Nichtlineare Optimierung
1. Rechnerübungsblatt

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

Fachbereich Mathematik
Prof. Dr. Stefan Ulbrich
Hannes Meinlschmidt

WS 2011-2012
28.10.2011

Rechnerübung

Aufgabe R1 (Gradientenverfahren)
Implementieren Sie das Gradientenverfahren aus der Vorlesung in MATLAB. Verwenden Sie zur Bestimmung der Schrittweite die Schrittweitenregel von Armijo. Implementieren Sie hierbei die Schrittweitensuche nach Armijo unabhängig vom Hauptalgorithmus des Gradientenverfahrens, so dass Sie die Schrittweitensuche später in anderen Verfahren wiederverwenden können.
Beachten Sie, dass das Programm insbesondere auch für Zielfunktionen $f:\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ mit $n > 1$ funktionieren soll.
Verwenden Sie die folgende Anleitung:

- *Zum Gradientenverfahren:* Verwenden Sie den Funktionskopf

```
function [xn] = grad(x0,fg,tol,stepsize,maxit)
```

  mit folgenden Parametern:

  x0 Startpunkt (in der Vorlesung sind alle Vektoren Spaltenvektoren),
  fg eine MATLAB-Funktion, die beim Aufruf `[f,g] = fg(x)` den Funktionswert $f(x)$ der Zielfunktion und deren Gradient $g(x) = \nabla f(x)$ im Punkt x zurückgibt, beim Aufruf `[f] = fg(x)` aber nur den Funktionswert $f(x)$,
  tol Toleranz für die Abbruchbedingung: $\|g(x_k)\| \leq \mathrm{tol} \cdot \min(1, \|g(x_0)\|)$,
  stepsize definiert, welche Schrittweitenregel benutzt werden soll (z.B. `stepsize = 1` verwendet Armijo),
  maxit gibt die maximale Anzahl durchzuführender Iterationen an.

  Verwenden Sie für die Unterscheidung der Aufruffälle von `fg` die MATLAB-Funktion `nargout`.

- *Zur Armijo-Regel:* Verwenden Sie den Funktionskopf

```
function [sig] = armijo(xk,sk,stg,fg,fk,gamma)
```

  mit folgenden Parametern:

  xk aktueller Punkt,
  sk aktuelle Suchrichtung,
  stg aktuelle Richtungsableitung in Richtung s_k, also $\nabla f(x_k)^T s_k$,
  fg Zielfunktion (s.o.),
  fk aktueller Funktionswert,
  gamma Parameter γ aus der Armijo-Regel.

  Wählen Sie zur Berechnung der Schrittweite σ den Parameter $\beta = 0.5$ fest.

Testen Sie ihr Verfahren für folgende Funktionen:

- die quadratische Funktion $f_1(x_1, x_2) = x_1^2 + \alpha x_2^2$, mit verschiedenen $\alpha \geq 1$,
- die *Rosenbrock-Funktion* $f_2(x_1, x_2) = 100(x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2$ (globales Minimum ist $(1, 1)$),
- die *Dixon-Funktion*: $f_3(x_1, \dots, x_{10}) = (1 - x_1)^2 + (1 - x_{10})^2 + \sum_{i=1}^{9}(x_i^2 - x_{i+1})^2$ (globales Minimum ist der Vektor $(1, 1, \dots, 1)$).

Aufgabe R2 (Veranschaulichung des Gradientenverfahrens)
Ziel ist es nun, den Verlauf der Iterationspunkte zu visualisieren. Gehen Sie dazu wie folgt vor:

(a) Erweitern Sie zuerst ihr Programm zur Implementierung des Gradientenverfahrens: In jeder Iteration soll nun die Verbindungsgerade zwischen altem und neuem Iterationspunkt mit dem Befehl `plot` geplottet werden. In der k-ten Iteration entspricht dies genau der Richtung des steilsten Abstiegs im Punkt x_k mit der Länge der gewählten Schrittweite.

(b) Legen Sie nun eine weitere Matlab-Datei runf1.m an, in der Sie alle benötigten Schritte zum Aufruf und der Visualisierung Ihres Programms für die Funktion f_1 zusammenfassen (wählen Sie hier den Parameter $\alpha = 10$ fest):

i. Erzeugen Sie ein Höhenliniendiagramm zur Funktion f_1 mit dem Befehl `contour` (hierbei sollte sich auch `meshgrid` als nützlich erweisen).

ii. Rufen Sie Ihr erweitertes Programm für das Gradientenverfahren auf, welches den Pfad der Iterationspunkte dort einzeichnet.

Hinweis: Der Befehl `hold on` könnte hilfreich sein.

Testen Sie Ihr erweitertes Programm für die Funktion f_1 und erstellen Sie dann analog eine Datei runf2.m, um die Funktion f_2 zu testen.

Hausübung

Aufgabe H1 (Exakte Schrittweitensuche und quadratische Zielfunktion) (5 Punkte)
Wir untersuchen $f(x) = \frac{1}{2}x^TQx + b^Tx + c$, mit $c \in \mathbb{R}$, $b \in \mathbb{R}^n$ und $Q \in \mathbb{R}^{n,n}$ symmetrisch positiv definit.

(a) Sei $x_k \in \mathbb{R}^n$ und sei s_k eine zulässige Suchrichtung von f in x_k. Bestimmen Sie die Lösung der exakten Schrittweitensuche, d.h. berechnen Sie

$$\sigma_k = \arg\min_{\sigma>0} f(x_k + \sigma s_k).$$

(b) Zeigen Sie, dass das Gradientenverfahren mit exakter Schrittweite genau dann in einem Schritt das globale Optimum $\bar{x} = -Q^{-1}b$ erreicht, wenn der Startpunkt x_0 so gewählt wird, dass $\nabla f(x_0)$ ein Eigenvektor von Q ist.

Aufgabe H2 (Konvergenzeigenschaften des Gradientenverfahrens) (4 Punkte)
Sei $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ stetig differenzierbar, $x_0 \in \mathbb{R}^n$ und die Niveaumenge $N_f(x_0) := \{x \in \mathbb{R}^n : f(x) \le f(x_0)\}$ sei kompakt.
Zeigen Sie:
Falls das Gradientenverfahren (Algorithmus 2) mit Startpunkt x_0 nicht endlich terminiert, so erzeugt es eine Folge (x_k), für die folgendes gilt:

(a) Die Folge (x_k) besitzt mindestens einen Häufungspunkt in $N_f(x_0)$.

(b) Es gilt $\lim_{k\to\infty} \nabla f(x_k) = 0$.

Aufgabe H3 (Konvergenzrate des Gradientenverfahrens) (6 Punkte)
Für eine quadratische Funktion $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, $f(x) = \frac{1}{2}x^TQx + b^Tx + c$ mit $c \in \mathbb{R}$, $b \in \mathbb{R}^n$ und symmetrisch positiv definiter Matrix $Q \in \mathbb{R}^{n,n}$ wurde in der Vorlesung folgende Abschätzung für die Konvergenzrate des Gradientenverfahrens bei exakter Schrittweitensuche bewiesen:

$$f(x_{k+1}) - f(\bar{x}) \le \left(\frac{\lambda_{\max}(Q) - \lambda_{\min}(Q)}{\lambda_{\max}(Q) + \lambda_{\min}(Q)}\right)^2 (f(x_k) - f(\bar{x})).$$

Zeigen Sie, dass diese Abschätzung scharf ist, indem Sie die Funktion $f(x_1, x_2) = \frac{1}{2}(x_1^2 + \kappa x_2^2)$ für $\kappa \ge 1$ mit Startpunkt $x_0 = (1, \frac{1}{\kappa})^T$ betrachten.