Weiterbildendes Studium Ingenieurmathematik – WS 98/99

Optimierung mit MATLAB

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

Arbeitsblatt 3

1. Vektorrechnung mit Matlab

Bisher wurde nur die komponentenweise Multiplikation `.*` in Matlab eingeführt. Daneben gibt es auch die Vektormultiplikation `*`, die für die Berechnung von Skalarprodukten und Produkten von Vektoren und Matrizen benutzt wird. Das Skalarprodukt

$$\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} = (5,7)\begin{pmatrix} 2 \\ 3 \end{pmatrix}$$

kann man mit

```
>> b=[5;7];
>> x=[2;3];
>> b'*x
```

berechnen. Für

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} \quad \text{mit } \boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 4 & 1 \\ 1 & 6 \end{pmatrix}$$

gibt man

```
>> A=[4,1;1,6]
>> A*x
```

ein. Ebenso kann man $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$ mit

```
>> x'*A
```

berechnen.

2. Aufgabe 3.1: Quadratische Funktion

Gegeben sei die Funktion

$$f(x_1, x_2) = 2x_1^2 + x_1x_2 + 3x_2^2 - 5x_1 - 7x_2 + 6. \tag{1}$$

a) Bringen Sie diese Funktion in die Form

$$f(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} + c$$

mit einer symmetrischen Matrix $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{2\times 2}$ und $\boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^2$.
Ist die Matrix $\boldsymbol{A}$ positiv definit?

b) Werten Sie die Funktion an den Stellen $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} = (2,3)$ und $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} = (1,1)$ aus.

3. Dateien für das Verfahren des steilsten Abstiegs

Das in der Vorlesung behandelte Verfahren des steilsten Abstiegs, sollen Sie nun am Rechner auf einige Beispiele anwenden. Eine Implementation diese Verfahrens finden Sie in der Datei `steilsterabstieg.m`. Hier wird die Matlab-Routine `fminu` zur Berechnung der exakten Schrittlänge verwendet. Es werden auch Dateien zur graphischen Ausgabe und vereinfachten Eingabe zur Verfügung gestellt. Außerdem gibt es eine zweite Version des Verfahrens, bei dem die Schrittlänge mit Hilfe der Hesse-Matrix berechnet wird.

Es sollten folgende Dateien vorhanden sein:

`steilsterabstieg.m`: Implementation des Verfahrens des steilsten Abstiegs, bei dem die „exakte Schrittlänge“ mit der Matlab-Routine `fminu` berechnet wird.

`startab.m`: Startdatei für das Verfahren des steilsten Abstiegs mit exakter Schrittlänge (`steilsterabstieg.m`).

`exaktsteilab.m`: Implementation des Verfahrens des steilsten Abstiegs, bei dem die Schrittlänge für quadratische Funktionen exakt berechnet wird.

`startexab.m`: Startdatei für das Verfahren des steilsten Abstiegs `exaktsteilab.m`.

`phi.m`: Funktion zur Schrittlängenbestimmung

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

`zeichnung.m`: Zeichnet den Iterationsverlauf.

`testfunktion.m`: Quadratische Testfunktion.

`gradienttestfunktion.m`: Gradient zur Testfunktion.

`hessetestfunktion.m`: Hessematrix zur Testfunktion.

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

`gradrosenbrock.m`: Gradient der *Rosenbrock*-Funktion.

`hessrosenbrock.m`: Hessematrix der *Rosenbrock*-Funktion.

4. Beispiel: Minimierung der Testfunktion

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

$$f(x,y) = x^2 + 100y^2 \tag{2}$$

minimiert. Als Startpunkt wird $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} = (1, 0.01)$ verwendet. Rufen Sie nun in `MATLAB` die Startdatei mittels des Befehls

```
>> startab
```

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 Iteration erneut gestartet. In jedem Iterationsschritt wird die aktuelle Iterierte in das Diagramm mit den Höhenlinien eingezeichnet.

Nach Abschluß der Iteration werden dem Benutzer die Anzahl der benötigten Iterationen für einen Durchlauf des Verfahrens, die letzte Iterierte 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.

Bei diesem Startvektor sieht man schön den Zickzack-Verlauf der Iteration. Bei der Wahl eines anderen Startvektors, wird das Minimum schneller gefunden.

5. Parameter der Datei `startab`

Die Startdatei kann mit Parametern aufgerufen werden. Dabei können mit

```
startab('fktname', X0,'gradname', iterationmax, nlines)
```

die folgenden Parametern übergeben werden.

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

`X0`: Startpunkt, z. B. `X0=[1;0.01]`.

`gradname`: Name des Gradienten der zu minimierenden Funktion, genauer der `.m`-Datei, die ihn enthält.

`iterationmax`: Anzahl der maximalen Iterationen

`nlines`: Anzahl der zu zeichnenden Höhenlinien

Wie beim Nelder-Mead-Verfahren gilt: Möchten Sie einen Parameter vorgeben, so müssen Sie auch alle „vorhergehenden“ Parameter angeben. Die Eingabe

```
>> startab('testfunktion',[1;0.01],'gradienttestfkt',1000,40)
```

entspricht den Standardeinstellungen.

6. Aufgabe 3.2: Steilster Abstieg

a) Wählen Sie einen anderen Startvektor für die Funktion aus dem Beispiel.

b) Bestimmen Sie mit das Minimum der Funktion aus Aufgabe 4.1 mit dem Verfahren des steilsten Abstiegs.

7. Das Programm `startexab`

Für eine quadratische Funktion

$$f(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} + c$$

erhält man für die Suchrichtung $\boldsymbol{s}$ die exakte Schrittlänge

$$\alpha_{\text{exakt}} = -\frac{\boldsymbol{s}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b})}{\boldsymbol{s}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{s}} = \frac{\boldsymbol{s}^{\mathrm{T}}\nabla f(\boldsymbol{x})}{\boldsymbol{s}^{\mathrm{T}}\nabla^2 f(\boldsymbol{x})\boldsymbol{s}}.$$

Um diese Schrittlänge benutzen zu können, benötigt man neben dem Gradienten auch die Hesse-Matrix der Funktion. Das Verfahren des steilsten Abstiegs mit dieser Schrittweite ist im Programm `exaktsteilab.m` realisiert. Zum vereinfachten Aufruf kann man die Routine

```
startexab('fktname', X0,'gradname','hessename', iterationmax, nlines)
```

verwenden. Ihr wird zusätzlich zu den Parametern des Programms `startab.m` der Name der Datei übergeben, die die Hesse-Matrix enthält. Ohne Parameter wird die Funktion (2) minimiert.

8. Aufgabe 3.3:

Bestimmen Sie die Minima der Funktionen (1) und (2) mit der Routine `startexab`.

9. Nicht quadratische Funktionen

Mit dem Verfahren des steilsten Abstiegs kann man auch lokale Minima nicht quadratischer Funktionen finden. Dabei spielt die Bestimmung der Schrittlänge eine wichtige Rolle. Die Schrittlänge α_{exakt} ist zwar für eine positiv definite Hesse-Matrix eine zulässige Schrittlänge, aber sie ist für eine nicht quadratische Funktion nicht exakt. Auf der anderen Seite ist die Berechnung der „exakten“ Schrittlänge, d.h. des globalen Minimums der Funktion in Richtung der Suchrichtung, im allgemeinen auch nicht möglich. So versagt auf den SUN-Workstations die Funktion `startab` für bestimmte Startwerte (z.B. [-2;2]) bei der Rosenbrock-Funktion, während unter Windows NT nach hinreichend langer Zeit das Minimum gefunden wird. Bei dem Programm `startexab` hat man weniger Probleme bei Bestimmung der Schrittlänge, diese ist aber nicht unbedingt gut.

10. Aufgabe 3.4: nicht quadratische Funktionen

Berechnen Sie die Gradienten und Hesse-Matrizen der Funktionen aus Aufgabe 1.2 und Aufgabe 2.5 und bestimmen Sie ihre Minima mit Hilfe des Programms `startab` oder `startexab`.