

Optimalizace

Ondřej Schindler



Obsah

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

Co nás dneska čeká?

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

Optimalizovatelný problém

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)

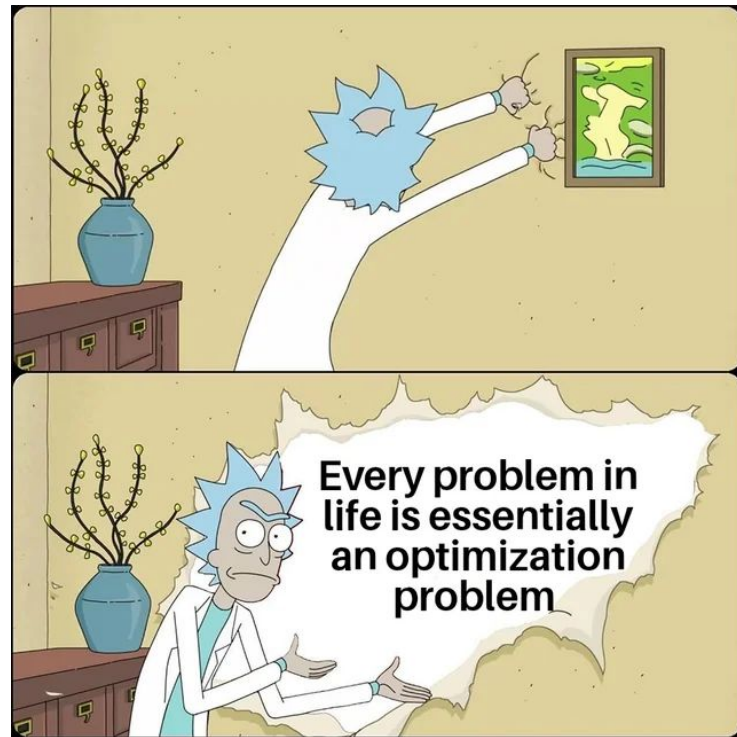
“Náš svět je nejlepší ze všech možných světů, a proto lze jeho zákony vyjádřit extrémálními principy.” (Leibnitz)

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 květinu 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, kriteriální funkce, nákladová funkce...

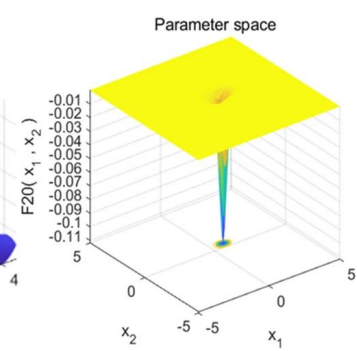
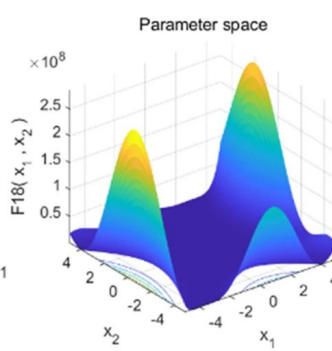
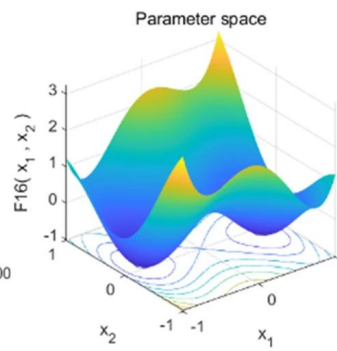
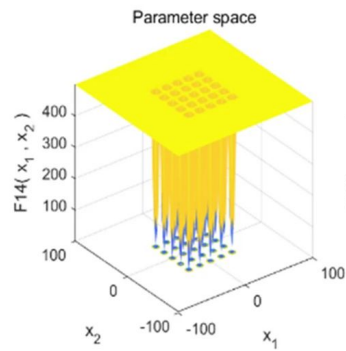
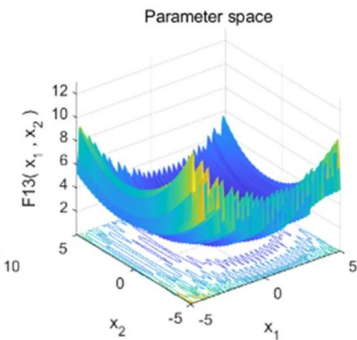
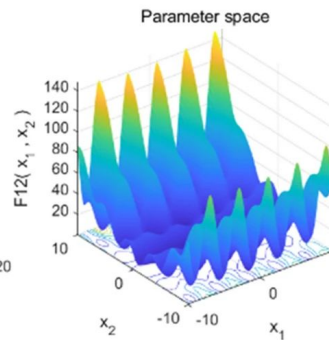
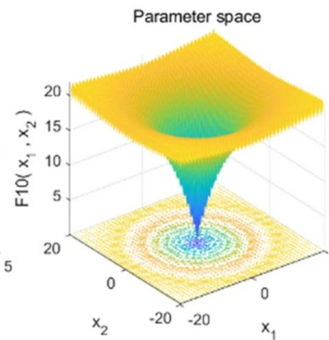
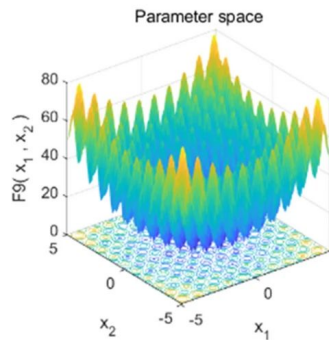
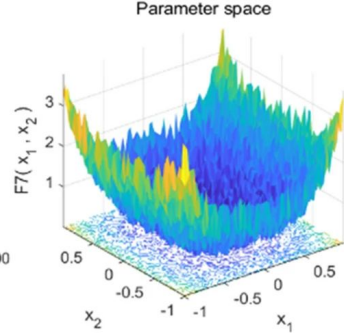
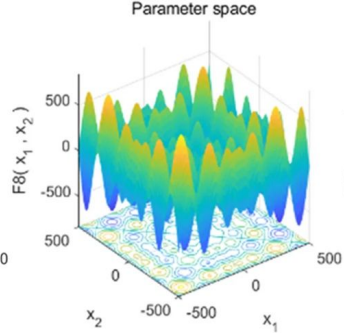
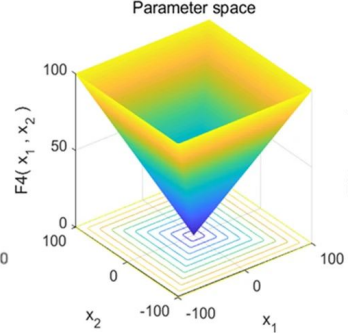
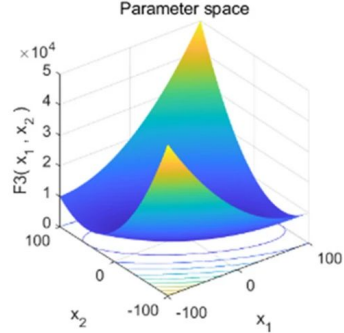
Tvar objektivní funkce

- 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)

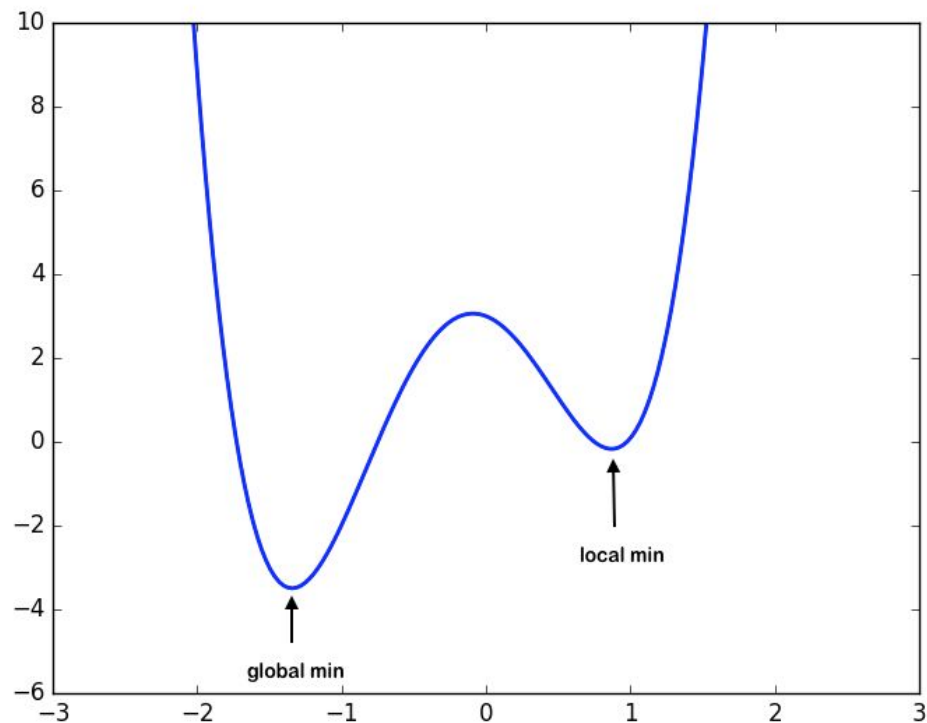


Co nás dneska čeká?

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

Optimalizace

Hledání extrémů objektivní funkce.

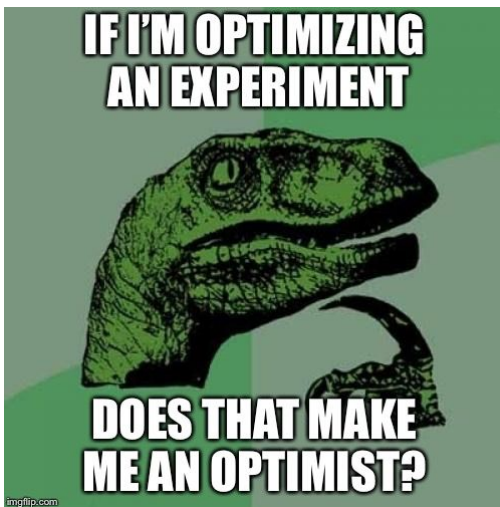
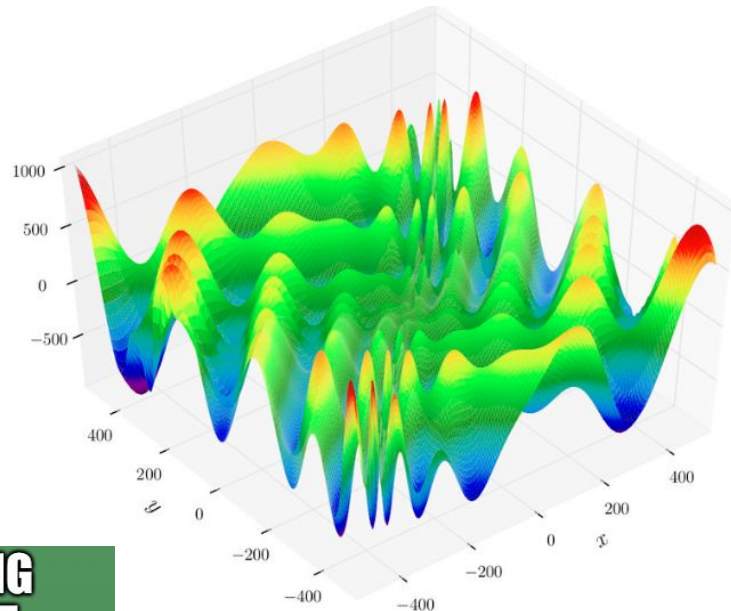


Co je náročného na optimalizaci?

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

Proč optimalizovat matematicky?

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



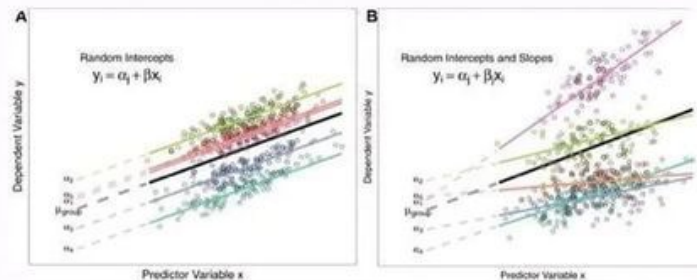
Optimalizace v bioinformatice

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

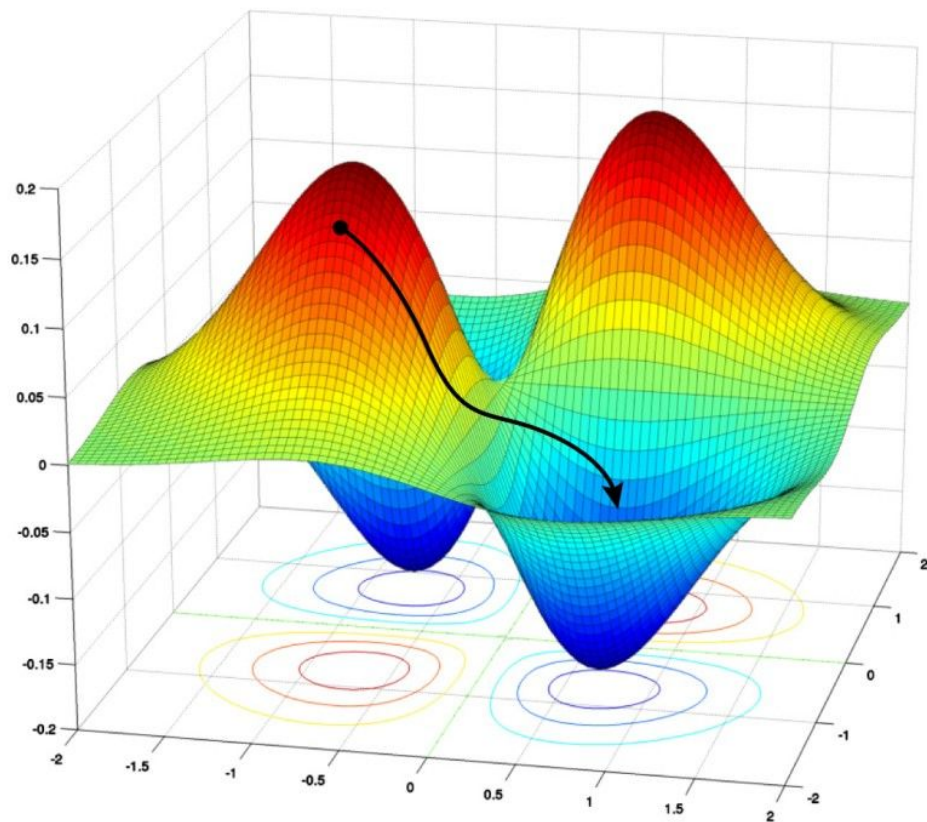
The modelling you know as a child



The modelling you know as an adult

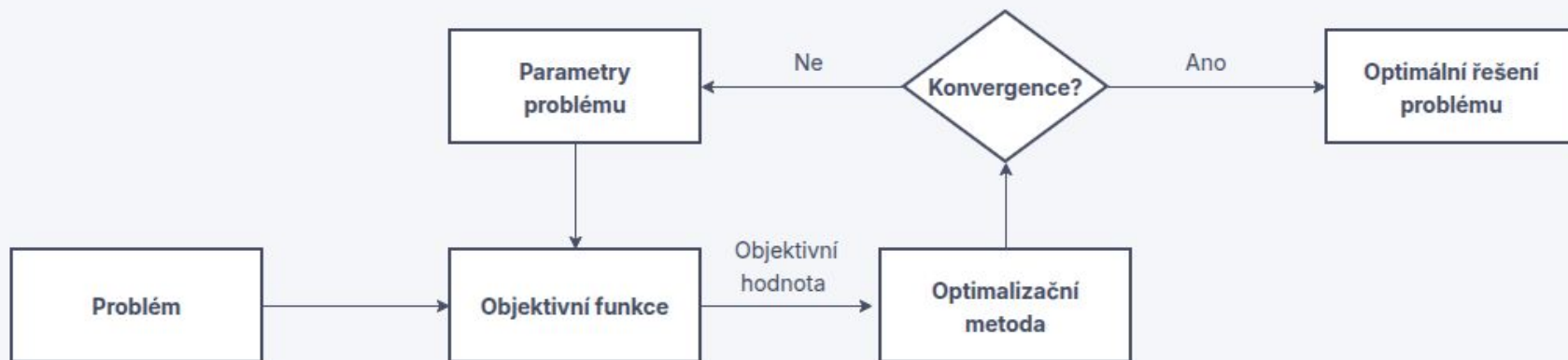


Optimalizace



Optimalizace

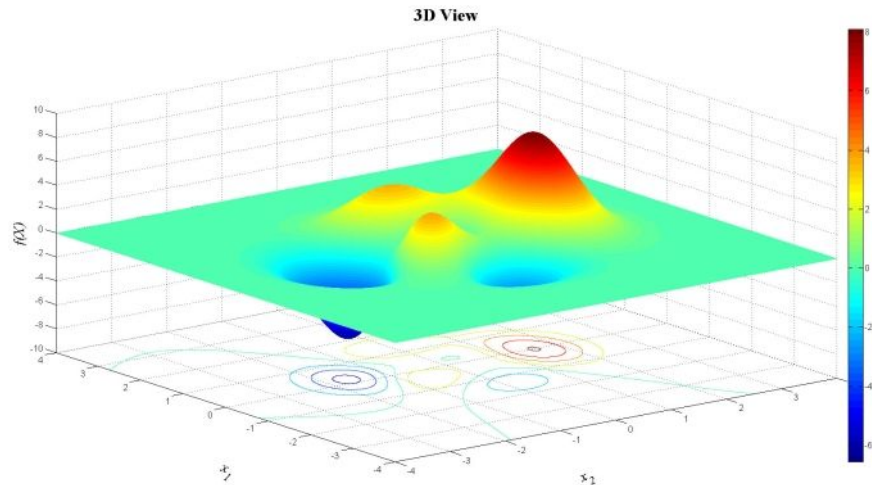
Iterativní hledání extrémů objektivní funkce.



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!

Lokální optimalizace & Globální optimalizace

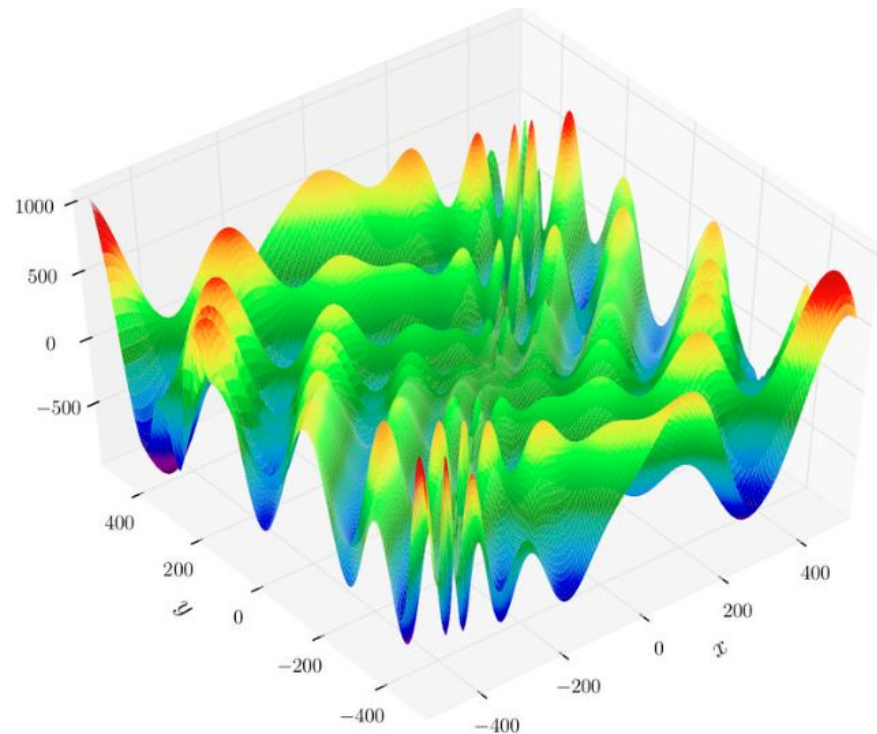
Lokální optimalizace postupuje po hyperploše objektivní funkce “z kopce” dokud nezkonverguje.

Globální optimalizace

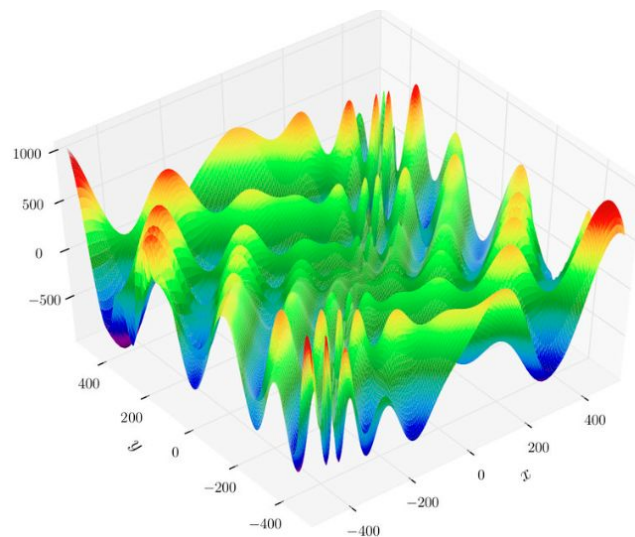
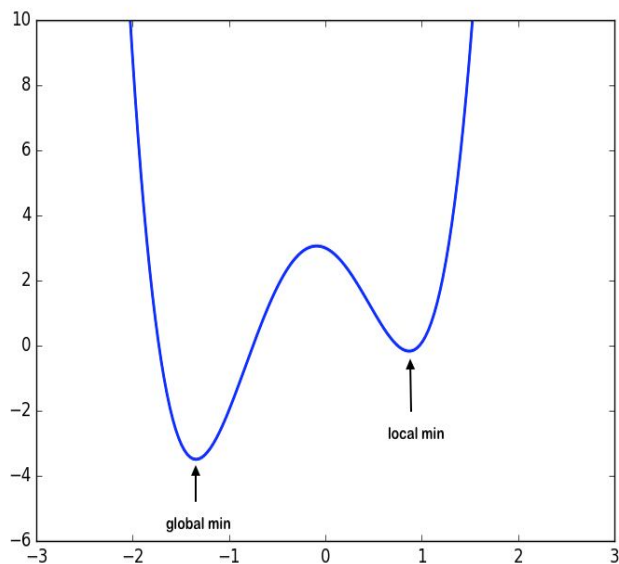
lokální

s omezením, bez omezení

s derivacemi bez derivací



Optimalizace	Lokální	Globální
Cíl optimalizace	Lokální minimum	Globální minimum
Jistota nalezení	Ano	Ne
Rychlost	Rychlá	Pomalá
Vstup	Sada parametrů	Omezený prostor



Simplexová metoda

Optimalizační metody

lokální # globální

tabulka?

lokální

s omezením, bez omezení

s derivacemi bez derivací

Korelační graf - statistika

ohraničení, derivace atd... výpočetní náročnost

kostra

problém, prostor a dimensionality problému, objektivní funkce,

optimalizace, lokální globální, s omezením, derivace

ukázky metod

optGM

tips # tricks, $t = i * t(i)$

cvičení

jak se optimalizace chová na rosebrokovi?

optmalizace proteinu

eem?