Übungen zu Stetige Optimierung

Markus Grasmair

2. Übungsblatt, 21. Juni 2012

1. Prüfen Sie nach, dass die Quasi-Newton Updates über DFP und BFGS jeweils symmetrische Matrizen erzeugen, die die Sekantengleichung $W^{(k+1)}y_k = s_k$ erfüllen.

2. Sei $W^{(1)} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ eine symmetrische Matrix und seien $y_j,\ s_j \in \mathbb{R}^n$, $j = 1,\dots,k$. Bezeichne weiters $W^{(k+1)}$ die Matrix, die man durch k-maliges Anwenden eines Quasi-Newton Updates über BFGS (mit den Vektoren y_j und s_j, $j = 1,\dots,k$) auf $W^{(1)}$ erhält. Es ist also
$$W^{(k+1)} = W^{(1)} + \sum_{j=1}^{k} B^{(j)}$$
mit
$$B^{(j)} = -\frac{s_j y_j^T W^{(j)} + W^{(j)} y_j s_j^T}{y_j^T s_j} + \left(1 + \frac{y_j^T W^{(j)} y_j}{y_j^T s_j}\right)\frac{s_j s_j^T}{y_j^T s_j}\,.$$
Zeigen Sie, dass man mit folgendem Algorithmus das Produkt $d := W^{(k+1)}g$ für $g \in \mathbb{R}^n$ bestimmen kann:

Daten : $W^{(1)} \in \mathbb{R}^{n\times n}$, $g \in \mathbb{R}^n$, Vektoren $y_j,\ s_j \in \mathbb{R}^n$, $j = 1,\dots,k$;
Initialisierung : Setze $q_k = g$;
für $j = k,\dots,1$ **tue**
setze $\alpha_j = \dfrac{q_j^T s_j}{y_j^T s_j}$ und $q_{j-1} = q_j - \alpha_j y_j$;
Ende
Setze $h_0 = W^{(1)}q_0$;
für $j = 1,\dots,k$ **tue**
setze $\beta_j = \dfrac{y_j^T h_{j-1}}{y_j^T s_j}$ und $h_j = h_{j-1} + (\alpha_j - \beta_j)s_j$;
Ende
Setze $d = h_k$;

Hinweis: Eine Möglichkeit ist, die Korrektheit durch Induktion über k zu zeigen und dabei zu verwenden, dass (nach Induktionsvoraussetzung und Definition des Algorithmus) die Gleichung $h_{k-1} = W^{(k)}q_{k-1}$ gilt.

3. Betrachten Sie das restringierte Optimierungsproblem

$$f(x) \to \min \qquad \text{unter } c_j(x) = 0 \text{ für } j = 1, \ldots, m.$$

Zur Durchführung der Liniensuche bei einem Newtonverfahren zur Lösung dieses Problems ist es nötig, ein Zielfunktional zu definieren, das während der Liniensuche näherungsweise minimiert wird. In der Vorlesung wurde die Funktion $G_\sigma(x) := f(x) + \sigma|c(x)|$ als exakte Pönalisierung vorgeschlagen.

Zeigen Sie, dass im Gegensatz dazu die Funktion

$$\tilde{G}_\sigma(x) := f(x) + \frac{\sigma}{2} \sum_{j=1}^{m} c_j(x)^2$$

allgemeinen keine exakte Pönalisierung bei einem lokalen Minimum x^* des restringierten Problems darstellt. Betrachten Sie weiters die *Augmented–Lagrange–Funktion*

$$G_{\mu,\sigma}(x) := f(x) + \sum_{j=1}^{m} \mu_j c_j(x) + \frac{\sigma}{2} \sum_{j=1}^{m} c_j(x)^2\,,$$

wobei $\mu = (\mu_1, \ldots, \mu_m) \in \mathbb{R}^m$ und $\sigma > 0$, und finden Sie eine notwendige Bedingung für die Exaktheit von $G_{\mu,\sigma}$ bei x^*.

4. Implementieren Sie in Matlab oder Octave ein Quasi-Newtonverfahren mit Updates über BFGS und Liniensuche.

5. Implementieren Sie in Matlab oder Octave ein Newtonverfahren zur Lösung von Optimierungsproblemen mit Gleichheitsnebenbedingungen. Implementieren Sie zusätzlich eine Liniensuche mit Zielfunktion $G_{\sigma^{(k)}}(x) = f(x) + \sigma^{(k)}|c(x)|$, wobei $\sigma^{(k)}$ so gewählt ist, dass $\sigma^{(k)} > |\lambda^{(k)}|$.

   Eine Möglichkeit, die Parameter $\sigma^{(k)}$ zu bestimmen, ist die Definition $\sigma^{(k)} = \max\{c\sigma^{(k)}, |\lambda^{(k)}| + \sigma_0\}$ falls $\sigma^{(k)} \leq |\lambda^{(k)}| + \sigma_0$ und $\sigma^{(k)} = \sigma^{(k-1)}$ sonst, wobei $\sigma_0 > 0$ und $c > 1$ fix gewählte Parameter sind.

Testen Sie das Quasi-Newton sowie das restringierte Newtonverfahren an den Funktionen `rosenbrock.m`, `himmelblau.m` und `rosenbrockn.m`. Verwenden Sie zusätzlich die Nebenbedingungen `constraints1.m` und `constraints2.m` (für `rosenbrockn.n` mit mehr als 3 Variablen). In `constraints1.m` ist die Nebenbedingung $\sum_i x_i^2 = 2$ implementiert; in `constraints2.m` die Nebenbedingungen $\sum_i x_i^2 = 1{,}1$ und $\prod_i x_i = 1$.

Hinweis: Achten Sie darauf, dass die Liniensuche nur dann sinnvoll ist, wenn d tatsächlich eine Abstiegsrichtung für das Funktional $G_{\sigma^{(k)}}$ ist. Dies ist zwar nahe genug an der Lösung der Fall, muss aber nicht gelten, solange Sie noch weiter entfernt sind. Rechnen Sie weiters damit, dass die Verfahren auch mit Liniensuche häufig divergieren werden.