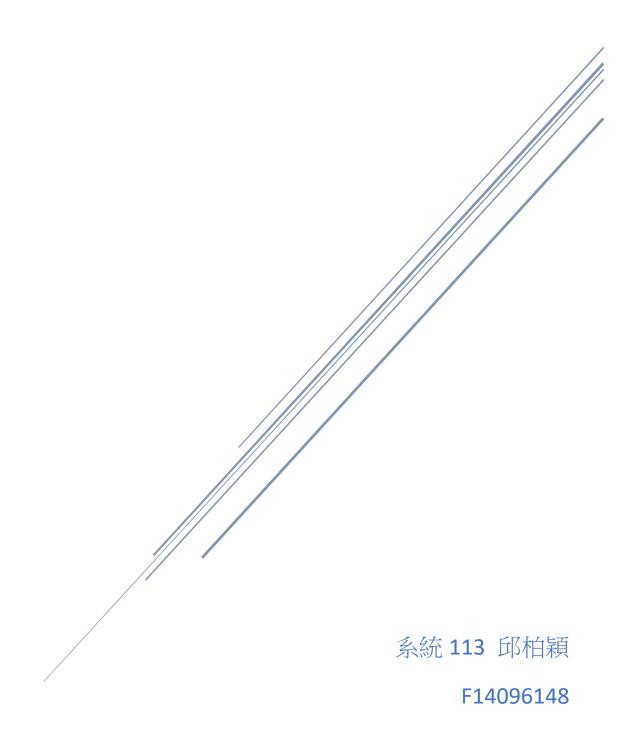
非線性規劃入門演算法與實作-心得報告

ALGORITHMS FOR NONLINEAR PROGRAMMING AND THEIR IMPLEMENTATIONS



課程總結

最佳化問題可簡單分為不同類別,同樣是 Data Fitting 的問題便可分為線性及非線性兩者,從高中便已經了解到的最小平方法的方法出發,課程中更進一步解釋到如何將問題及相關式子轉換為一般式並利用矩陣來表示,而該部分也同樣為後半部如 KKT 之類解題方法之基礎。此外,也了解到最佳化解法的其中一項分支「機器學習」,其中的流程原理及各權重值在過程中所代表的意義。

從非約束問題出發,藉由梯度下降的方法來求得最佳解並實際在實作過程中實現。藉由 梯度的 norm 值我們可以設定程式停止值,並不斷搜尋解答,並透過每次計算數值的改變來 計算收斂速度以驗證效率。為了近一步提升收斂速度,藉由共厄梯度下降法來達成 n+1 的快 速收斂(n 為維度)。實際比較可以發現收斂速度由 56 次(如圖 1)提升到僅僅 4 次(如圖 2)。完 成非約束問題後,進一步探討約束問題前需要探討當方程式內出現 In 等函數時出現的可行 解範圍,錯誤的設定方向及步長可能造成在收斂過程中無法停止,因此需要利用二分法等判 斷式來控制。

```
51 52 2.999999 4.000002 -5.000000
                       -1.032483e-07
                                -2.542578e-06
                                         52 53 2.999999 4.000001 -5.000000
                       1.779728e-06
                                53 54 2.999999 4.000001 -5.000000
                       -6 435264e-08
                                -1 584740e-06
                                         54 55 2.999999 4.000001 -5.000000
                        1.109270e-06
                                -5.004989e-08
                                         1.170344e-06  0.268113  -156.000000
                                                               0.666667
55 56 3.000000 4.000001 -5.000000
                       -4.010976e-08
                                -9.877379e-07
```

圖 1 梯度下降法(初始值 [0,0,0])

```
k: 1 sol: [[0 0 0]]
k: 2 sol: [[6. 0. 0.]]
k: 3 sol: [[0.85714286 6.85714286 0. ]]
k: 4 sol: [[ 3. 4. -5.]]
```

圖 2 共厄梯度下降法(初始值 [0,0,0])

約束問題部分,先將約束條件中不等式部分轉為如下的一般式並將其表示為 KKT 中的 A、b、c 可進一步求得其解。

$$\begin{cases} Ax = b \\ A^T y + r = c \\ r^t x = 0 \end{cases}$$

將式子列出後先透過第三式將其 r 及 x 列表(如圖 3)後, ——帶入各值並檢驗可行性作為解答。了解 KKT 方法後, 透過內點法進一步增加計算速度, 而該部分同樣需要利用判斷式等方式來控制步長以避免在收斂過程中方向錯誤。

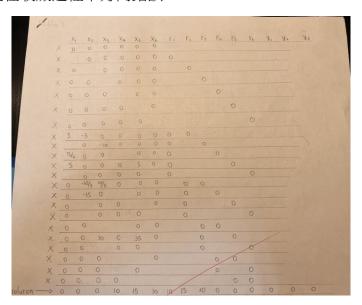
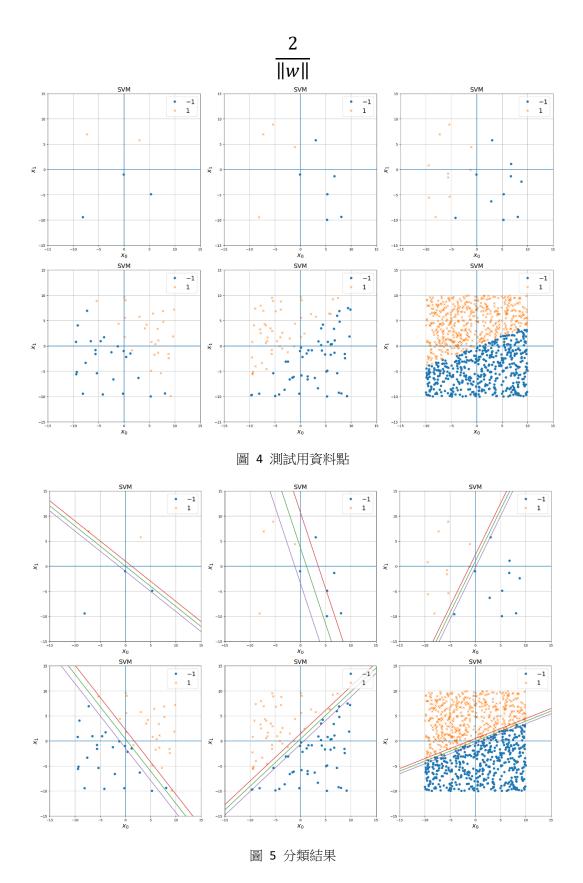


圖 3 KKT 列表

支援向量機(SVM)

結合前幾天所學到對於最佳化之概念,應用在分類問題之中。SVM 欲求得能夠將資料群分類的線段,而在各資料點中尋找一直線並使各資料點到線距離最短便是其演算法核心概念,該條線即為切分兩標籤的線段。比較先前所學習到的最佳化問題,SVM 中欲求得最小值即為點至直線距離總和並套用到前幾天所學到的 KKT 之中求解。由於 KKT 中要求各變數皆須大於 0,但 SVM 問題中並未有該限制,因此須將問題做調整。而為了減小計算量,選擇在每次計算時調整目標式係數而非每次皆計算出數值。改變限制式及每次遞迴的目標式係數即可將先前的 KKT 程式改為 SVM,也是課程最後一天的主要目標。

觀察 SVM 計算出結果,先分別比較在 5、10、20、50、100、1000 筆數據的計算下結果 (如圖 4),由於該部分先測試 SVM 是否能夠有效處理資料,因此未加入雜訊。各資料點分別標記為-1 及 1 且各自群聚,透過 SVM 期望找出一條線將資料點切割為兩條直線,其中資料點到該條直線距離即為最佳化中欲求得的最小值。觀察分類結果(如圖 5),綠線為分類結果,紅線及紫線分別為資料點中的邊界值,兩條直線間隔長度透過數學推導可得值其值為



為了能夠有效觀察雜訊對其造成的影響,使用 100 筆資料點其中含有十筆雜訊值 (如圖 6),調整其懲罰參數 C 並觀察其分類結果(如圖 7)。

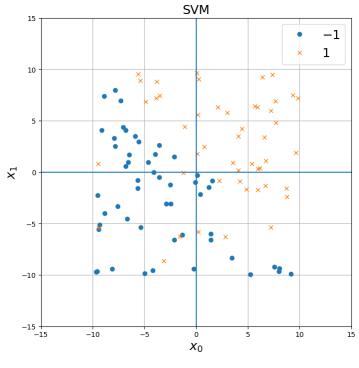


圖 6100 筆資料添加雜訊

由參數調整結果可以了解到,當 C 值越小模型越可能導致模型分類錯誤,造成離群點不正確分類或甚至產生不正確結果。當 C 值逐漸上升後模型較為接近 hard-margin,其邊界較為偏向正確分類並有更為精確的結果。然而,過高的 C 值可能造成模型過擬和,因此調整適當的 C 值對模型影響甚大。

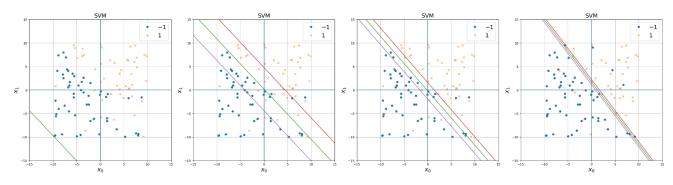


圖 7 懲罰參數調整結果(C 值由左至右分別為 0.5、1、1e6、1e10)

學習心得

由於未來研究所需要相關知識因此在暑假修習了相關的課程,在這堂課之前有先上過另一堂機器學習導論的課程,因此先碰過神經網路相關的內容。因此在這堂課前有先了解過機器學習及 SVM 相關的內容,而五天的密集課程從高中學過的線性規劃

到最後完全沒聽過的 KKT,讓我從只了解 SVM 概念到能夠打出實際的程式碼。若要 說到課程中較為遺憾的部分,便是在第三天設定步長限制時未能夠加上防呆裝置,該 部分在經過更改後仍然會跳出錯誤,日後會再找時間將該部分的內容補足。

除了前面其他段落描述過的課程內容外,最大的收穫便是了解如何將 pseudo code 或相關的數學觀念轉為實際的程式碼。過去在閱讀 paper 時便發現從了解概念 到實際操作出來有一小段差距,透過課程中早上學習概念下午學習時做程式碼的方式,使我能夠慢慢的將 paper 內容轉為實際並重現作者的實驗而非只能不斷尋找 open source,這也是未來研究所所必備的技能之一。

最後,另一方面的收穫便是了解工資管系的課程內容,雖然僅僅是冰山一角,但 能夠更了解除了自己系上外的領域可能在未來也有想不到的幫助。在實際列出 KKT 計 算過程中的表時,也深深體會到程式的重要性,透過幾行程式碼能夠跳過一整晚痛苦 列式的過程。

該堂課結束後對非線性規劃相關問題更有興趣且有更深的了解,了解到過去所學線性代數的不足之處及其在多維度下的實際應用。也感謝教授另外提供關於凸函式的相關簡報,及助教這幾天的協助 debug。感謝!