Metody obliczeniowe optymalizacji **2011/2012**

Prowadzący: mgr inż. Łukasz Chomątek czwartek, 16:00

Data oddania: ______________ Ocena: ______________

Paweł Musiał 178726
Łukasz Michalski 178724

Zadanie 3: Optymalizacja wielowymiarowa bez ograniczeń*

1. Cel

Zaimplementować jedną spośród następujących metod optymalizacji:

- pełzający sympleks
- metoda Fletchera-Reevesa
- **metoda quasi-Newtona w wersji Davidon-Fletcher-Powell (DFP)**

Przedstawiany jako rozwiązanie program powinien prezentować kolejne kroki poszukiwania rozwiązania.

2. Rozwiązanie zadania

Metody „quasi-newtonowskie" są metodami wyznaczania lokalnych ekstremów funkcji. Metoda ta oblicza postać przybliżoną macierzy Hessego, przy pomocy gradientu. Kolejne przybliżenia rozwiązania wyznaczamy w następujący sposób.

Informacja o wartości macierzy Hessego w punkcie daje nam dane o krzywiźnie funkcji. Jeśli macierz ta jest dodatnio określona w punkcie to oznacza, że jest to lokalne minimum, natomiast gdy jest ujemnie oznaczona oznacza to, że w danym punkcie znajduje się lokalne maksimum. W przypadku gdy macierz jest nieokreślona ma miejsce punkt przegięcia.

* SVN: `https://serce.ics.p.lodz.pl/svn/labs/moo/lc_cz1600/lmpm`

1. Inicjalizacja
   - ustal dodatnio określoną macierz S_0
   - punkt początkowy x_0
   - licznik $k = 0$
2. Iteracja
   - oblicz $g_k = \nabla f(x_k)$
   - oblicz $d_k = -S_k g_k$
   - wyznacz α_k metodą Wolfe
   - przypisz $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$
   - Aktualizacja przybliżenia macierzy Hessego
     · oblicz $p_k = \alpha_k d_k; g_{k+1} = \nabla f(x_{k+1})$
     · oblicz $q_k = g_{k+1} - g_k$
     · oblicz $S_{k+1} = S_k + \frac{p_k p_k^T}{<p_k, q_k>} - \frac{S_k q_k q_k^T S_k}{<q_k, S_k q_k>}$
   - przypisz $k = k + 1$

Gdzie warunkiem stopu algorytmu jest albo liczba iteracji, albo wielkość kroku.

Kryterium Wolfa, jest rozszerzeniem kryterium poprawy Armijo

$$f(x^k + \lambda^k d^k) \leq f(x^k) + c\lambda^k \nabla f^T(x^k) d^k \tag{1}$$

o kryterium krzywizny:

- Słabe kryterium krzywizny

$$\nabla f^T(x^k + \lambda^k d^k) d^k \geq c \nabla f^T(x^k) d^k \tag{2}$$

- Silne kryterium krzywizny

$$\|\nabla f^T(x^k + \lambda^k d^k) d^k\| \leq \|c \nabla f^T(x^k) d^k\| \tag{3}$$

Gdzie :

- x^k - kolejne przybliżenia rozwiązania
- λ^k - długość kroku
- d^k - kierunek zmiany
- c - stałe używane w kryteriach
- $f(x)$ - wartość funkcji podstawowej w punkcie
- $\nabla f(x)$ - wartość gradientu w punkcie

Dobór długości kroku na podstawie kryterium Wolfe odbywa się przy pomocy algorytmu backtrakingu:

1. Sprawdź czy zachodzi kryterium dla zadanej długości kroku
2. Jeśli kryterium zachodzi, zwróć długość kroku λ
3. Jeśli kryterium nie zachodzi, oblicz $\lambda = \lambda\rho$, gdzie $\rho \in (0, 1)$, wróć do punktu 1

3. Opis programu

Program jest implementacją wyżej opisanej metody. Wyjaśnienie znaczenia zmiennych :

- **f0** - funkcja podstawowa
- **f1** - gradient funkcji
- **d** - kierunek zmiany
- **x** - kolejne przybliżenia
- **a** - długość kroku
- **c** - parametr kryterium
- **Sk** - kolejne przybliżenia macierzy Hessego
- **rho** - parametr backtrackingu

3.1. Metoda Quasi-newtona DFP

```
function x=dfp(x0,fn,a0,rho,c,kMax, eps)
f=inline(fn);
f0=@(x)f(x(1),x(2));
syms x y
t=[x;y];
w=fn;
gfn=matlabFunction(jacobian(w,t).');
f1=@(x)gfn(x(1),x(2));
sl='wolfe';
sl=@(x,d)backtk(sl,a0,x,d,c,f0,f1,rho);
x=x0;
k=0;

Sk = eye(length(x0), length(x0));
err = 1.0;
X=x(1);
Y=x(2);
fk=0;
while (k<kMax) && (eps < err)
    g = f1(x);
    d = -Sk*g;
    a=sl(x,d);
    fk = f0(x);
    x=x+a*d;
    fprintf('f(%.3f,%.3f)=%.3f\n',x(1),x(2),fk);
    fk_new = f0(x);
    p = a*d;
    q= f1(x) - g;
    Sk = Sk + (p*(p'))/(p'*q) - (Sk*q*(q')*Sk)/(q'*(Sk*q));
    k=k+1;
    err = max( abs(fk - fk_new),norm(p));
end
```

metoda quasi–newtona DFP

3.2. Kryterium Wolfe

```
if c(1)*f1(x)'*p<=f1(x+a*p)'*p &&
 f0(x+a*p)<=f0(x)+c(2)*a*f1(x)'*p
    test=1;
else
    test=0;
end
```

Slabe kryterium Wolfa

```
if abs(c(1)*f1(x)'*p)>=abs(f1(x+a*p)'*p) &&
 f0(x+a*p)<=f0(x)+c(2)*a*f1(x)'*p
     test=1;
else
     test=0;
end
```

Silne kryterium Wolfa

3.3. Algorytm backtrackingu

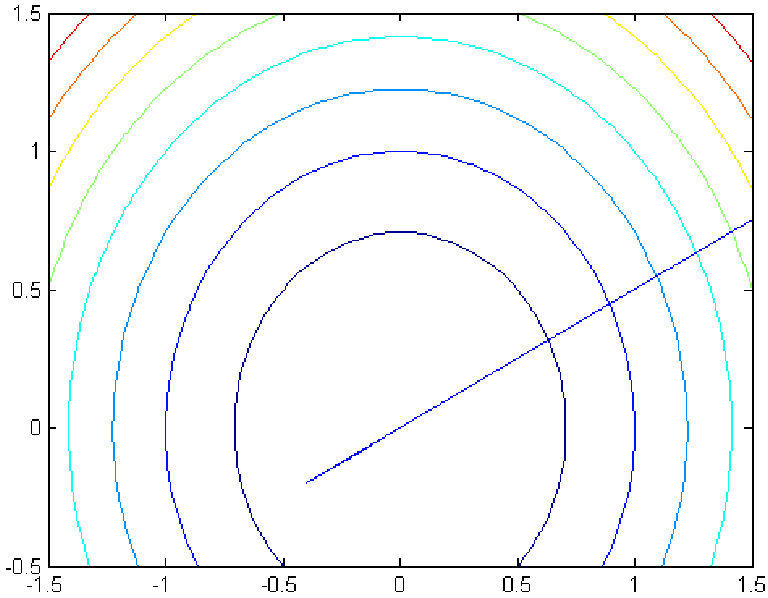
```
switch cond
     case 'wolfe'
          check=@(a) wolfe(a,x,p,c(1),f1) &&
                   armijo(a,x,p,c(2),f0,f1);
     case 'wolfes'
          check=@(a) wolfes(a,x,p,c(1),f1) &&
                   armijo(a,x,p,c(2),f0,f1);
end
a=a0;
while check(a)~=1 && abs(a) > 0.0000001
     a=rho*a;
end
```

Algorytm backtrackingu

4. Wyniki

Testowana funkcja : $x^2 + y^2$
Dla Argumentów : $[2; 1]$, $x^2 + y^2$, 0.6, 0.99, $[0.6; 0.4]$, 100, 0.001
Kolejne przybliżenia:

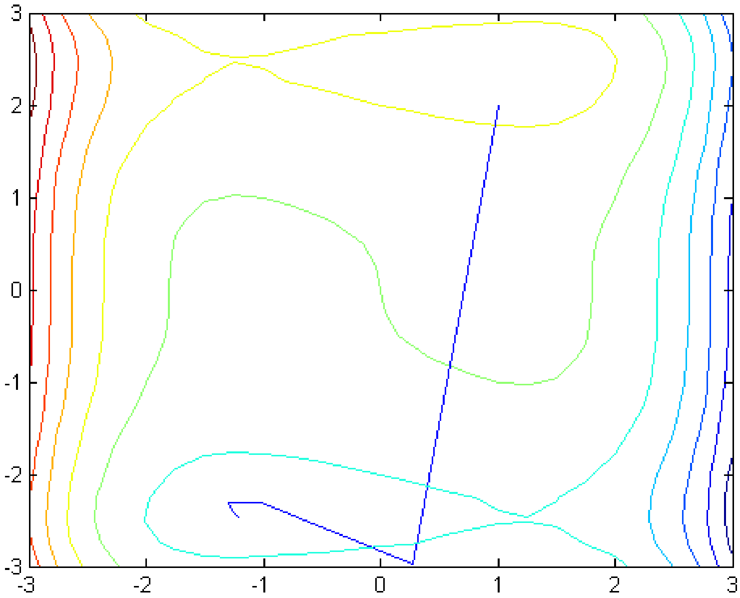
1. f(-0.400,-0.200)=5.000
2. f(-0.160,-0.080)=0.200
3. f(-0.064,-0.032)=0.032
4. f(-0.026,-0.013)=0.005
5. f(-0.010,-0.005)=0.001
6. f(-0.004,-0.002)=0.000
7. f(-0.002,-0.001)=0.000
8. f(-0.001,-0.000)=0.000
9. f(-0.000,-0.000)=0.000



Rysunek 1: Wykres kolejnych przybliżeń dla funkcji $x^2 + y^2$.

Testowana funkcja : $x + 10 * x - x^5 + y + 10 * y^3 - y^5$
Dla Argumentów : $[1; 2]$, $x + 10 * x - x^5 + y + 10 * y^3 - y^5$, 0.6, 0.99, $[0.6; 0.4]$, 15, 0.00001
Kolejne przybliżenia:

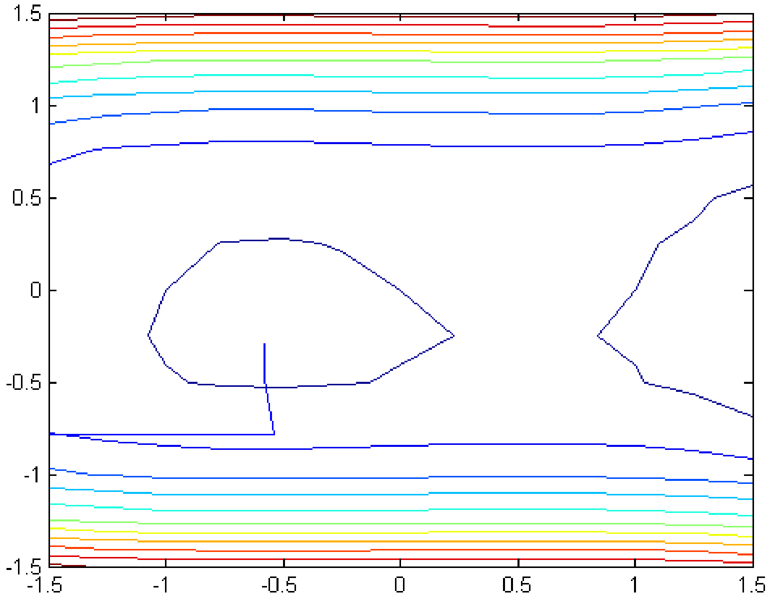
1. f(0.272,-2.977)=60.000
2. f(-1.014,-2.301)=-30.053
3. f(-1.296,-2.313)=-69.709
4. f(-1.296,-2.313)=-70.454
5. f(-1.254,-2.415)=-70.454
6. f(-1.234,-2.444)=-71.809
7. f(-1.225,-2.452)=-71.942
8. f(-1.221,-2.454)=-71.955
9. f(-1.219,-2.456)=-71.958
10. f(-1.218,-2.456)=-71.958
11. f(-1.218,-2.456)=-71.958
12. f(-1.218,-2.456)=-71.958
13. f(-1.218,-2.456)=-71.958
14. f(-1.218,-2.456)=-71.958
15. f(-1.218,-2.456)=-71.958



Rysunek 2: Wykres kolejnych przybliżeń dla funkcji $x + 10 * x - x^5 + y + 10 * y^3 - y^5$.

Testowana funkcja : $x - x^3 + y + 10 * y^4$
Dla Argumentów : $[-2; -2]$, $x - x^3 + y + 10 * y^4$, 0.6 ,0.99, $[0.6; 0.4]$, 15, 0.00001
Kolejne przybliżenia:

1. f(-1.958,-0.792)=164.000
2. f(-0.538,-0.784)=8.694
3. f(-0.538,-0.784)=2.608
4. f(-0.558,-0.635)=2.608
5. f(-0.570,-0.544)=0.608
6. f(-0.577,-0.466)=-0.055
7. f(-0.581,-0.406)=-0.380
8. f(-0.581,-0.362)=-0.519
9. f(-0.580,-0.332)=-0.575
10. f(-0.579,-0.313)=-0.596
11. f(-0.578,-0.302)=-0.602
12. f(-0.578,-0.297)=-0.604
13. f(-0.578,-0.294)=-0.604
14. f(-0.577,-0.293)=-0.604
15. f(-0.577,-0.293)=-0.604



Rysunek 3: Wykres kolejnych przybliżeń dla funkcji $x - x^3 + y + 10 * y^4$.

$f(x, y)$	punkt	wartość w punkcie
$x^2 + y^2$	(0,0)	0
$x + 10 * x - x^5 + y + 10 * y^3 - y^5$	(-1.218,-2.456)	-71.958
$x - x^3 + y + 10 * y^4$	(-0.577,-0.293)	-0.604

Tablica 1: Zestawienie wyników uzyskanych przy pomocy WolframAlpha

.

5. Wnioski

W problemie optymalizacji funkcji wielu zmiennych, możemy mieć przypadki trudne do rozstrzygnięcia posiadając jedynie informacje o przegięciu wartości pierwszej pochodnej w punkcie. Przypadkiem takim może być punkt przegięcia który jest punktem ekstremalnym ale nie jest on ani minimum ani maksimum danej funkcji. Wartość przybliżona macierzy Hessego w punkcie rozstrzyga ten problem. Jednakowo wprowadza nową informacje dotyczącą przebiegu badanej funkcji - jej krzywiznę.

Zaprezentowana tutaj metoda wyznacza wartość przybliżoną macierzy Hessego metodą Davidon-Fletcher-Powell [2], jak widać na prezentowanych rzutach funkcji udało znaleźć się lokalne minima z zadowalającą dokładnością (zgodnie z wynikami wzorcowymi zawartymi w tabeli 1).

Literatura

[1] `http://en.wikipedia.org/wiki/Quasi-Newton_method`

[2] http://en.wikipedia.org/wiki/DFP_updating_formula
[3] http://en.wikipedia.org/wiki/Wolfe_conditions