Informatyka, studia dzienne, mgr II st.	semestr II
Metody obliczeniowe optymalizacji	**2017/2018**
Prowadzący: mgr inż. Paweł Tarasiuk	wtorek, 14:15

Data oddania: 24.04.2018 Ocena:__________

Daniel Soliwoda 221656

Stanisław Biały 221579

Zadanie 2: Optymalizacja wielowymiarowa bez ograniczeń

1. Teoria

Celem niniejszego zadania jest implementacja i porównanie skuteczności metod optymalizacji wielowymiarowej.

Przydzielony wariant to metoda pełzającego sympleksu Nelder'a-Mead'a.

Metoda ta polega na utworzeniu w przestrzeni E^{n+1} n-wymiarowego simplexu o n+1 wierzchołkach tak, aby można było go wpisać w powierzchnię reprezentującą badaną funkcję celu. Jednowymiarowym simplexem jest odcinek o dwóch wierzchołkach, simplexem dwuwymiarowym jest trójkąt i ogólnie simplexem n-wymiarowym o n+1 wierzchołkach jest zbiór wszystkich punktów określonych przez wektory:

$$x = \sum_{j=1}^{n+1} x_j S_j \quad \text{przy czym} \ \sum_{j=1}^{n+1} x_j = 1 \ \text{oraz} \ x_j \geq 0$$

czyli jest to wielościan o n+1 wierzchołkach rozpiętych na n+1 wektorach bazowych (S_j). Współrzędne punktów simplexu oznaczono jako x_j.

Na początku procedury wylicza się współrzędne punktów wierzchołkowych simplexu P_j (dla j = 1 .. n+1) przy założeniu pewnej odległości między tymi wierzchołkami (czyli kroku). W następnych iteracjach dokonuje się przekształceń simplexu aż odległość pomiędzy jego wierzchołkami w pobliżu poszukiwanego ekstremum będzie mniejsza od założonej dokładności obliczeń e. To właśnie zostało przyjęte jako kryterium zbieżności dla tej metody.

- odbicie punktu P_h względem P'
  $P^* = (1 + a)P' - aP_h$
- ekspansja punktu P** względem P'
  $P^{**} = (1 - c)P^* - cP'$
- kontrakcja punktu P_h względem P'
  $P^{***} = bP_h + (1 - b)P'$

Do generowania sympleksu jest użyty najprostszy algorytm, generujący przekątną macierz:

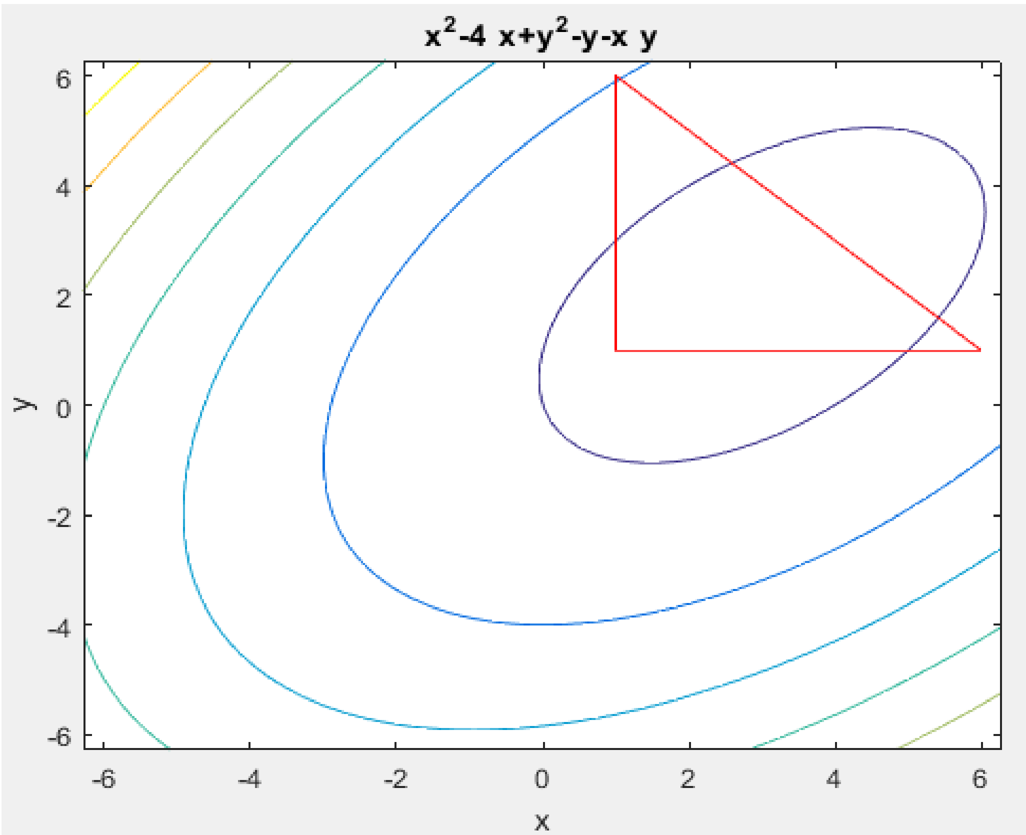
e0 = (1, 0, …, 0),
e1 = (0, 1, …, 0),
…
en = (0, 0, …, 1).

2. Wyniki

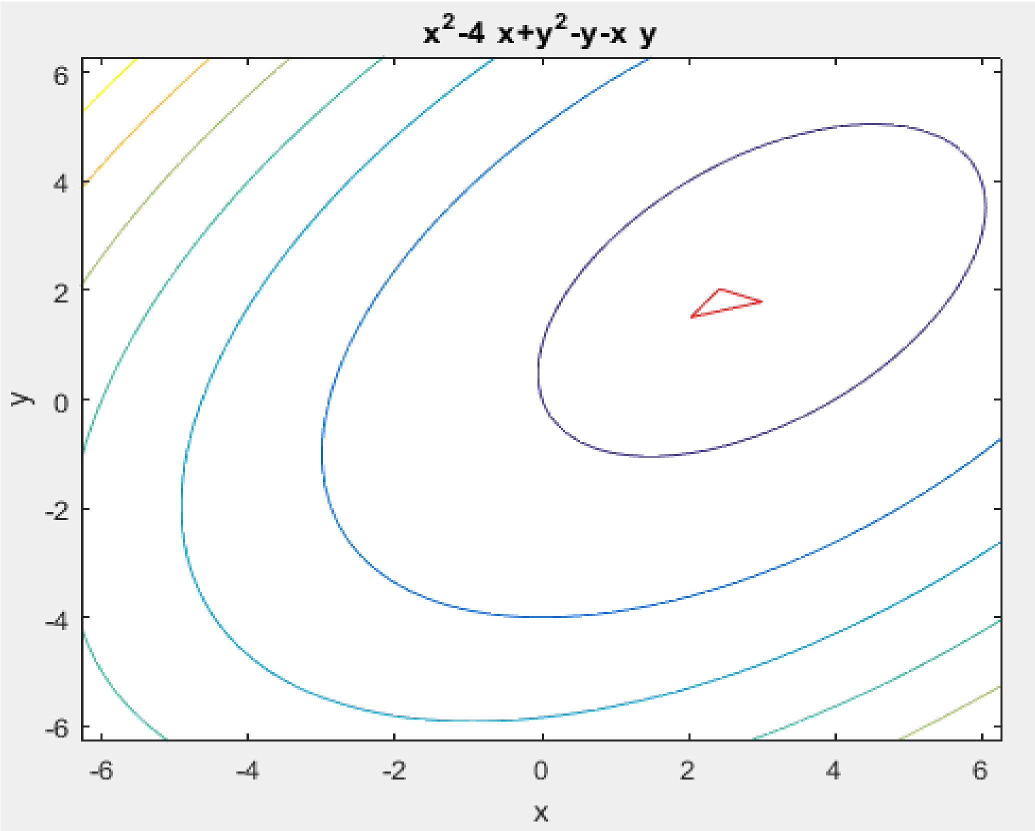
Został stworzony program, do znajdowania minimum funkcji. Dla uzyskania wyniku potrzebujemy wprowadzić analizowaną funkcje $F = x^2 - 4x + y^2 - y - xy$; dla wygenerowania początkowych punktów potrzebujemy wprowadzić punkt początkowy, krok i ilość wymiarów.

Następnie jest generowany początkowy sympleks i w przypadku trzy wymiarowej funkcji jest wyświetlany.

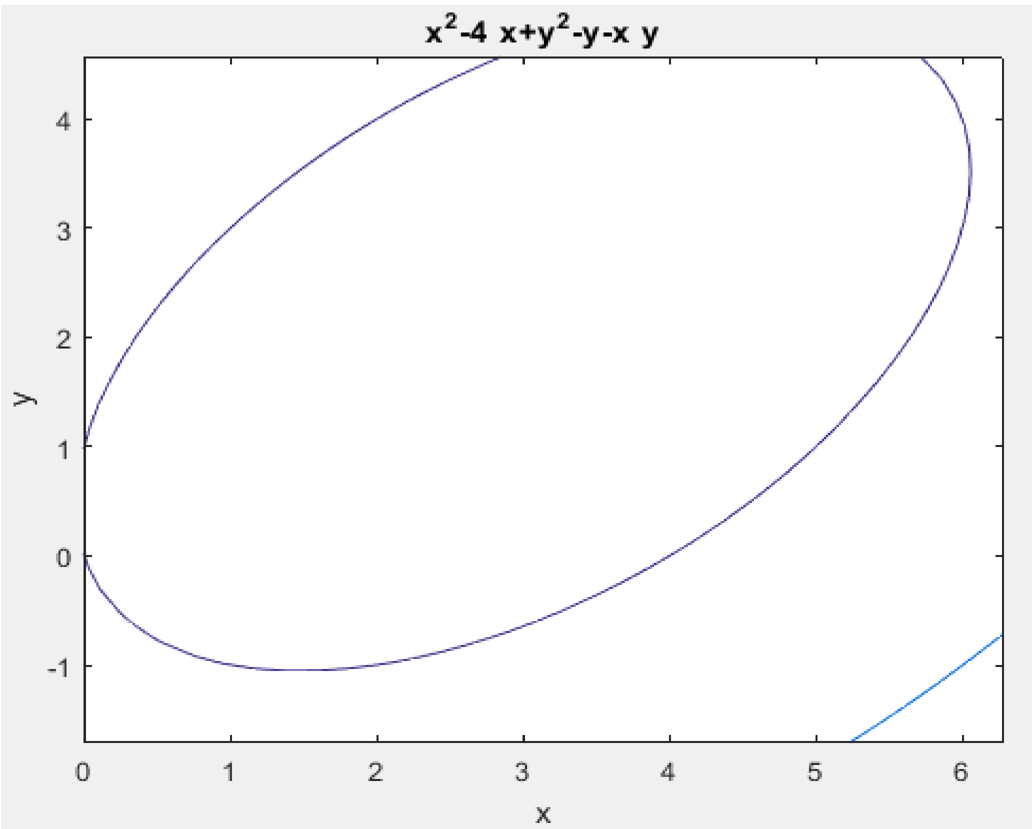
Warunkiem końcowym jest rozmiar sympleksu mniejszy od 0.0000001



Następnie po każdym przejściu pętli jest wizualizowany każdy krok. Przykład sympleksu po 7 iteracjach:



W wyniku dostajemy simpleks końcowy, jest o tyle mały że nie mamy możliwości wyświetlenia:

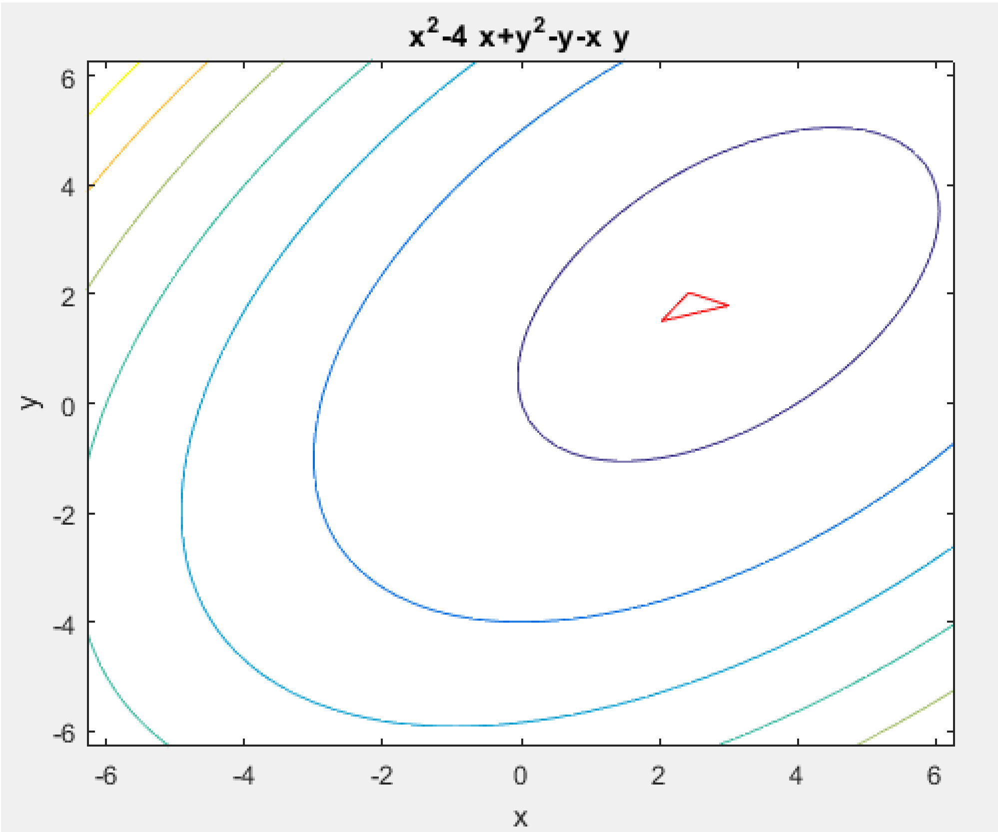


A tak że dostajemy współrzędne minimum [x,y] = [3; 2]
wartość minimum -7
i rozmiar sympleksu 0

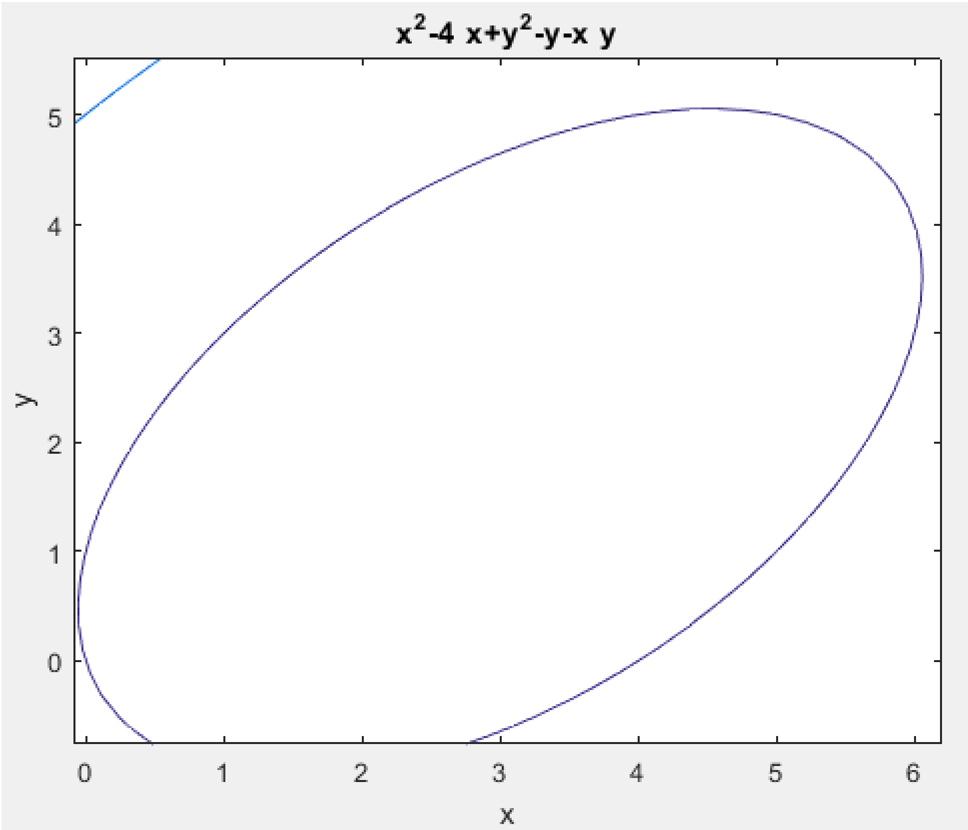
Następnie przebadana została ta sama funkcja, lecz warunkiem końcowym porównywanym z wartością największą i najmniejszą funkcji o 0.0000001

Dane wejściowe jak w poprzednim badaniu.

Przykład sympleksu po 7 iteracjach:

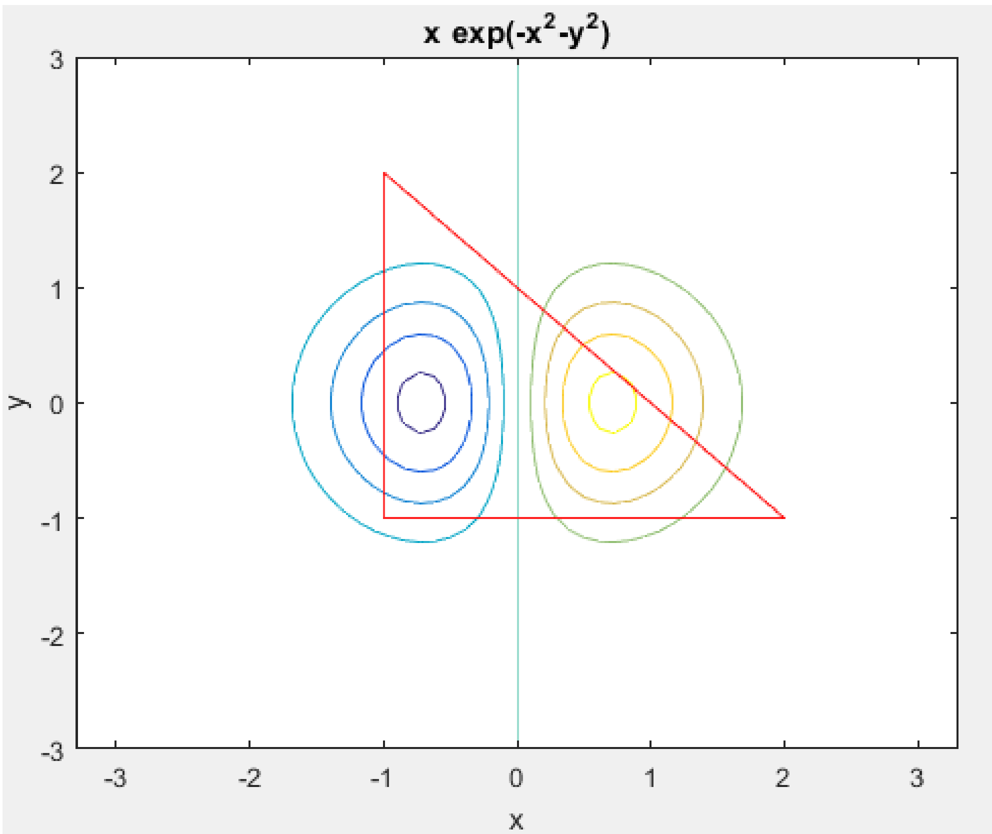


W wyniku dostajemy simpleks końcowy, jest o tyle mały że nie mamy możliwości wyświetlenia:

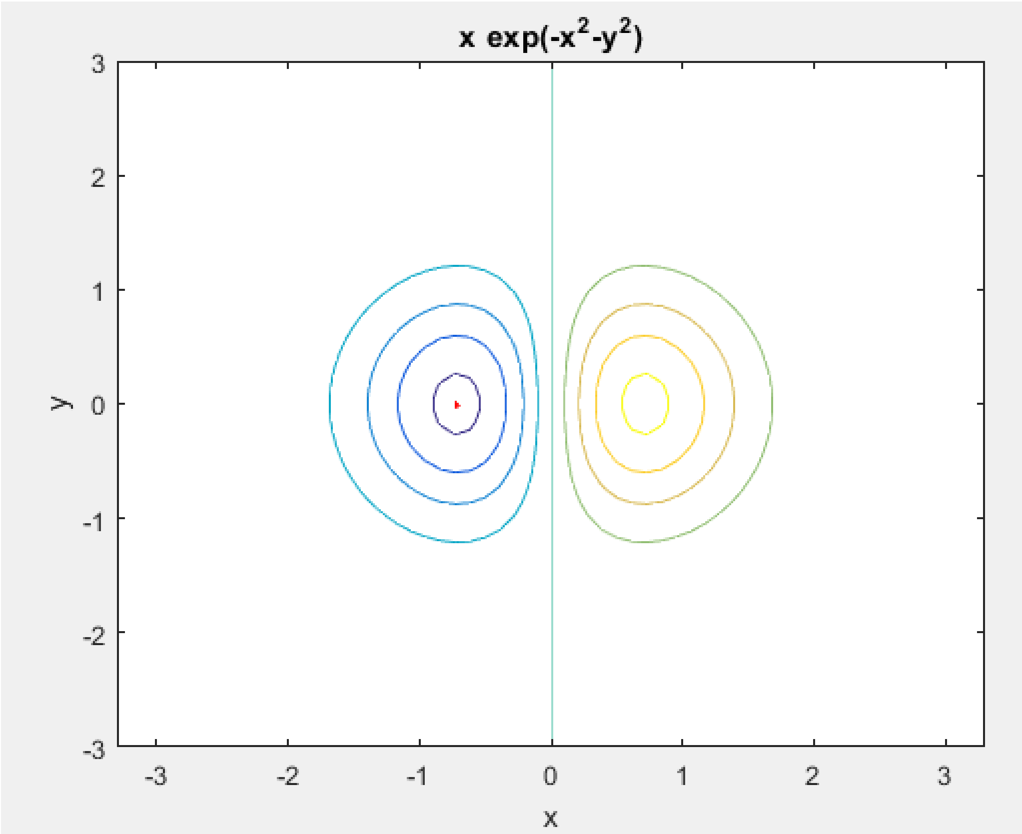


A tak że dostajemy współrzędne minimum [x,y] = [2.9998; 2]
wartość minimum -7
i rozmiar sympleksu 4.2295e-04

Dla następnej badanej funkcji: F = x*exp($-x^2-y^2$);
Początkowy sympleks:

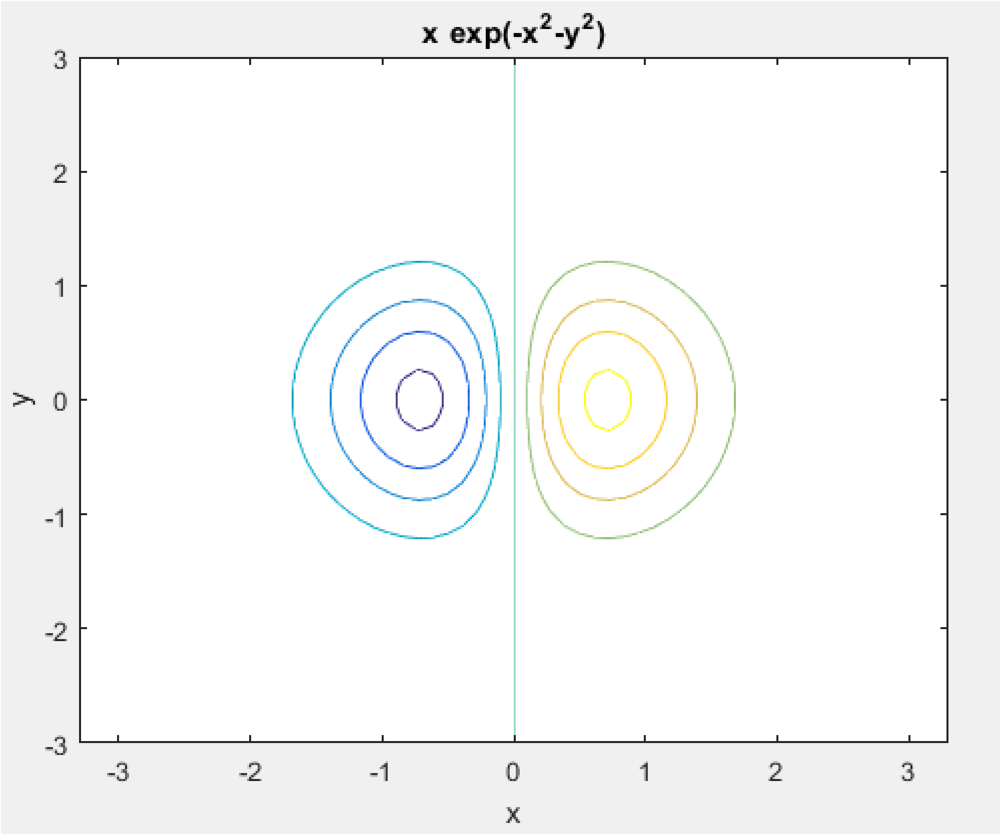


W wyniku dostaniemy sympleks minimum dla warunku końcowego porównywania wysokości wierzchołków o 0.0000001:



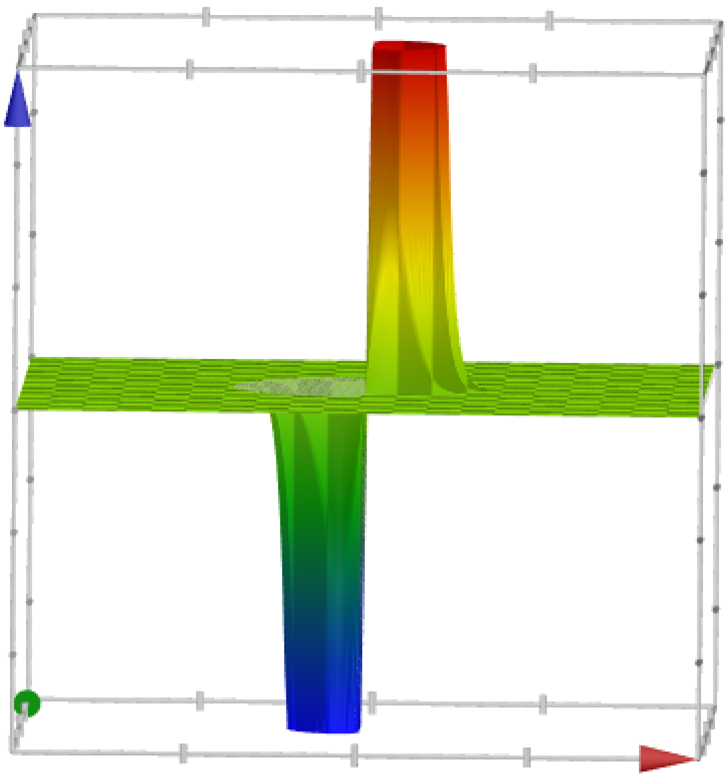
A tak że dostajemy współrzędne minimum [x,y] = [-0.7066; -0.0008]
wartość minimum -0.4289
i rozmiar sympleksu 6.1737e-04

Wynikowy sympleks dla warunku końcowego porównywania rozmiaru sympleksu do 0.0000001, jest otyle mały że nie ma możliwości przedstawić go graficznie:



A tak że dostajemy współrzędne minimum [x,y] = [-0.7071; 0]
wartość minimum -0.4289
i rozmiar sympleksu 0

Na danej funkcji zauważone zostało, że początkowy sympleks jest ważnym elementem, jeżeli zostaną źle podane wierzchołki, to minimum nie będzie znalezione. Dana funkcja nie spada na całym obszarze:



Badanie funkcji wielowymiarowych:

Następnie została zbadana funkcja trójwymiarowa:

Warunkiem końcowym była różnica wysokości najlepszego i najgorszego wierzchołku porównywana do epsilon.

$F=((x + 1)^2 + y^2 + (z - 1)^2 - \sin(x + 1)^2 + y^2 + (z - 1)^2)^2;$

Po wywołaniu metody dostajemy wynik:

Wierzchołek z minimalną wartością: [x,y,z] = [-0.8822; 0.0071; 0.9950]

Wartość minimum: 4.6458e-08

Rozmiar sympleksu końcowego: 0.3307

Sympleks wyjściowy:

-1.2129	-0.0076	1.0011
-0.9480	-0.0086	1.0166
-0.8822	0.0071	0.9950
-0.9870	0.0091	1.0105

Następnie została zbadana funkcja funkcja trójwymiarowa:

Warunkiem końcowym był rozmiar sympleksu porównywany z epsilon 0.0000001.

$F=((x + 1)^2 + y^2 + (z - 1)^2 - \sin(x + 1)^2 + y^2 + (z - 1)^2)^2;$

Po wywołaniu metody dostajemy wynik:

Wierzchołek z minimalną wartością: [x,y,z] = [-1; 0; 1]

Wartość minimum: 6.6641e-133

Rozmiar sympleksu końcowego: 4.4409e-16

Sympleks wyjściowy:

-1	-0	1
-1	0	1
-1	0	1
-1	-0	1

3. Wnioski

Metoda pełzającego sympleksu Nelder'a-Mead'a dobrze działa na przedziałach unimodalnych, za pomocą nie dużej ilości iteracji można odnaleźć minimum funkcji. Jest wadliwa na podanie wadliwego sympleksu.

W przypadku podania sympleksu, w którym każdy wierzchołek na takim samym poziomie może przesunąć w zła stronę sympleks i się zawiesić przeszukując nieprawidłowy obszar funkcji.

Zostało zauważone że kryterium stopu, to ważny element. Przy porównywaniu funkcji trójwymiarowych, wartość minimum jest jednakowa przy zatrzymywaniu funkcji przy porównywaniu różnicy wysokości wierzchołków i przy porównywaniu rozmiaru sympleksu jest równa. Lecz w przypadku porównywania rozmiaru sympleksu minimum jest odnajdywany w większej ilości iteracji.

W przypadku porównywania funkcji mających więcej niż trzy wymiary, warunek porównywania rozmiaru sympleksu działa lepiej, odnajdując dokładniejsze dane wynikowe.

Literatura

[1] Prof. dr hab. inż. Konstanty Marek Gawrylczyk, „*http://www.kmg.zut.edu.pl/opt/wyklad/bezgrad/simplex.html*"