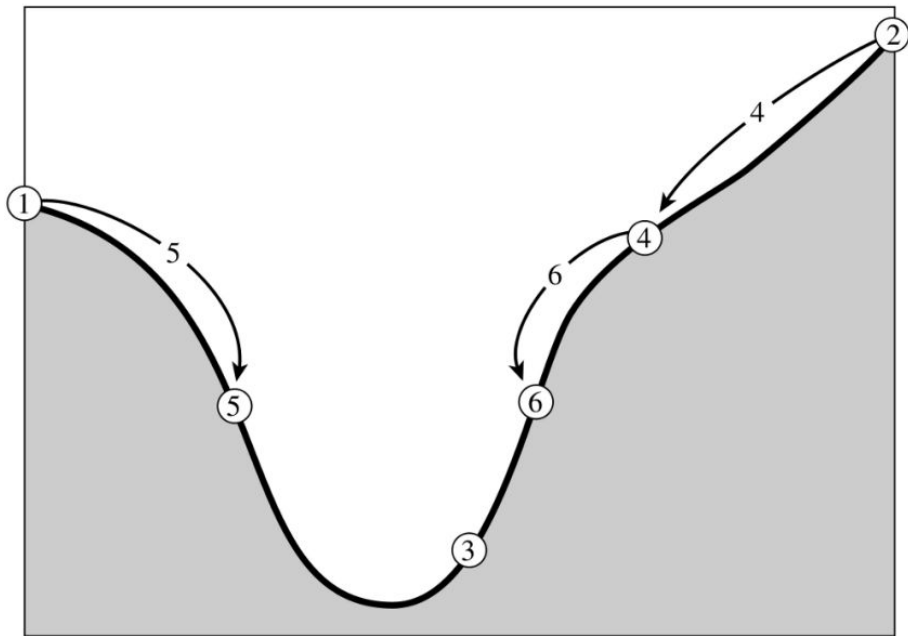
- Pomalá



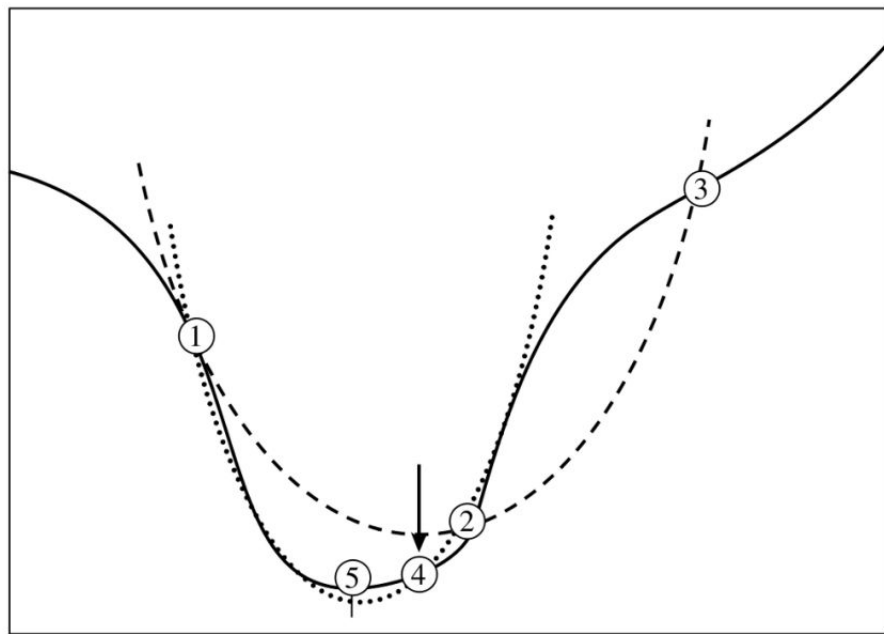
Spádové metody

- Dvoufázové metody:
 - 1) Určíme směr
 - 2) Postupujeme tím směrem, dokud klesáme
- Každá iterace je tedy 1D optimalizace.
- Jak efektivně postupovat v daném směru?
 - Fixní krok
 - Metoda zlatého řezu
 - ...
 - Brentova metoda (parabolická interpolace)

Metoda zlatého řezu



Brentova metoda



Základní spádové metody

Metody

- **Metoda sestupu po koordinátách**
- **Metoda největšího spádu**

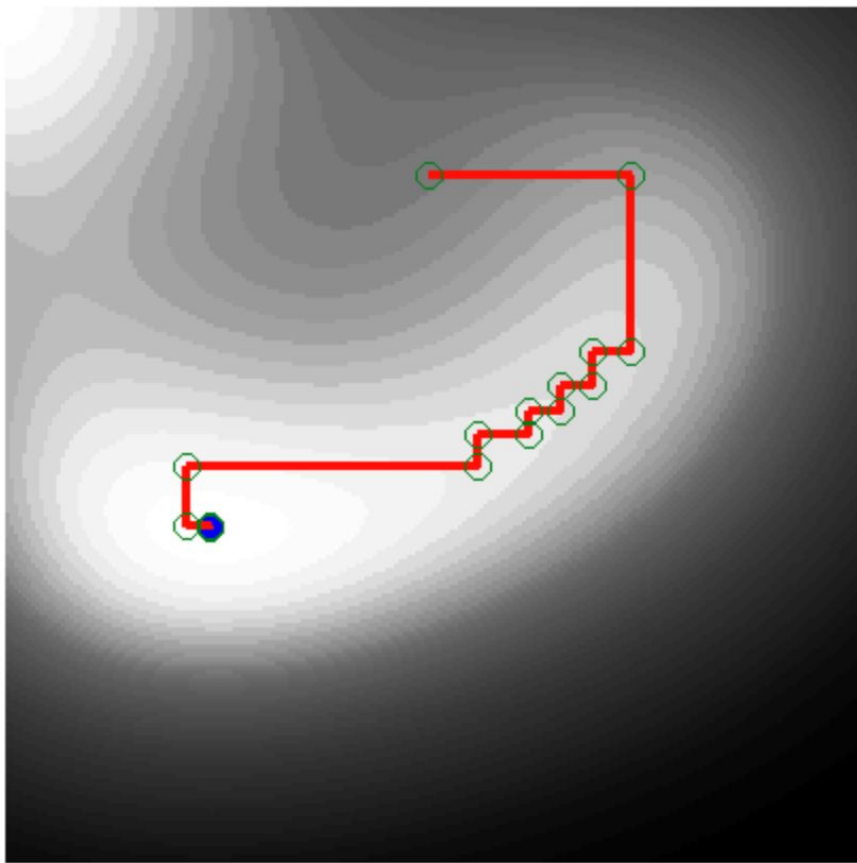
Výhody:

- Rychlejší než Simplexová metoda

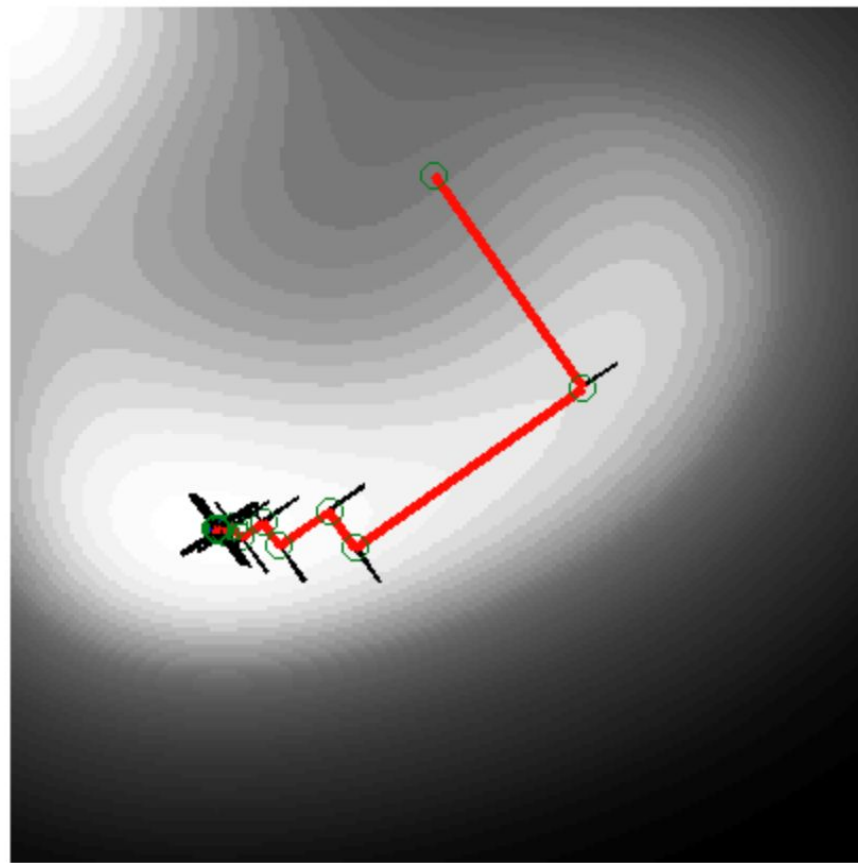
Nevýhody:

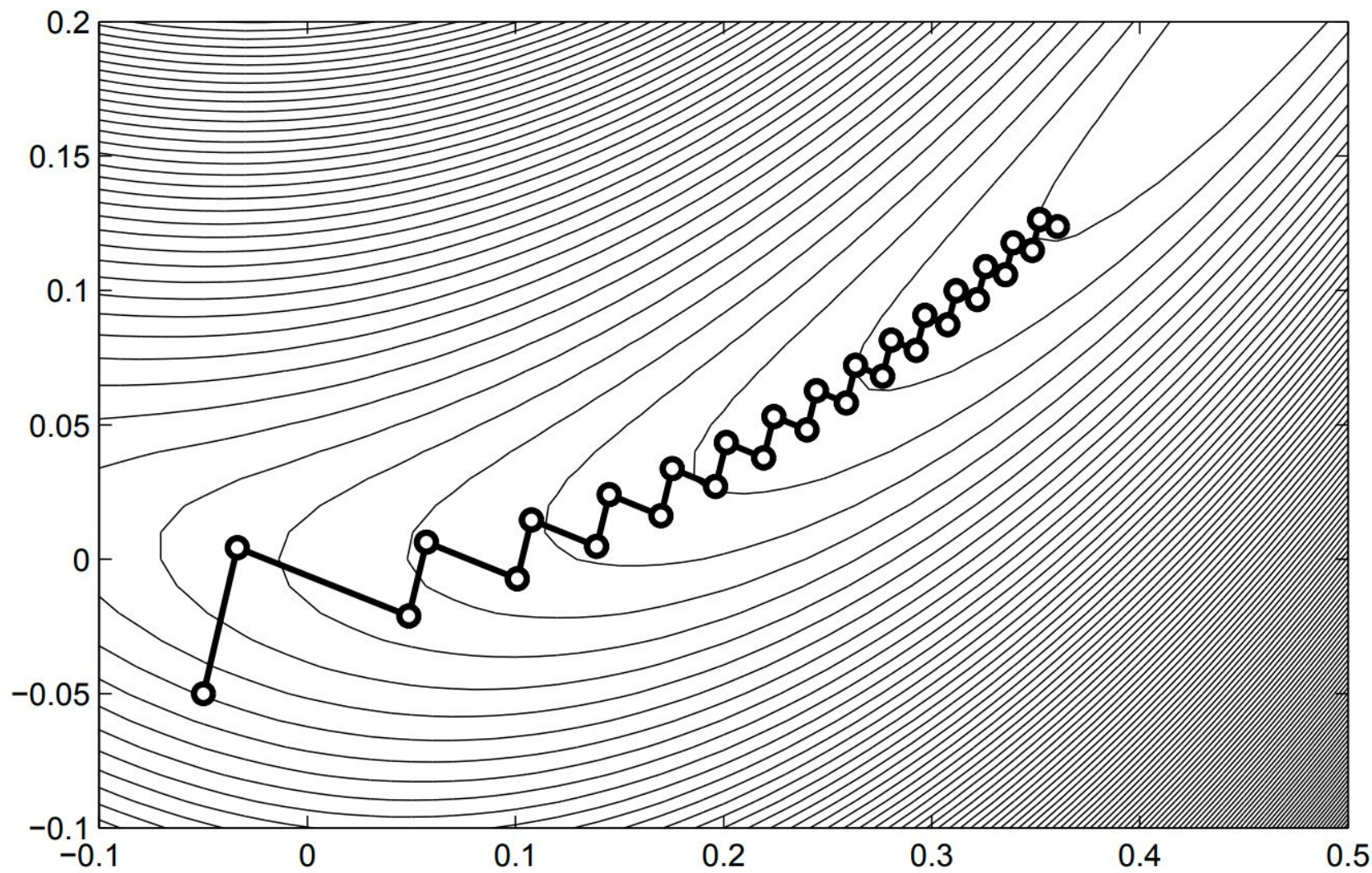
- “zig-zag” chování

Metoda sestupu po koordinátách



Metoda největšího spádu





Spádové metody s korekcí z předchozího kroku

Metody

- Metoda konjugovaných směrů
- **Metoda konjugovaných gradientů**

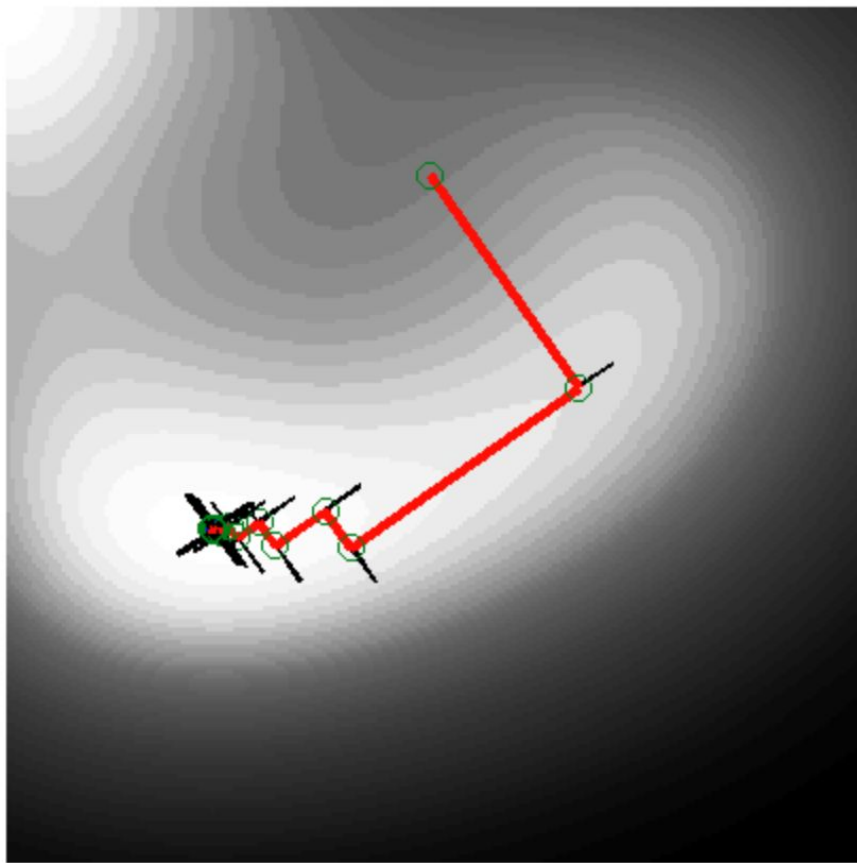
Výhody:

- Rychlejší

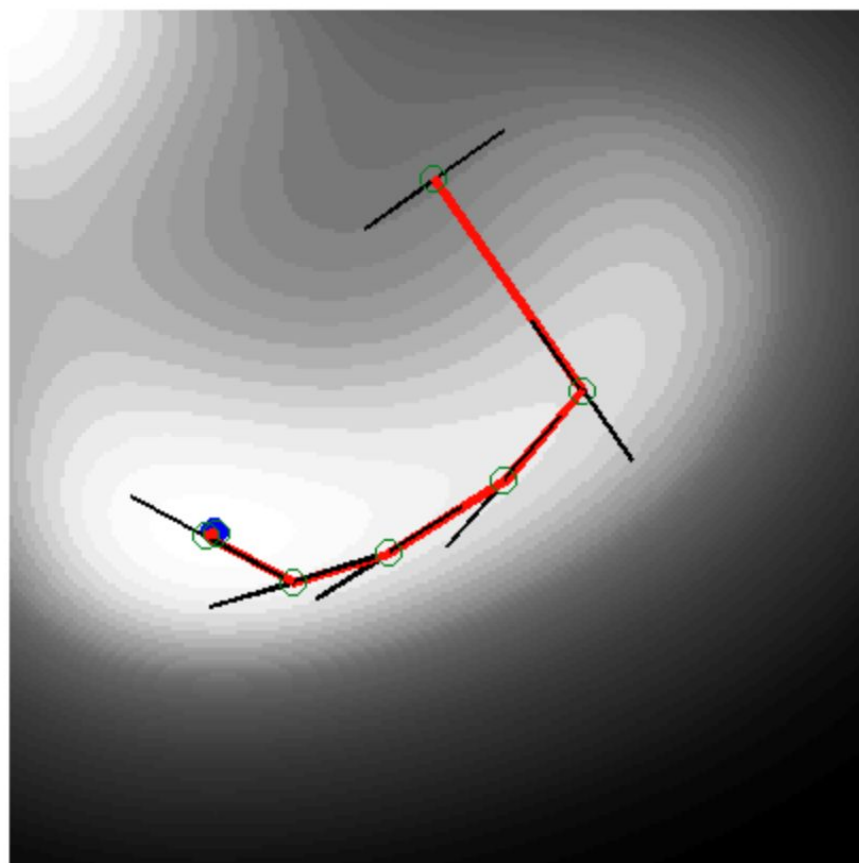
Nevýhody:

- Vyjíměčně problémy s konvergencí

Gradient



Konjugované gradienty



Spádové metody využívající druhé parciální derivace (hessián)

Postaveny na myšlence, že objektivní funkce v oblasti minima se podobá paraboloidu

Metody

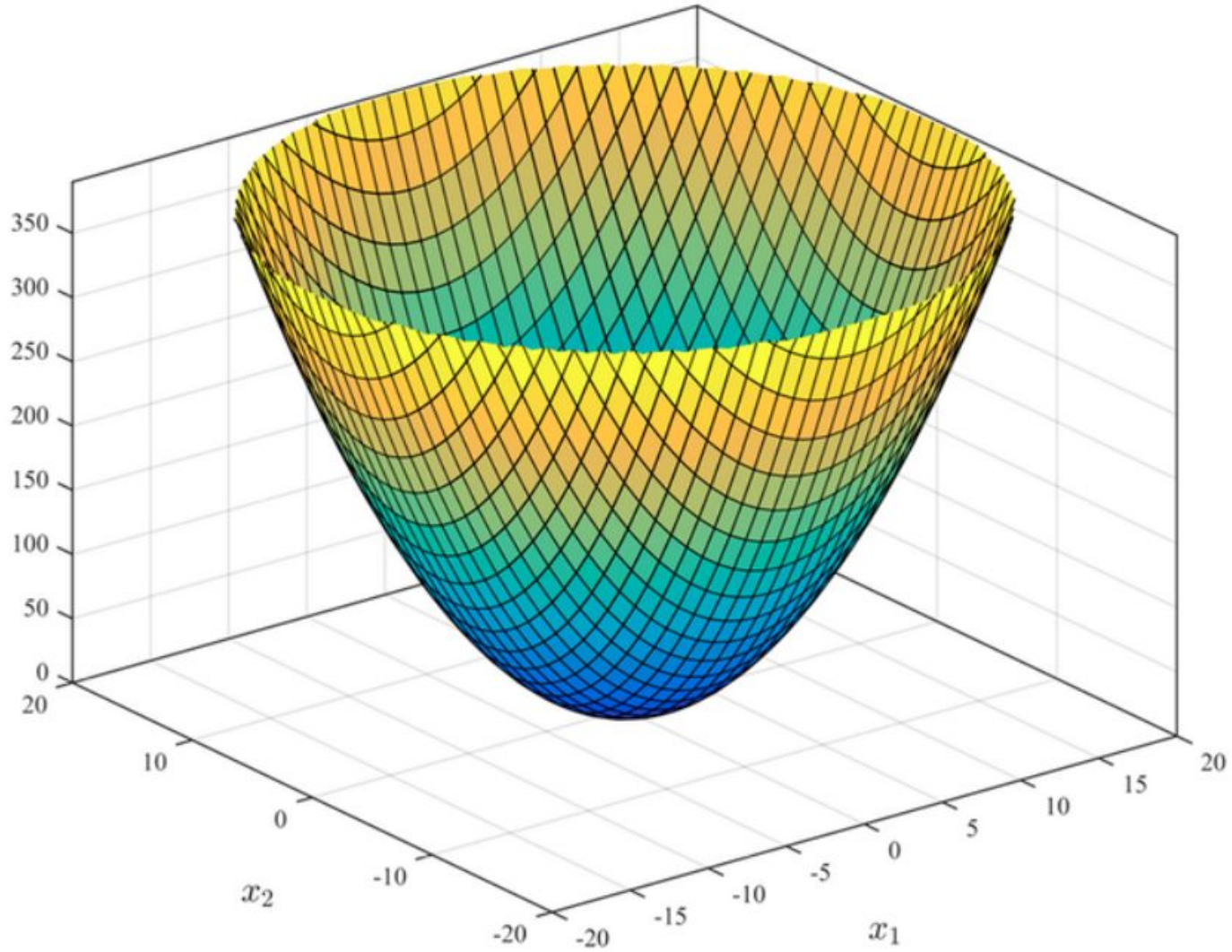
- **Broyden–Fletcher–Goldfarb–Shanno metoda (BFGS)**
- **L-BFGS**

Výhody:

- V ideálním případě extrémně rychlé

Nevýhody:

- Vyjímečně problémy s konvergencí
- Nekonzistentní rychlost v neideálních případech
- Výpočetně náročné pro mnohodomenzionální problémy



Metody aproximující objektivní funkci za paraboloid

Postaveny na myšlence, že objektivní funkce v oblasti minima se podobá paraboloidu

Metody

- **BOBYQA**
- **NEWUOA**

Výhody:

- Extrémně rychle v ideálních případech

Nevýhody:

- Vyjímečně problémy s konvergencí
- Nekonzistentní rychlost v neideálních případech
- Výpočetně náročné pro mnohodomenzionální problémy

Evolve lokálně minimalizačních metod

Náhodný bod - Random optimalizace

Bod ve směru spádu - Simplexová metoda

Polopřímka ve směru spádu - Metoda sestupu po koordinátách

Polopřímka ve směru gradientu - Metoda největšího spádu

Polopřímka ve směru gradientu s “korekcí” z předchozích iterací - Metoda konjugovaných gradientů

Polopřímka vypočítaná z gradientu a jeho druhých derivací - metoda L-BFGS

Minimum parabolidu - metoda NEWUOA

Shrnutí lokálně optimalizačních metod

- Lokální optimalizace je rychlá
- Lokálně optimalizační metody mají své vlastní nastavení
- Hlavní metody k zapamatování:
 - Simplexová metoda (robustní)
 - Metoda konjugovaných gradientů (rychlá)
 - L-BFGS (rychlá)
 - NEWUOA (rychlá)
- Je dobrou praxí zkusit více různých optimalizačních metod a jejich nastavení
- Pokud jsou jednotlivé iterace pomalé, tak můžeme spustit více metod s omezeným množstvím kroků a porovnáním výsledků vybrat nejlepší metodu

Globálně optimalizační metody

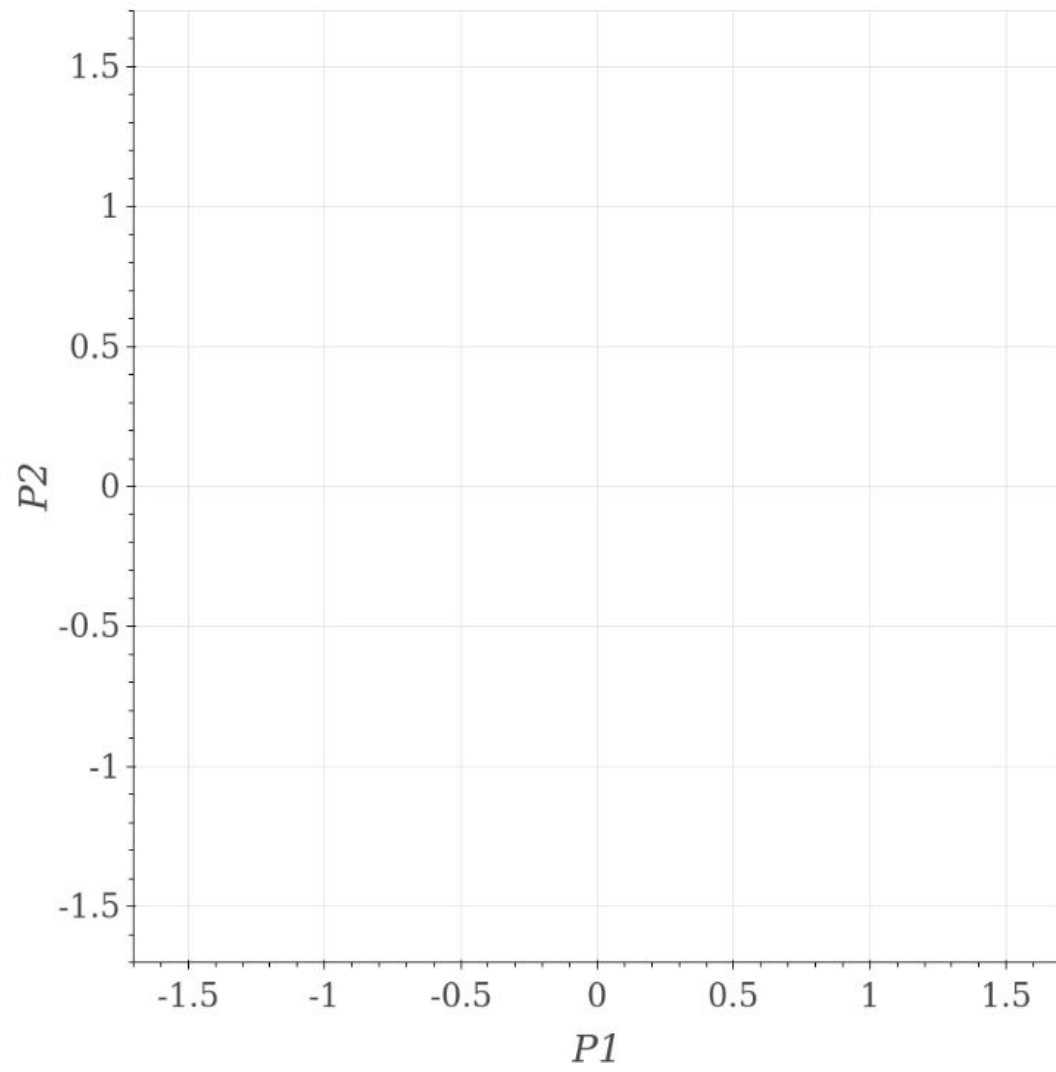
- Hledají globální minimum
- I když zkonvergují, tak nevíme, zda jsme globální minimum našli
- Jsou pomalé
- Vstupem je prostor parametrů
- Jsou obvykle dobře paralelizovatelné

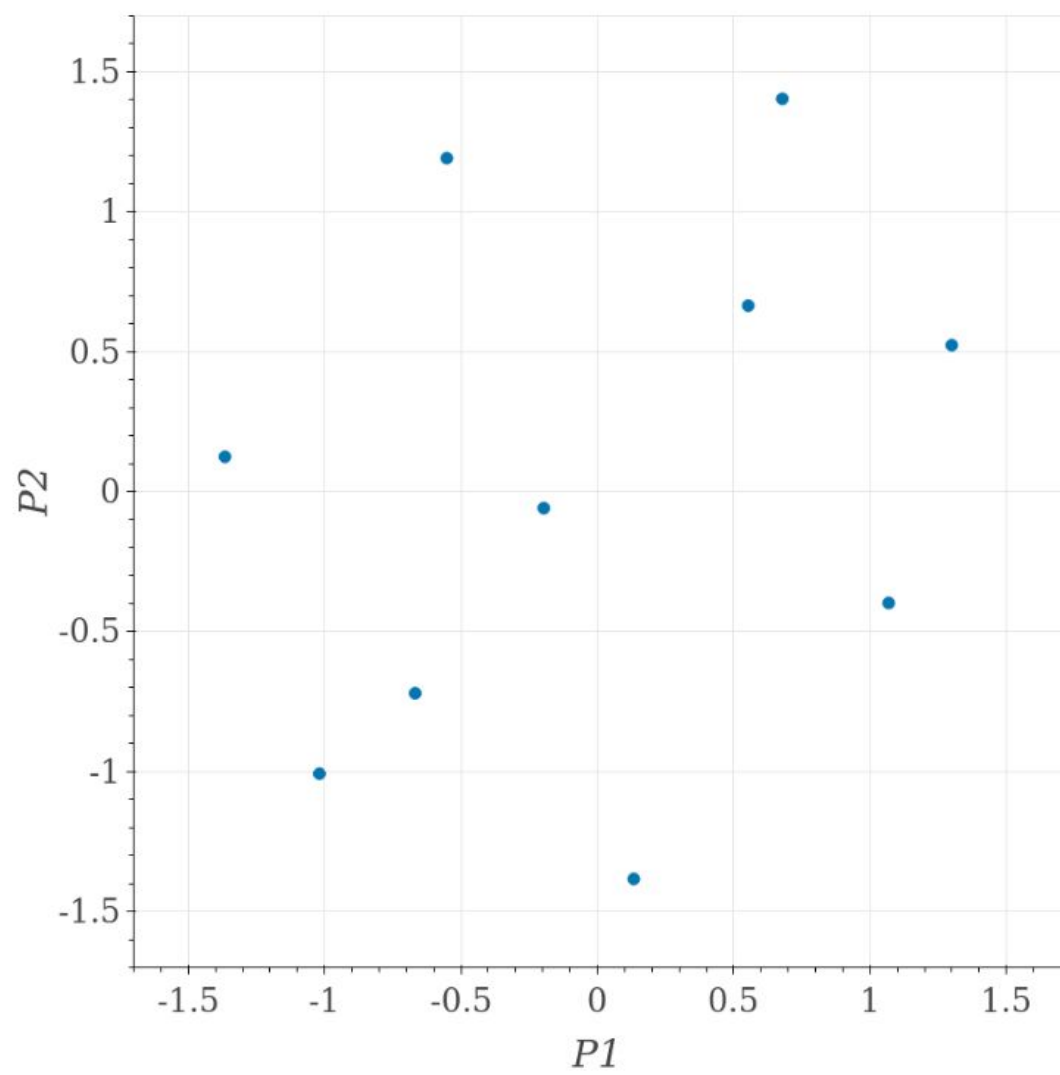
Globálně optimalizační metody

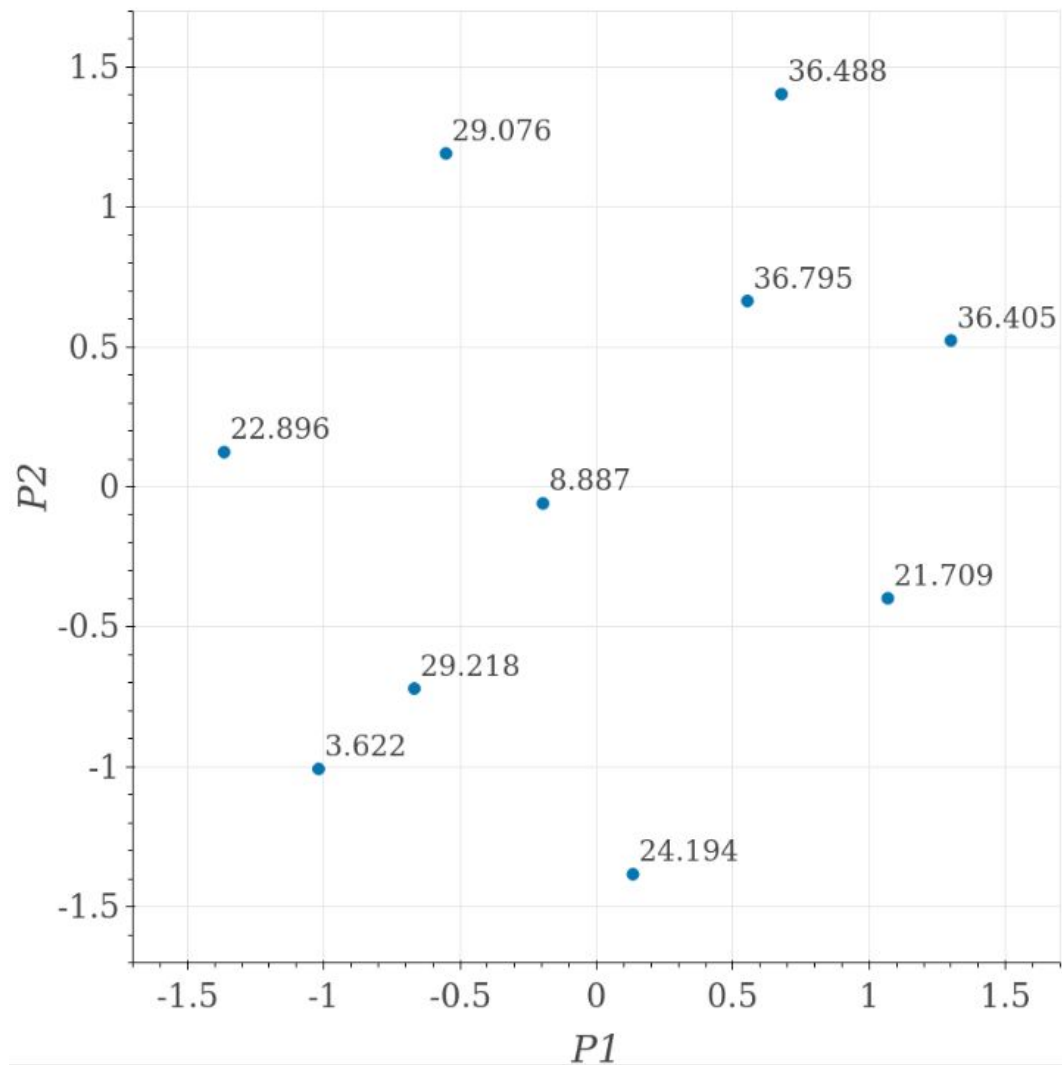
- **Simulované žíhání** - postupné ochlazování částic
- **Diferenciální evoluce** - kombinace nejlepších výsledků a vyloučení nejhorších
- **Basinhopping** - Střídání lokální minimalizace a disturbance
- **Bayesovská optimalizace** - Rekonstrukce objektivní funkce
- **Guided minimization** - Gridové prohledávání prostoru

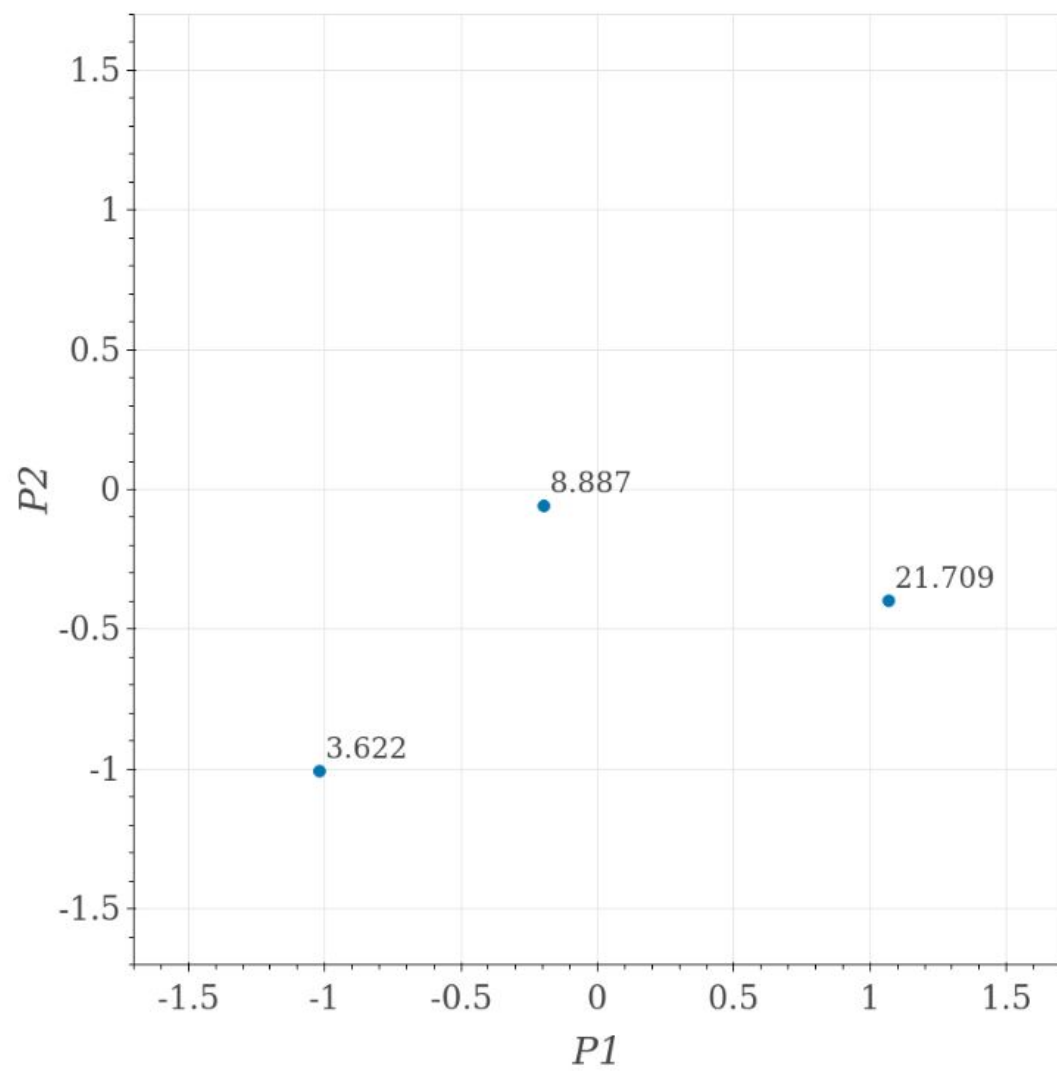
Guided minimization

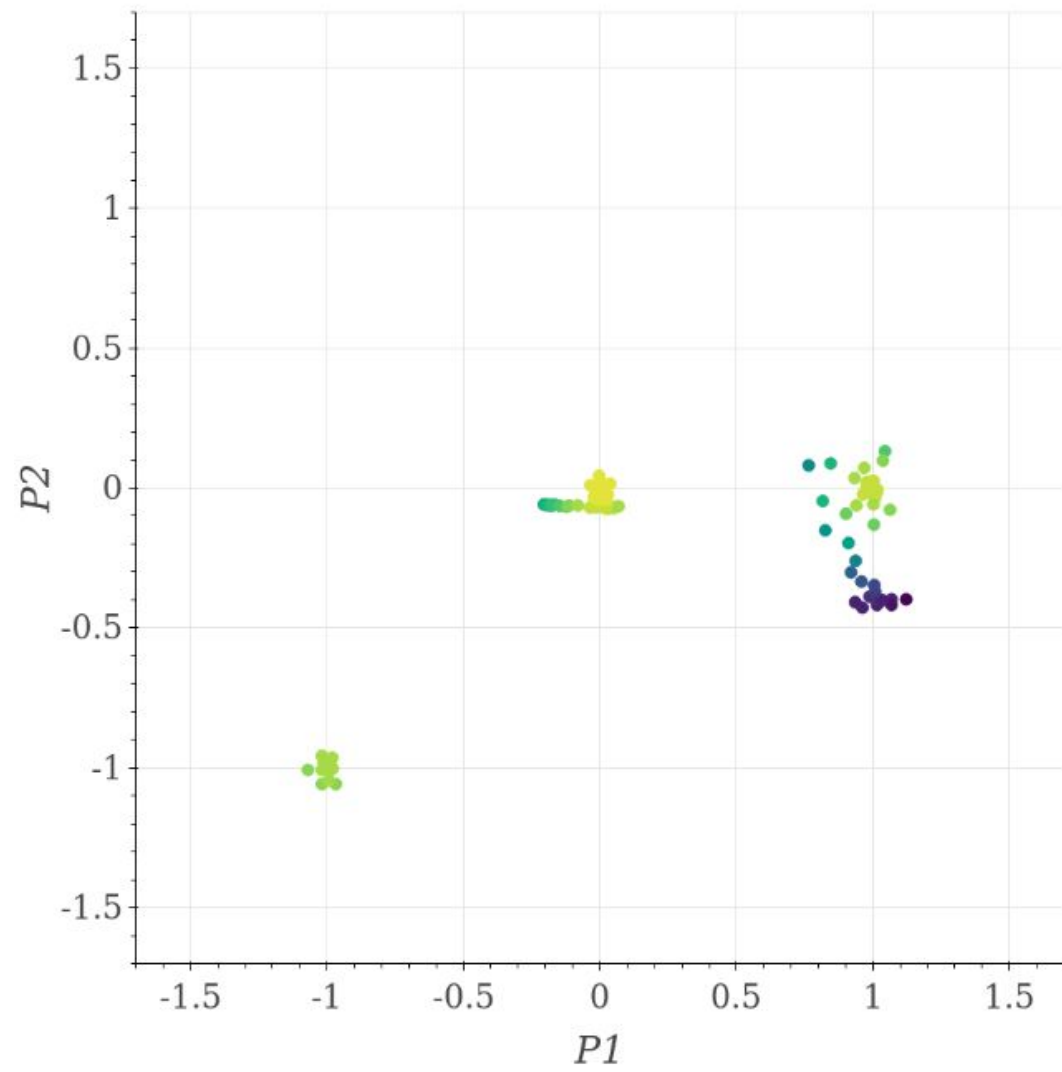
- Globálně optimalizační metoda
- Definujeme náhodné body v prostoru tak, aby byl prostor co nejlépe “pokrytý” a v nich vyhodnotíme objektivní funkci
- Z nejlepších bodů pak spustíme lokální optimalizaci

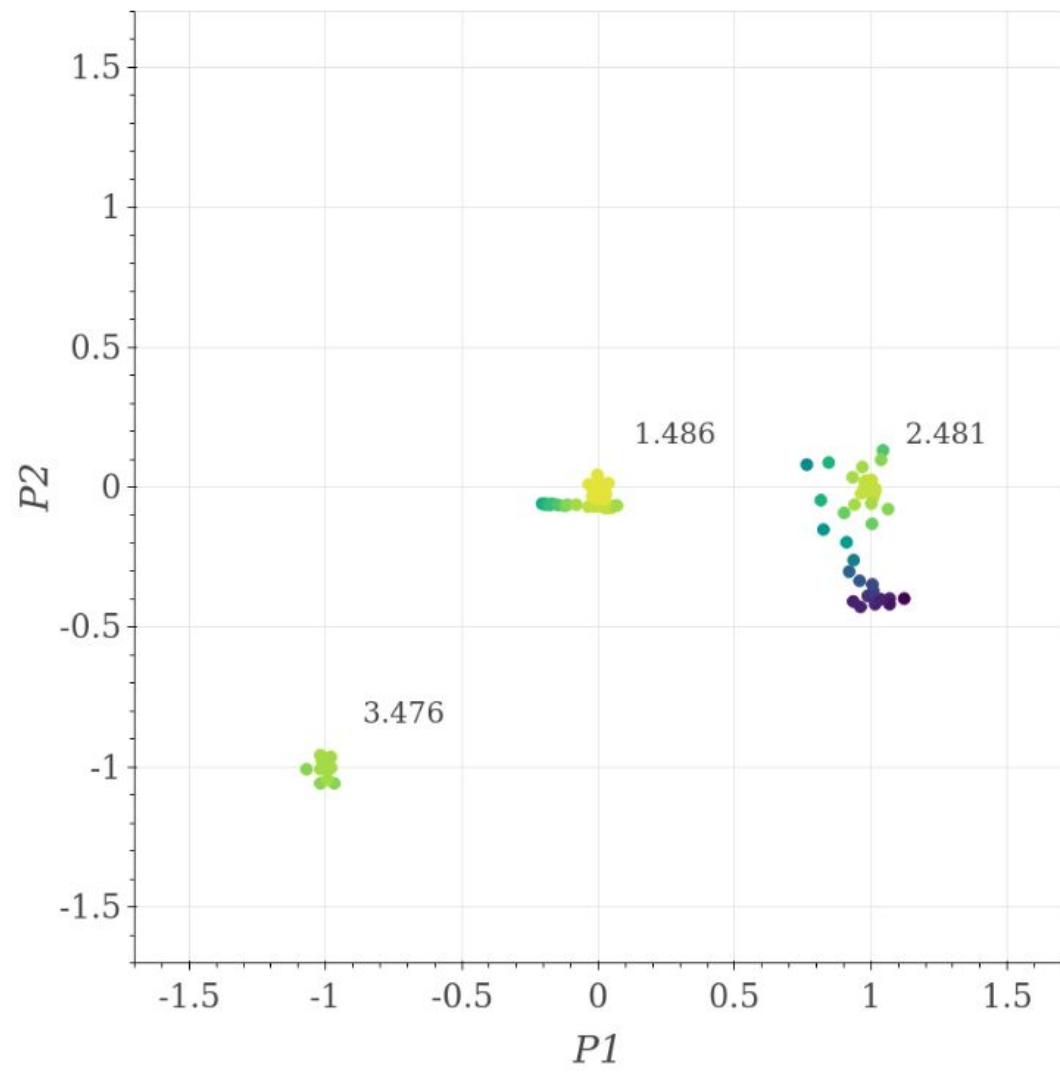
















Zamyšlení na závěr

$$t = n_i * t_i$$

Čas optimalizace = počet iterací * čas jedné iterace

Počet iterací ovlivňuje

- Globální & Lokální optimalizace
- Komplexnost (dimenzionalita) problému

	Lokální optimalizace	Globální optimalizace
Krátký čas jedné iterace	 An anime-style illustration of a young woman with long blue hair, wearing a light purple high-collared shirt. She has her eyes closed and a wide, open-mouthed laugh, with red blush marks on her cheeks. The background is a warm, brownish-orange gradient.	 An anime-style illustration of the same young woman with long blue hair and a light purple shirt. She has a surprised or excited expression, with wide-open eyes and a small open mouth. The background is a dark blue gradient.
Dlouhý čas jedné iterace	 An anime-style illustration of the same young woman with long blue hair and a light purple shirt. She has a gentle, closed-mouth smile, with her eyes slightly closed and red blush marks on her cheeks. The background is a warm, brownish-orange gradient.	 An anime-style illustration of the same young woman with long blue hair and a light purple shirt. She has a thoughtful or slightly sad expression, with wide-open eyes and a small, downturned mouth. The background is a dark blue gradient.