Numerische Optimierung Abgabe 2

Florian Bernhard, Maxim Dudin

28.05.2021

Aufgabe 1

Die Implementierung des Quasi-Newton-Verfahrens befindet sich in dem dafür vorhergesehenen "Global BFGS.m" File. Darin wird außerdem das "Wolfe Powell.m" File zur Bestimmung der Schrittweite alpha verwendet.

Aufgabe 2

Siehe "Aufgabe2.png".

Aufgabe 3

Ist H symmetrisch und positiv definit und gilt die notwendige Bedingung y'*s>0, so ist auch die BFGS-Approximation H auch symmetrisch und postiv definit. Um die Approximation der Hessematrix danach wieder aktuell zur Verfügung zu haben gibt es folgende Möglichkeiten.

Wir haben uns hierbei für drei Möglichkeiten entschieden, welche auch zum Teil auskommentiert in dem "Global BFGS.m" File niedergeschrieben sind. Diese wären:

- Wir nehmen als Matrix A die Einheitsmatrix.
- Wir berechnen uns mit ((y'*s)/(y'*s)) * I ein neues A, welches aber vorraussetzt, dass wir die while-Schleife in der Implementierung schon mind. einmal durchlaufen.
- Wir behalten das A aus den vorherigen Berechnungen bei.

Dabei haben wir uns für die erste Möglichkeit entschieden, da wir hierbei die Berechnung der Inversen, welche wir für die UpdateFormel benötigen nicht brauchen. Die Inverse der Einheitsmatrix ist nämlich die Einheitsmatrix selber.

Aufgabe 4

Für die Himmelblau Funktion mit einem zufälligen Startwert konvergiert die fminunc Funktion im Schnitt mit 10 Iterationen und das selbst implementierte BFGS Verfahren mit 18 Iterationen exakt.

Für die neun dimensionale Rosenbrock Funktion und einem zufälligen Startwert konvergiert die fminunc Funktion im Schnitt mit 77 Iteationen und das selbst implementierte BFGS Verfahren mit 106 Iterationen exakt.

Es ist möglich die exakte Lösung bis N = 9 zu bestimmen. Um ein höheres N zu erreichen muss die Schrittweitensteuerung den Bedürfnissen dieser hochdimensionalen Funktion angepasst werden. Leider erhalten wir hier mit der Wolfe Powell Schittweitensteuerung ein Alpha im Bereich von 1.0e-15.

Aufgabe 5

siehe "Aufgabe5.pdf".

Aufgabe 6

Die Implementierung befindet sich im "GaussNewton.m".

Die Implementierung arbeitet mit einer Schätzung der Jacobi-Matrix um eine beliebige Funktion als Input bekommen zu können, nicht nur analyisch diffirenzierbare symbolische Funktionen.

Aufgabe 7

Wir haben die Implementierung gegen lsquurvefit getestet. Bei der exponenziellen Funktion liefert die Implementierung gleiche Ergebnisse für alle getesteten Startwerte. Das Beispiel aus der Biochemie wird korrekt mit beiden Funktionen GaussNewton und lsquurvefit mit dem Startwert (10,0.05,0.1) gelöst. Wenn man den Startwert variiert, scheitern beide Verfahren. lsquurvefit liefert die falsche Antwort und GaussNewton erreicht nie die Toleranz und bricht nach einer Iterationsgrenze ab.

Aufgabe 8

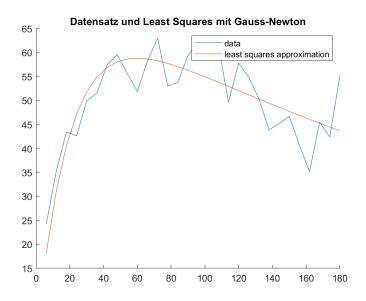


Figure 1: Plot der Aufgabe 8

Aufgabe 9

Leider konvergiert das BFGS-Verfahren für den im Skript angegebenen Startwert x0 = [10,0.5,0.1] nicht. Mit einer anderen Startwert ([2,0.1,0.1]) konvergiert das Verfahren jedoch zuverlässig.