

Optimalizace

KI/OPT?

RNDr. Petr Kubera, Ph.D.



Ústí nad Labem 2020

Kurz: Optimalizace

Obor: Aplikovaná informatika (nmgr)

Klíčová slova: optimalizace, minimum, maximum

Anotace: Kurz je zaměřen na poskytnutí přehledu o vybraných optimalizačních strategiích se zaměřením na spojitou optimalizaci a metody strojového učení. Jsou akcentovány metody které jsou využívány v oblastech učení neuronových sítí. Student je seznámen nejen s principem metod, ale je věnována pozornost možnostem implementace a využití již existujících knihoven.

Jazyková korektura nebyla provedena, za jazykovou stránku odpovídá autor.

© Katedra informatiky, PřF, UJEP v Ústí nad Labem, 2020

Autor: RNDr. Petr Kubera, Ph.D.

Obsah

Úvodní slovo	4
1 Formulace úloh optimalizace	6
2 Možnosti výpočtu derivací a gradientů a jejich aplikace	8
3 Hledání minima v 1D	10
4 Metody prvního řádu - minimalizace	12
5 Metody druhého řádu	14
6 Metoda nejmenších čtverců	16
7 Metody minimalizace bez výpočtu derivace	18
8 Principy stochastických a populačních metod	20
9 Úlohy s omezeními	22
10 Kvadratické programování	23

Úvodní slovo

Předmět je koncipován jako přehledový kurz v oblasti Optimalizace. Předmět volně navazuje na předměty z bakalářského studia *Optimální rozhodování* a *Numerické metody*. Jedním z jeho cílů je poskytnout pochopení metod v pozadí strojového učení a neuronových sítí, konkrétně, jak jsou sítě učeny.

Problematika optimalizace je poměrně široká, zahrnuje od “pouhého” hledání extrému funkce při nějakých omezujících podmínkách (*vazbách*) po hledání optimálních strategií (míra zisku, rizika) nákupu např. při obchodování na burze. V tomto textu nás bude zajímat výhradně tzv. jednokriteriální optimalizace, kdy je daný proces hodnocen pouze dle jedné účelové (kriteriální) funkce. Cílem je získat nejen obecné pochopení metod, ale znát i principy jejich implementace a hlavně schopnost využívat softwarové balíky. Vše proto budeme dělat za použití volně dostupných nástrojů a frameworků v Pythonu.

Splnění kurzu

Zápočet je možné získat za vypracovanou seminární práci, která obsahuje jak teoretickou část, tedy rozbor problému a popis použitých metod, tak i vlastní praktickou část, tedy implementace a použití daných nástrojů. Zkouška se skládá z diskuse na vytvořenou aplikaci (30%) a ověření teoretických znalostí (70%).

Zde naleznete několik témat pro motivaci k Vaším seminárním pracím

Ukázky možných témat seminárních prací

1. Použití kvadratického programování pro tvorbu portfolia - Markowitzův model
2. Implementace a porovnání učení jednoduchého MLP pomocí metod prvního řádu
3. Porovnání metod pro hledání minima Rosenbrockovy funkce
4. Aplikace populačních metod

1 Formulace úloh optimalizace

Cílem této kapitoly je získat přehled o některých typických úlohách optimalizace.



CÍLE KAPITOLY

- Problematika volných a vázaných extrémů
- Jedno a vícekritériální optimalizace - příklady úloh
- Spojitá a diskrétní optimalizace - příklady úloh (problém batohu, problém čínského listonoše, problém obchodního cestujícího)
- Pojem konvexnosti a konvexní optimalizace
- Lineární programování - formulace, typická úloha
- Kvadratické programování - formulace, typická úloha



KLÍČOVÁ SLOVA

extrém, konvexní optimalizace



ÚKOLY

1. Formulujte vybranou úlohu LP a seznamte se s možností jejího řešení pomocí SW. balíků v Pythonu, např. PULP.
2. Formulujte vybranou úlohu kvadratického programování a seznamte se s možnostmi jejího řešení v SW. balíku CVXOPT.
3. Napište program na řešení tzv. 0/1 problému batohu pomocí dynamického programování.
4. Popište úlohu učení dopředné jednovrstvé neuronové sítě se sigmoidální funkcí jako optimalizační problém.



OTÁZKY

1. Definujte pojem konvexní optimalizace.
2. Formulujte úlohu obchodního cestujícího jako úlohu lineárního programování.

2 Možnosti výpočtu derivací a gradientů a jejich aplikace

Cílem této kapitoly je získat přehled o matematickém pozadí úloh spojité optimalizace. Budeme vycházet z problematiky hledání extrémů funkce více proměnných. Klíčové jsou pro nás pojmy derivace, parciální derivace, gradient, Hessova matice. Dále se též zaměříme na jejich výpočet a aplikace na hledání extrémů. Jako poslední si projdeme moderní způsoby výpočtu derivací pro optimalizační algoritmy strojového učení. Zde se jedná o tzv. *automatickou diferenciaci*.



CÍLE KAPITOLY

- Pojem derivace a jeho rozšíření. Prostudujte si celou kapitolu 8.
- Využití derivace v optimalizaci, podmínky lokálních extrémů. Prostudujte si kapitolu 9.2.
- Výpočet symbolických derivací pomocí sw. balíku (SymPy), v Pythonu zde.
- Numerický výpočet derivace zde.
- Automatická diferenciaci - přehled, co to vlastně je, je k nalezení zde. Dále viz úkoly.



KLÍČOVÁ SLOVA

derivace, gradient, hessova matice, podmínky prvního a druhého řádu.



ÚKOLY

1. Seznamte se s balíkem SymPy se zaměřením na výpočet derivace.
2. Seznamte se s balíkem Scipy se zaměřením na optimalizaci zde.
3. Řešte příklady z cvičení 9.6 (příklady 9.1-9.5).
4. Vyzkoušejte (naprogramujte) různé vzorce pro numerickou derivaci pro výpočet funkce $f(x) = \sin(\pi x)$, zkoumejte vliv kroku h na řešení.
5. Seznamte se s knihovnou pro automatickou diferenciaci *Autograd* - pouze základní principy zde (k čemu to je a jak to zhruba funguje).

3 Hledání minima v 1D

Cílem této kapitoly je získat přehled o využití metod pro hledání minimalizace v 1D. Zaměřujeme se zde na metody nederivační, tedy metody kde není potřeba počítat derivaci. Důvod proč se těmto metodám věnujeme, je mimo jiné ten, že tyto algoritmy se používají jako dílčí optimalizační postupy ve vícerozměrném hledání extrémů.



CÍLE KAPITOLY

- Hledání extrému funkce více proměnných ve směru (linesearch)
- Metoda bisekce
- Metoda zlatého řezu
- Fibonacciova metoda



KLÍČOVÁ SLOVA

unimodálnost, zlatý řez, linesearch



ÚKOLY

1. Implementujte všechny výše uvedené metody v Pythonu. Vstupem je vždy minimalizovaná funkce, interval, kde se hledá extrém a případné parametry algoritmu. Předpokládejte, že je splněna podmínka unimodálnosti funkce.
2. V balíku Scipy se seznámte s metodou pro 1D minimalizaci zde. Porovnejte na zvolené funkci s Vaší implementací, viz úkol výše.



OTÁZKY

1. Co značí unimodálnost funkce a proč je důležitá ?
2. Jak souvisí hledání extrému funkce ve směru s výše uvedenými metodami ?
3. Diskutujte konvergenci uvedených metod ?

4 Metody prvního řádu - minimalizace

Tato kapitola shrnuje body 4 a 5 v sylabu. Metody zde uváděné řadíme od jednodušších (starších) k novějším, implementovaným v balících pro strojové učení. Lze říci, že v uváděném pořadí vždy naásledující vylepšuje předchozí. Zaměřte se nejprve vždy na pochopení funkce (proč to minimalizuje) a základní rozdíly mezi nimi. Poté se teprve věnujte náročnějším matematickým detailům, např. rychlosti, případně podmínkám konvergence.



CÍLE KAPITOLY

- gradientní metoda, popis kapitola 4
- metoda konjugovaných gradientů, popis kapitola 5
- Přidání setrvačnosti a Nesterova metoda, popis obou principů je zde.
- metody Adagrad, RMSProp, Adam (spíše orientačně). Popis těchto algoritmů a různá vylepšení výše uvedených metod, pro použití v oblastech strojového učení, naleznete zde.



KLÍČOVÁ SLOVA

gradientní metoda, metoda konjugovaných gradientů, Nesterova metoda, metody Adagrad, RMSProp, Adam



ÚKOLY

1. Implementujte gradientní metodu a metodu sdružených gradientů, porovnejte rychlost jejich konvergence k optimu.
2. Pokuste se implementovat učení dopředné jednovrstvé neuronové sítě se sigmoidální funkcí pomocí některé z výše uvedených metod. Např. pro úlohu regrese funkce. Trénovací a testovací množinu si nagenertejte, zvolte např funkci $f(x) = \sin(\pi x)$.
3. Seznamte se s modifikacemi gradientních metod - *stochastic gradient method* a *minibatch stochastic gradient descent*.
4. Projděte a splňte některé z úloh zde, v kapitole 4.

5 Metody druhého řádu

Cílem této kapitoly je získat přehled o Newtonově metodě a jejích vylepšeních. Newtonova metoda má rychlejší konvergenci, daní za to ovšem jsou další přidané požadavky na chování optimalizované funkce. Newtonova metoda používá ve svém algoritmu opakované řešení soustavy lineárních rovnic, kde matice soustavy je Hessova matice. Nutnost vyčíslovat tuto matici a její inverzi vede k tzv. *kvazinevtonovským* metodám, kde je tato Hessova matice vhodně aproximována.



CÍLE KAPITOLY

- Newtonova metoda
- Kvazinevtonovské metody - BFGS



KLÍČOVÁ SLOVA

Newtonova metoda, BFGS, Hessova matice



ÚKOLY

1. Implementujte Newtonovu metodu pro funkci $f(x, y) = (x - 1)^4 + 10(y - 1)^2$.
2. Implementujte metodu BFGS pro výše uvedenou úlohu.
3. Porovnejte rychlost konvergence (počet kroků) Newtonovy metody a některé z implementovaných metod v předchozí kapitole.
4. Projděte a splňte některé z úloh zde v kapitole 6 a 8.



OTÁZKY

1. Vysvětlete princip Newtonovy metody.
2. Jaké jsou její nevýhody ?
3. V čem ji metoda BFGS vylepšuje ?



SHRNUTÍ

Po prostudování byste měli být schopni:

- Chápat princip uvedených metod.
- V principu implementovat dané metody.
- Nyní už i rozumět významu parametrů v balíku Scipy pro řešení optimalizačních úloh zde.



ODKAZY NA LITERATURU

- DOSTÁL, Zdeněk, BEREMLIJSKI, Petr, Metody Optimalizace [online], zde. Zejména kapitola 6 a 8.
- WERNER, Tomáš. Optimalizace [online]. Katedra kybernetiky, Fakulta elektrotechnická, ČVUT, 2020 [cit. 2020-02-25]. Dostupné zde. Zejména kapitola 9.

6 Metoda nejmenších čtverců

Metoda nejmenších čtverců je poměrně široký pojem. MNČ se např. používá pro regresi dané funkce pomocí vysvětlujících proměnných. Nejjednodušší úloha je samozřejmě proložení dané množiny bodů pomocí vhodného typu křivky. Pokud se použije funkce, která je lineární kombinací básových funkcí, mluvíme o tzv. *lineární MNČ*, pokud se zvolí jinak, obecně nelineární, tak mluvíme o *nelineární MNČ*. Klíčové je, že cílem výše uvedené úlohy je minimalizovat chybu proložení křivkou a to vede na soustavu rovnic, která je buď lineární, nebo nelineární. Podobně v lineární algebře můžeme řešit soustavu rovnic $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$, která nemá řešení (např. nesplňuje podmínky Frobeniovy věty) a naším cílem je minimalizovat normu (čtverec) rezidua $\mathbf{r} = \mathbf{b} - A\mathbf{x}$. Případně minimalizovat kvadrát rezidua obecné nelineární rovnice.

Pro některé funkce existují samozřejmě transformace pro převod nelineárních úloh na lineární. Pro řešení daných úloh je možné samozřejmě použít i Newtonovu metodu. Ale často je výhodné použít metody speciální.



CÍLE KAPITOLY

- Aproximace pomocí MNČ k nalezení např. zde v kapitole 6.
- Gaussova-Newtonova metoda
- Levenbergova-Marquardtova metoda



KLÍČOVÁ SLOVA

metoda nejmenších čtverců, Gaussova-Newtonova metoda, Levenbergova-Marquardtova metoda



ÚKOLY

1. Implementujte program, který umožní proložení bodů polynomem zadaného stupně. Vstupem jsou body a řád použitého polynomu.
2. Implementujte a otestujte výše uvedené metody pro nelineární MNČ.
3. Prostudujte si použití nelineární MNČ v balíku Scipy zde.
4. Prostudujte si použití lineární regrese v balíku Scipy zde.
5. Prostudujte si použití lineární regrese v balíku *scikit-learn* zde.

7 Metody minimalizace bez výpočtu derivace

V některých praktických úlohách bývá obtížné zajistit “pěkné” vlastnosti funkce a jejich derivací. Případně může být obtížné, nebo nepraktické, derivaci počítat, např. nemáme funkční předpis, ale *black-box* zařízení a potřebujeme nastavit jeho parametry pro optimální chod. Musíme tedy vycházet z pouhého vyhodnocení minimalizované funkce. Použití např. vzorkování je ve vyšší dimenzi nevýhodné (až výpočetně nemožné), je tedy použít nějakou lepší strategii prohledávání prostoru. Další tzv. *derivative-free* metody jsou diskutovány v následující kapitole.



CÍLE KAPITOLY

- Prohledávání souřadnic (linesearch ve více dimensích), najdete např. zde, kapitola 10.6.
- Powelova metoda, najdete např. zde, kapitola 10.7.
- Pattern-search (Hookov-Jeevesova metoda), najdete např. zde.
- Nelderova-Meadova metoda, najdete např. zde.



KLÍČOVÁ SLOVA

derivative-free metody, pattern-search, simplex



ÚKOLY

1. Implementujte výše uvedené metody (alespoň 2) a vizualizujte jejich běh ve 2D na Rosenbrockově funkci zde. Diskutujte chování jednotlivých metod.
2. Porovnejte chování Vaší implementace na dané funkci s optimalizačním balíkem v Scipy.



OTÁZKY

1. Popište princip uvedených metod, v čem se jednotlivé metody liší ?
2. Co to je simplex ?



SHRNUTÍ

Po prostudování byste měli být schopni:

- Chápat princip uvedených metod.
- V principu implementovat dané metody.



ODKAZY NA LITERATURU

- DOSTÁL, Zdeněk, BEREMLIJSKI, Petr, Metody Optimalizace [online], zde. Zejména kapitola 16..
- PRESS, William H. Numerical recipes: the art of scientific computing. 3rd ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2007. ISBN 978-0-521-88407-5. [online] zde

8 Principy stochastických a populačních metod

Tato kapitola odpovídá bodům 9-10 ze sylabu předmětu. Jedná se o tzv. moderní a v současnosti stále zkoumané metody.

V případě metod uvedených v předešlé kapitole byl stavový prostor prohledáván pomocí přesně daného algoritmu, stochastické metody vnášejí do prohledávání jistý prvek náhodnosti. Tato náhodnost je důležitá v tom, že když hledáme globální extrém, tak metody mohou uváznout v lokálním extrému. Náhodnost se používá v tom, že s jistou nenulovou pravděpodobností se opuštěný lokální extrém opouští a pokračuje se dále. Příkladem takovéto metody je *simulované žihání*.

Dalším typem metod jsou populační algoritmy, jedná se o širokou třídu algoritmů (meta-algoritmů) inspirovaných přírodou, kde místo jednoho zkoumaného bodu se jich zkoumá více, tzv. *populace*. Příkladem takových metod jsou *Swarm particles metody* (particle swarm optimization - SPO), *Firefly metoda*, *Cockoo search*, nebo *genetické algoritmy*, které už znáte z jiného kurzu. Základem těchto metod je to, že pro update pozice dané částice (nebo jiné entity) používají informace získané celou populací.



CÍLE KAPITOLY

Cílem je získat základní přehled o daných metodách

- Stochastické metody - Simulované žihání, např. [zde](#) [zde](#), kapitola 10.9.
- Swarm particles metody - základní popis naleznete např. [zde](#), či [zde](#) [zde](#).
- Firefly metoda - popis algoritmu od autora je [zde](#), případně [zde](#).
- Cockoo search - popis algoritmu od autora je uveden [zde](#).



KLÍČOVÁ SLOVA

simulované žihání, Metropolisovo kritérium, SPO metody



ÚKOLY

1. Implementujte v Pythonu výše uvedený algoritmus simulovaného žihání pro řešení problému obchodního cestujícího, motivujte se např. [zde](#).
2. Seznamte se s balíkem *PySwarms* pro SPO v Pythonu [zde](#). Projděte si uvedené tutoriály.



OTÁZKY K ZAMYŠLENÍ

1. V čem spočívá stochastičnost simulovaného žihání?



SHRNUTÍ

Po prostudování byste měli být schopni:

- Chápat princip uvedených metod, vliv jejich parametrů.
- Popsat implementaci na úrovni pseudokódu.



ODKAZY NA LITERATURU

Poslední uvedený zdroj není volně dostupný online, nicméně popisuje všechny zde uvedené metody, včetně implementace v Julii a je to nejlepší co jsem k danému tématu našel.

- DONGSHU, Wang, DAPEI, Tan, LET Liu, Particle swarm optimization algorithm: an overview [online], zde.
- YANG, Xin-She, HE, Xingshi, Firefly Algorithm Recent Advances and Applications, [online] zde.
- PRESS, William H. Numerical recipes: the art of scientific computing. 3rd ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2007. ISBN 978-0-521-88407-5. [online] zde
- KOCHENDERFER, Mykel J. a Tim A. WHEELER. Algorithms for optimization. Cambridge, Massachusetts: The MIT Press, [2019]. ISBN 978-0262039420.

9 Úlohy s omezeními

Tato kapitola odpovídá bodům 11-12 sylabu předmětu. Cílem je seznámit se s matematickým aparátem a metodami, které můžete použít pro úlohy s vazbami. Jedná se buď o Lagrangeovu metodu, nebo metody *bariérového*, *penaltového* typu. Je nutné rozlišovat, zda se jedná o omezení ve tvaru rovností, či nerovností. Poznamenejme, že Lagrangeovu metodu pro úlohu s rovnostmi byste již měli umět z kurzu matematiky.



CÍLE KAPITOLY

- Podmínky minima pro úlohu s vazbou ve tvaru $=$ (KKT = podmínky) a Lagrangeova metoda, viz , kapitola 10. , nebo zde, kapitola 9.
- Další metody pro úlohy s omezením ve tvaru $=$, viz zde, kapitola 10.
- Podmínky minima pro úlohu s nerovnostmi (KKT podmínky), viz zde, kapitola 11.
- Bariérové a penaltové metody pro úlohy s nerovnostmi, viz zde, kapitola 12.



KLÍČOVÁ SLOVA

Lagrangeovy multiplikátory, KKT podmínky



ÚKOLY

1. Řešte úlohy v kapitolách 10 a 12 zde.



SHRNUTÍ

Po prostudování byste měli být schopni:

- Řešit úlohy spojitě minimalizace s omezeními za použití daných metod.
- Vysvětlit základní principy metod.
- Znat matematické pozadí daných metod.



ODKAZY NA LITERATURU

- DOSTÁL, Zdeněk, BEREMLIJSKI, Petr, Metody Optimalizace [online], zde. Zejména kapitoly 9-12.
- WERNER, Tomáš. Optimalizace [online]. Katedra kybernetiky, Fakulta elektrotechnická, ČVUT, 2020 [cit. 2020-02-25]. Dostupné zde, zejména kapitola 10.

10 Kvadratické programování

Zde se zaměříme kvadratické programování (QP), matematický aparát a dualitu v kvadratickém programování. Jako praktickou aplikaci kvadratického programování si ukážeme metodu SVM (*support vector machine*). Další aplikací kvadratického programování je tzv. Markowitzův model optimalizace portfolia, viz zde.



CÍLE KAPITOLY

- Formulace úlohy kvadratického programování, zde, kapitola 16 (celá)
- Dualita v kvadratickém programování, zde, kapitola 13.
- Nástroje pro kvadratické programování - balík CVXOPT (je zaměřen na konvexní programování) zde.
- Metoda SVM jako model kvadratického programování, zde.



KLÍČOVÁ SLOVA

kvadratické programování, aplikace QP



ÚKOLY

1. Projděte si tutoriál CVXOP zaměřený na QP.
2. Seznamte s implementací SVM pomocí CVXOPT na ukázkovém příkladě zde
3. Pomocí CVXOPT řešte výše uvedený Markowitzův model zde.



OTÁZKY

1. Jaký je rozdíl mezi LP a QP ?
2. Popište primární a duální formulaci SVM.
3. Co je jádrová transformace u SVM ?

Literatura

- [1] BOYD, Stephen P. a Lieven VANDENBERGHE. Convex optimization. New York: Cambridge University Press, 2004. ISBN 0521833787. Dostupné zde.
- [2] DOSTÁL, Zdeněk, BEREMLIJSKI, Petr, Metody Optimalizace [online], zde.
- [3] KOCHENDERFER, Mykel J. a Tim A. WHEELER. Algorithms for optimization. Cambridge, Massachusetts: The MIT Press, [2019]. ISBN 978-0262039420.
- [4] WERNER, Tomáš. Optimalizace [online]. Katedra kybernetiky, Fakulta elektrotechnická, ČVUT, 2020 [cit. 2020-02-25]. Dostupné zde.
- [5] ZHANG Aston, LIPTON, Zachary C., LI, Mu, SMOLA, Alexander J., Dive into Deep Learning [online] zde.