Weiterbildendes Studium Ingenieurmathematik – WS 98/99

Optimierung mit MATLAB

H.-J. Oberle, G. Opfer, S. Fredenhagen

Arbeitsblatt 2

1. Aufgabe 2.1: Notwendige und hinreichende Bedingungen

Gegeben sei die Funktion

$$f(x, y) = x^2y^2 + (x^2 - 1)^2$$

aus Aufgabe 1.2.

a) Wo liegen die stationären Punkte ($\nabla f(x^*, y^*) = 0$)?

b) Handelt es sich um lokale Extrema oder Sattelpunkte (Vergleichen Sie die Sätze 2.8, 2.10, Bemerkung 2.11 und Beispiel 2.12)?

2. Aufgabe 2.2: Polyeder-Methode von Nelder-Mead „von Hand“

Spezialisieren Sie die in Kapitel 3 angegebene Polyeder-Methode von Nelder-Mead auf den Fall $n = 1$ und beschreiben Sie einen resultierenden Algorithmus. Wenden Sie ihn auf die Funktion

$$f(x) = 2e^{-x} + x^2$$

an und berechnen Sie „von Hand“ drei Schritte, ausgehend von $x_0 = -2$, $x_1 = -1$.

3. Dateien für die Polyeder-Methode von Nelder-Mead

Das in der Vorlesung behandelte Verfahren von Nelder-Mead sollen Sie nun am Rechner auf einige Beispiele anwenden. Eine bereits fertige Implementation dieses Verfahrens finden Sie in der Datei `neldermead.m`. In ihr ist das Verfahren von Nelder-Mead für ein Minimierungsproblem beliebiger Dimension implementiert. Außerdem werden Dateien zur graphischen Ausgabe und vereinfachten Eingabe zur Verfügung gestellt. Diese Dateien müssen Sie noch in ihr Heimatverzeichnis in das Unterverzeichnis `blatt2` kopieren.

Es sollten folgenden Dateien vorhanden sein:

`neldermead.m`: Implementation des Nelder-Mead Verfahrens.

`startnm.m`: Startdatei für das Nelder-Mead Verfahren.

`minmax.m`: Bestimmt die Minima und Maxima in jeder Komponenten der im Laufe der Iteration auftretenden Vektoren.

`zeichnung.m`: Zeichnet in jedem Iterationsschritt das aktuelle Polyeder.

`rosenbrock.m`: Die *Rosenbrock*-Funktion.

`keinminimum.m`: Ein Beispiel ohne Minimum.

4. Beispiel: Minimiere die Rosenbrock-Funktion

An die Startdatei `startnm.m` können Parameter übergeben werden, aber es ist nicht notwendig dies zu tun. Als Standardeinstellung wird die Rosenbrock-Funktion

$$f(x, y) = 100(y - x^2)^2 + (1 - x)^2.$$

aus Aufgabe 1.2 minimiert. Als Startpolyeder wird ein gleichseitiges Dreieck mit Seitenlänge 1 verwendet, dessen eine Ecke im Punkt $(-2, 2)$ liegt.

Rufen Sie nun in `MATLAB` die Startdatei mittels des Befehls

```
>> startnm
```

auf. Für die graphische Darstellung des Iterationsverlaufs wird das Verfahren zweimal durchgeführt. In einem ersten Durchlauf werden die Abmessungen des darzustellenden Bereiches bestimmt. Dies dauert einen kurzen Moment.

Dann werden einige Höhenlinien der zu minimierenden Funktion gezeichnet und die Polyeder-Methode von Nelder-Mead erneut gestartet. In jedem Iterationsschritt wird das aktuelle Polyeder – in diesem Falle ein Dreieck – in das Diagramm mit den Höhenlinien eingezeichnet.

Nach Abschluß der Iteration werdem dem Benutzer die Anzahl der benötigten Iterationen für einen Durchlauf des Nelder-Mead Verfahrens, der beste Punkt im letzten Iterationsschritt und die Anzahl der Funktionsauswertungen ausgegeben. Ist die maximal zulässige Anzahl von Iterationen erreicht, welches im allgemeinen bedeutet, daß kein Minimum erreicht wurde, so wird der Benutzer durch eine Ausgabe darauf aufmerksam gemacht.

5. Aufgabe 2.3: Eigene Startvektoren

Sie können der Startdatei für das Nelder-Mead Verfahren auch einen eigenen Startpolyeder angeben. Die Ecken des Startpolyeders geben Sie als Spalten in einer Matrix an, beispielsweise

```
>> x0 = [0 0.5 1; 0 2 2]

x0 =
     0   0.5000   1.0000
     0   2.0000   2.0000
```

Starten Sie nun das Nelder-Mead Verfahren durch den Aufruf

```
>> startnm('rosenbrock',x0)
```

Testen Sie das Verfahren auch mit anderen Startpolyedern.

6. Weitere Parameter der Datei `startnm`

Die Startdatei kann mit weiteren Parametern aufgerufen werden. Dabei können mit

```
startnm('fktname', X0, iterationmax, nlines)
```

die folgenden Parametern übergeben werden.

`fktname`: Name der zu minimierenden Funktion, genauer der `.m`-Datei, die sie enthält.

`X0`: Eine $n \times (n+1)$-Matrix, deren Spalten die Ecken des Startpolyeders bezeichnen. Alternativ kann auch ein Spaltenvektor angegeben werden, aus dem das Startpolyeder automatisch erzeugt wird.

`iterationmax`: Anzahl der maximalen Iterationen

`nlines`: Anzahl der zu zeichnenden Höhenlinien

Möchten Sie einen Parameter vorgeben, so müssen Sie auch alle „vorhergehenden“ Parameter angeben. Die Eingabe

```
>> startnm('rosenbrock',[-2;2],100,40)
```

entspricht den Standardeinstellungen. Möchten Sie beispielsweise die maximale Anzahl von Iterationen festlegen, so müssen Sie auch die Parameter `X0` und `fktname` übergeben. Den nachfolgenden Parameter `nlines` können Sie auslassen.

7. Aufgabe 2.4: Ein Beispiel ohne Minimum

In der Datei `keinminimum.m` finden Sie folgende Funktion

$$f(x_1, x_2) = 10|x_2| - 0.01x_1^2$$

implementiert. Diese Funktion besitzt kein Minimum. Testen Sie mit dieser Funktion die Polyeder-Methode von Nelder-Mead, wie folgt.

Benutzen Sie den Startvektor `x0` aus der vorherigen Aufgabe und rufen sie die Startdatei mit

```
>> startnm('keinminimum',x0)
```

auf. In der Zeichnung erkennt man, daß das Polyeder gegen ∞ strebt. Zudem wird die maximale Anzahl an Iterationen erreicht. Das angegebene „Ergebnis“ ist kein Minimum.

Was passiert, wenn Sie das gleiche mit dem Startvektor

```
>> x1 = [0 0.1 0.1; 0 -0.1 0.1];
```

ausprobieren? Haben Sie eine Erklärung, warum das Verfahren konvergiert, obwohl kein Minimum vorliegt?

8. Eigene Funktionen

Um eigene Matlab-Funktionen zu schreiben, braucht man einen Editor. An den PC's erreicht man diesen über den Menüpunkt `File`. Nun hat man die Wahl, ob man unter `New` ein neues `M-file` erzeugen oder mit `Open...` eine schon erstellte Datei öffnen möchte. Hier bietet es sich an die Rosenbrock-Funktion zu wählen. Um sie nicht zu überschreiben, sollte man sie mit `File\Save As...` unter einem neuen Namen, z.B. `fkt.m`, speichern.

An den Workstations kann man keinen Editor über Matlab aufrufen. Einen einfachen Editor erhält man, wenn man die Datei im **File Manager** mit Doppelklick auswählt.

9. Aufgabe 2.5: Eine selbstgeschriebene Funktion

Minimieren Sie die Funktion

$$f(x_1, x_2) = x_1^2 x_2 - 0.25(2x_1^2 - x_2^2) + 0.5(2 - x_1^2 - x_2^2)^2$$

mit Hilfe des Nelder-Mead Verfahrens. Schreiben Sie die Funktion f zunächst in eine Datei `fkt.m`. Rufen Sie anschließend die Startdatei `startnm` mit einem eigenen Startdreieck und dem Namen Ihrer Funktion `fkt` auf.

Diese Funktion besitzt drei lokale Minima. Gelingt es Ihnen alle drei zu bestimmen?

Hinweis: Sollte Ihnen die Pause zwischen den einzelnen Iterationen zu lange sein, so können sie diese auch verkürzen. Ändern Sie dazu in der Datei `zeichnung.m` den Wert von `pause(1)` in `pause(0)`.