Ottimizzazione Non Lineare

G. Liuzzi[1]

Giovedì 15 Novembre 2018

[1] Istituto di Analisi dei Sistemi ed Informatica IASI - CNR

Compass Search "debole"

INPUT: x_0, Δ_0, Δ_{min}, $\texttt{maxit}$

$k \leftarrow 0$, $x \leftarrow x_0$, $\Delta \leftarrow \Delta_0$

while $k \leq \texttt{maxit}$ **and** $\Delta \geq \Delta_{min}$ **do**

  $k \leftarrow k+1$, $\tilde{x} \leftarrow x$

  for $i = 1, 2, \ldots, n$

    if $f(\tilde{x} + \Delta e_i) < f(\tilde{x})$ **then**

      $\tilde{x} \leftarrow \tilde{x} + \Delta e_i$, **break**

    else if $f(\tilde{x} - \Delta e_i) < f(\tilde{x})$ **then**

      $\tilde{x} \leftarrow \tilde{x} - \Delta e_i$, **break**

    end if

  end for

  if $f(\tilde{x}) = f(x)$ **then** $\Delta \leftarrow \Delta/2$

  else $x \leftarrow \tilde{x}$

  end if

end while

RETURN: x (miglior punto determinato)

Un "nuovo" metodo

INPUT: x_0, Δ_0, Δ_{min}, $\texttt{maxit}$, $D = \{\pm e_i, i = 1, \dots, n\}$

$k \leftarrow 0$, $x \leftarrow x_0$, $\Delta \leftarrow \Delta_0$

while $k \leq \texttt{maxit}$ **and** $\Delta \geq \Delta_{min}$ **do**

  $k \leftarrow k + 1$, $y \leftarrow x$
  for each $d \in D$
    if $f(y + \Delta d) < f(y)$ **then** $y \leftarrow y + \Delta d$
  end for
  if $f(y) < f(x)$ **then**
    $x \leftarrow y$
  else $\Delta \leftarrow \Delta/2$

end while

RETURN: x (miglior punto determinato)

Domande?

Il metodo di Hooke&Jeeves

INPUT: x_0, Δ_0, Δ_{min}, $\mathtt{maxit}$, $D = \{\pm e_i, i = 1, \dots, n\}$

$k \leftarrow 0$, $x \leftarrow x_0$, $\Delta \leftarrow \Delta_0$

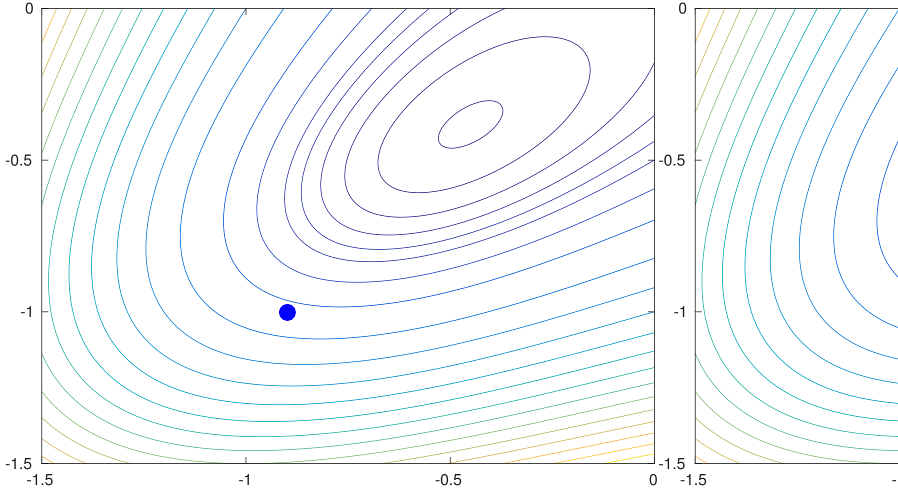
while $k \leq \mathtt{maxit}$ **and** $\Delta \geq \Delta_{min}$ **do**

  $k \leftarrow k + 1$, $y \leftarrow x$
  for each $d \in D$ (*exploratory moves from x*)
    if $f(y + \Delta d) < f(y)$ **then** $y \leftarrow y + \Delta d$
  end for
  if $f(y) < f(x)$ **then** (*pattern move along $y - x$*)
    $z \leftarrow y + (y - x)$
    for each $d \in D$ (*exploratory moves from z*)
      if $f(z + \Delta d) < f(z)$ **then** $z \leftarrow z + \Delta d$
    end for
    if $f(z) < f(y)$ **then** $x \leftarrow z$ **else** $x \leftarrow y$
  else $\Delta \leftarrow \Delta/2$

end while

RETURN: x (miglior punto determinato)

Esempio su Funzione di Broyden



Convergenza di Hooke&Jeeves

Nota bene: Come per i metodi precedenti, nel metodo di H&J

- il passo è ridotto solo quando il punto corrente non cambia
- le iterate, se il passo rimane costante, appartengono ad una griglia

Non stupisce che H&J abbia le medesime proprietà teoriche e cioè

- $\lim_{k\to\infty} \Delta_k = 0$
- almeno un punto limite è stazionario
  - $\nabla f(\bar{x}) = 0$
  - $\liminf_{k\to\infty} \|\nabla f(x_k)\| = 0$

Testo d'esame

Si consideri il problema non vincolato seguente:

$$\min_{x,y} \; f(x,y),$$

con $f(x,y) = \max\{x^2 + y^2, (x-1)^2 + y^2\}$.

Siano $x_0 = (0,0)^\top$ e $\Delta_0 = 1$, il punto ed il passo iniziali del metodo **Compass Search**.

- Scrivere i punti di tentativo (e relativi valori di funzione) del metodo nella sua prima iterazione.
- Scrivere il punto x_1, determinato dal metodo alla fine della prima iterazione.

Siano ora $x_0 = (0,0)^\top$ e $\Delta_0 = 0.5$.

- Scrivere i punti di tentativo (e relativi valori di funzione) del metodo nella sua prima iterazione.
- Scrivere il punto x_1, determinato dal metodo alla fine della prima iterazione.

Un metodo generale

INPUT: x_0, Δ_0, Δ_{min}, $\mathtt{maxit}$, $D = \{\pm e_i, i = 1, \dots, n\}$

$k \leftarrow 0$

while $k \leq \mathtt{maxit}$ **and** $\Delta_k \geq \Delta_{min}$ **do**

if $\boxed{\exists\ y_k \text{ s.t. } f(y_k) \leq f(x_k) - \gamma\Delta_k}$ **then**

$\Delta_{k+1} \leftarrow \Delta_k$

elseif $\boxed{\exists\ \bar{d} \in D \text{ s.t. } f(x_k + \Delta_k \bar{d}) \leq f(x_k) - \gamma\Delta_k^2}$ **then**

$y_k \leftarrow x_k + \Delta_k \bar{d}$, $\Delta_{k+1} \leftarrow \Delta_k$

else

$y_k \leftarrow x_k$, $\Delta_{k+1} \leftarrow \Delta_k/2$

endif

$\boxed{\text{Find } x_{k+1} \text{ s.t. } f(x_{k+1}) \leq f(y_k)}$

$k \leftarrow k+1$

end while

RETURN: $\{x_k\}, \{\Delta_k\}$ successioni di punti e passi

Convergenza

- $\lim_{k\to\infty} \Delta_k = 0$
- $\liminf_{k\to\infty} \|\nabla f(x_k)\| = 0$

Un metodo generale

$\textsc{Input}$: x_0, Δ_0, Δ_{min}, $\texttt{maxit}$, $D = \{\pm e_i, i = 1, \dots, n\}$

$k \leftarrow 0$

while $k \leq \texttt{maxit}$ **and** $\Delta_k \geq \Delta_{min}$ **do**

  if $\boxed{\exists\ y_k \text{ s.t. } f(y_k) \leq f(x_k) - \gamma\Delta_k}$ **then**

    $\Delta_{k+1} \leftarrow \Delta_k$

  elseif $\boxed{\exists\ \bar{d} \in D \text{ e } \alpha \geq \Delta_k \text{ s.t. } f(x_k + \alpha\bar{d}) \leq f(x_k) - \gamma\alpha^2}$

  then

    $y_k \leftarrow x_k + \alpha\bar{d}$, $\Delta_{k+1} \leftarrow \alpha$

  else

    $y_k \leftarrow x_k$, $\Delta_{k+1} \leftarrow \Delta_k/2$

  endif

  $\boxed{\text{Find } x_{k+1} \text{ s.t. } f(x_{k+1}) \leq f(y_k)}$

  $k \leftarrow k + 1$

end while

$\textsc{Return}$: $\{x_k\}, \{\Delta_k\}$ successioni di punti e passi

Convergenza

- $\lim_{k \to \infty} \Delta_k = 0$
- $\liminf_{k \to \infty} \|\nabla f(x_k)\| = 0$

Il metodo di Nelder-Mead

Alla generica iterazione k lo stato dell'algoritmo è dato da:

$$X_k = \{x_1, x_2, \dots, x_{n+1}\}$$

indichiamo $f_i = f(x_i)$ e supponiamo X_k ordinato in modo che

$$f_1 \le f_2 \le \cdots \le f_{n+1}.$$

Ricordiamo l'espressione del "centroide" dei primi n punti in X_k

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} x_i$$

Idea: Sfruttare x_{n+1} e $\bar{x}$ per cercare un punto "migliore" di x_{n+1}

Il metodo di Nelder-Mead

Dato un parametro μ, definiamo

$$x(\mu) = \bar{x} + \mu(\bar{x} - x_{n+1})$$

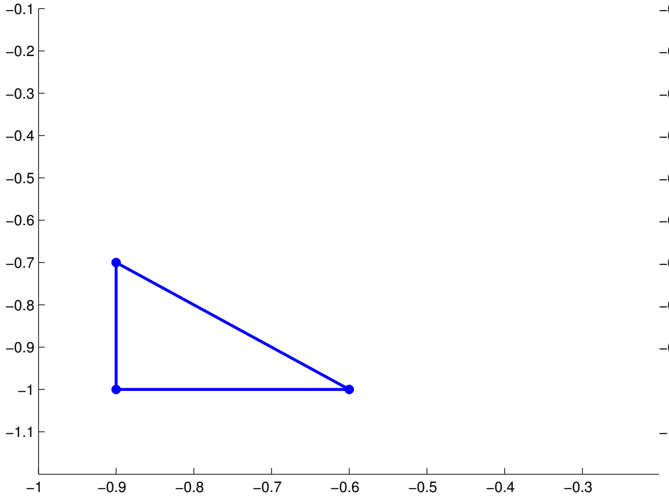
Il metodo usa: $-1 < \mu_{ic} < 0 < \mu_{oc} < \mu_r < \mu_e$ e

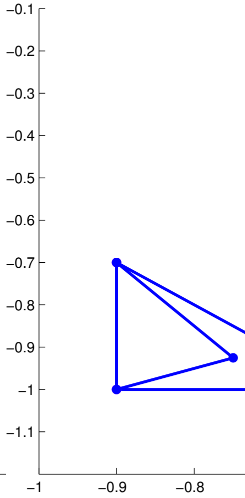
$$\begin{array}{lcclcc}
\text{(inner contraction)} & x^{ic} & = & x(\mu_{ic}), & f^{ic} & = & f(x^{ic}) \\
\text{(outer contraction)} & x^{oc} & = & x(\mu_{oc}), & f^{oc} & = & f(x^{oc}) \\
\text{(reflect)} & x^{r} & = & x(\mu_{r}), & f^{r} & = & f(x^{r}) \\
\text{(expand)} & x^{e} & = & x(\mu_{e}), & f^{e} & = & f(x^{e})
\end{array}$$

Iterazione k

- Se $\boxed{f_1 \leq f^r < f_n}$, allora $X_{k+1} = X_k \setminus \{x_{n+1}\} \cup \{x^r\}$ **FINE**
- Se $\boxed{f^r < f_1}$, allora
    - Se $f^e < f^r$, allora $X_{k+1} = X_k \setminus \{x_{n+1}\} \cup \{x^e\}$ **FINE**
    - altrimenti $X_{k+1} = X_k \setminus \{x_{n+1}\} \cup \{x^r\}$ **FINE**
- Se $\boxed{f_n \leq f^r < f_{n+1}}$, allora
    - Se $f^{oc} \leq f^r$, allora $X_{k+1} = X_k \setminus \{x_{n+1}\} \cup \{x^{oc}\}$ **FINE**
    - altrimenti **shrink**
- Se $\boxed{f_{n+1} \leq f^r}$, allora
    - Se $f^{ic} < f_{n+1}$, allora $X_{k+1} = X_k \setminus \{x_{n+1}\} \cup \{x^{ic}\}$ **FINE**
    - altrimenti **shrink**
- **shrink**:
    - $X_{k+1} = \{x_1, \hat{x}_2, \ldots, \hat{x}_{n+1}\}$ dove
    - $\hat{x}_i = x_1 + \gamma(x_i - x_1)$, $i = 2, \ldots, n+1$, $\gamma \in (0,1)$

Esempio su Funzione di Broyden





Esercizio

Sia

$$
\begin{aligned}
X &= \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \right\} \\
F &= \{ \quad 3, \quad\quad 7, \quad\quad 1, \quad \}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
X &= \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right\} \\
F &= \{ \quad 1, \quad\quad 3, \quad\quad 7, \quad \}
\end{aligned}
$$

Il centroide $\bar{x}$ di x_1 e x_2 (dopo il riordino) è

$$
\bar{x} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1/2 \end{pmatrix}
$$

Il metodo considera i punti

$$
x(\mu) = \bar{x} + \mu d = \bar{x} + \mu(\bar{x} - x_3)
$$

Esercizio

- si calcola $d = \bar{x} - x_3 = (1,\ -1/2)^\top$
- si calcola $x_r = x(1) = \bar{x} + d = (2,\ 0)^\top$
- si calcola $x_e = x(2) = \bar{x} + 2d = (3,\ -1/2)^\top$
- si calcola $x_{oc} = x(1/2) = \bar{x} + 1/2d = (3/2,\ 1/4)^\top$
- si calcola $x_{ic} = x(-1/2) = \bar{x} - 1/2d = (1/2,\ 3/4)^\top$

Nelder&Mead

In $\mathbb{R}^2$ siano dati i seguenti punti:

$$x_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, x_2 = \begin{pmatrix} 3 \\ 2 \end{pmatrix}, x_3 = \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \end{pmatrix},$$

a cui corrispondono: $f(x_1) = 1$, $f(x_2) = 3$, $f(x_3) = 5$.

Determinare i punti x_r, x_e, x_{oc} e x_{ic} utilizzati nel metodo di Nelder&Mead

È un “buon” metodo?

La risposta è:

- generalmente **Si**
- però non ha proprietà di convergenza a punti stazionari
- esistono contro-esempi sui quali converge a punti **NON** stazionari
- p.es. la funzione di McKinnon

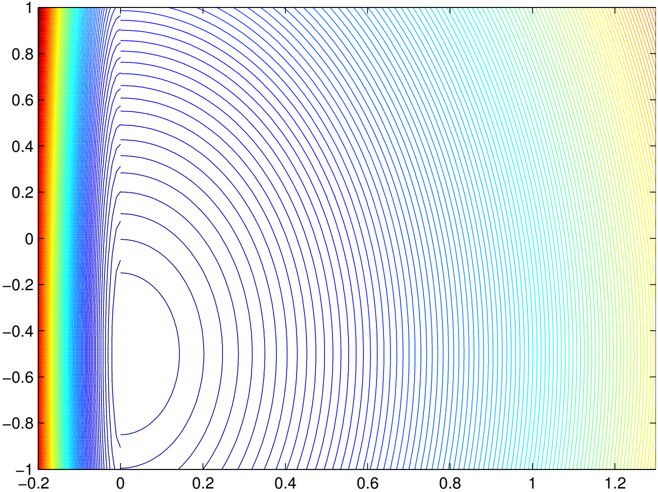
La funzione di McKinnon

$$f(x,y) = \begin{cases} \theta\phi|x|^\tau + y + y^2 & \text{se } x \leq 0 \\ \theta x^\tau + y + y^2 & \text{se } x > 0 \end{cases}$$

- strettamente convessa per $\tau > 1$
- continuamente differenziabile per $\tau > 1$
- due volte cont. differenziabile per $\tau > 2$
- tre volte cont. differenziabile per $\tau > 3$

La funzione di McKinnon

Per $\tau = 2$, $\theta = 6$, $\phi = 60$, la funzione è

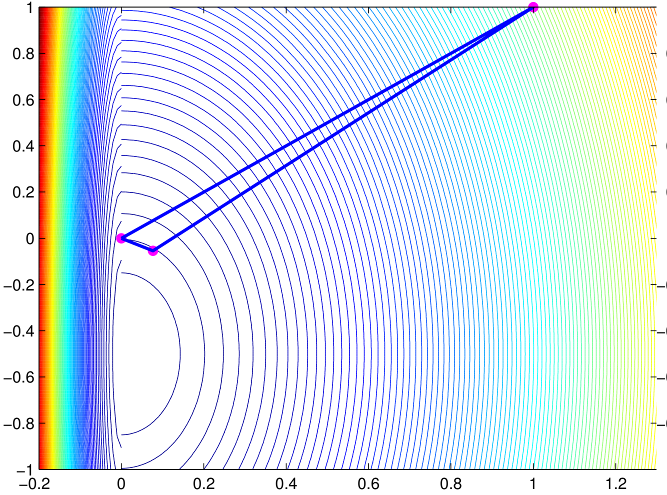


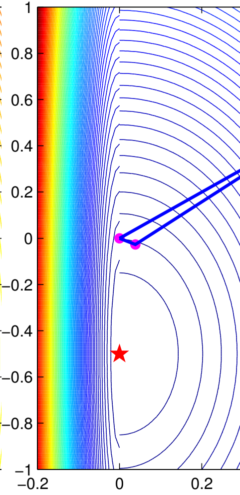
La funzione di McKinnon

Se inizializziamo il metodo di Nelder-Mead con il simplesso

$$X = \left\{ \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \frac{1+\sqrt{33}}{88} \\ \frac{1-\sqrt{33}}{88} \end{pmatrix}, \right\}$$

La funzione di McKinnon



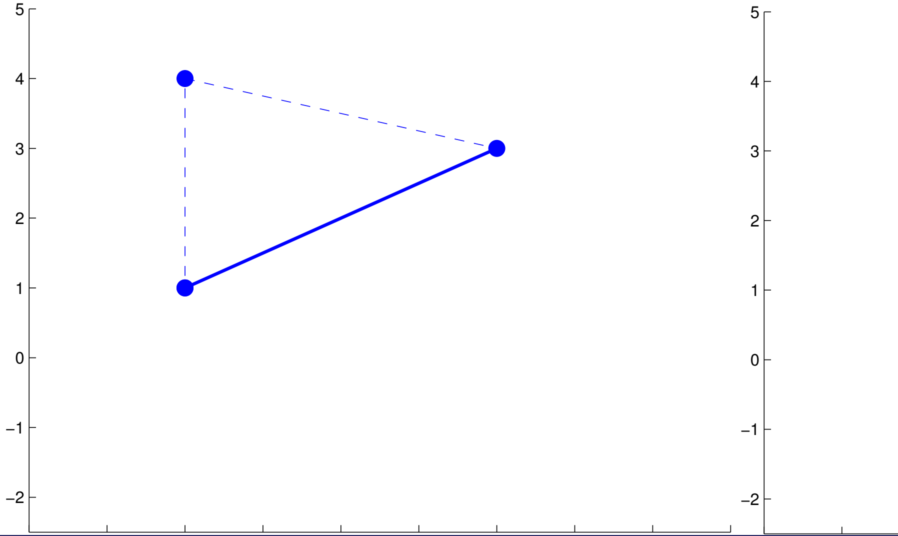


Perchè...

- Compass Search "funziona" ?
- Hooke & Jeeves "funziona" ?
- Nelder & Mead "**non** funziona" (teoricamente) ?

Cosa "davvero" distingue i primi due dal terzo ?

Perchè...



... e quindi ...

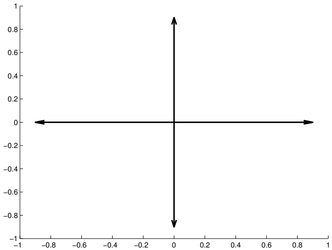
Quando $D = \{\pm e_1, \pm e_2, \ldots, \pm e_n\}$

$$\kappa(D) = \frac{1}{\sqrt{n}} > 0$$

Comunque scelto un $v \in \mathbb{R}^n$, esiste $d \in D$ tale che

$$\frac{v^\top d}{\|v\|\|d\|} = \cos\theta(d, v) \geq \kappa(D) > 0$$

Quando $v = -\nabla f(x) \neq 0$, esiste sempre una direzione $d \in D$ **di discesa**



... e quindi ...

Quando $D = \{\text{vedi figura}\}$

$$\kappa(D) \leq 0$$

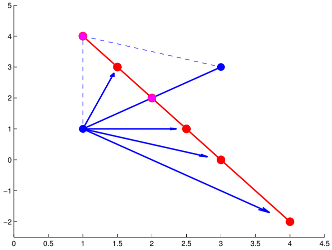
esistono $v \in \mathbb{R}^n$ tali che, per ogni $d \in D$, si ha

$$\frac{v^\top d}{\|v\|\|d\|} = \cos\theta(d, v) \leq 0$$

Potrebbe capitare che $\nabla f(x) \neq 0$, e ogni $d \in D$ è tale che

$$-\nabla f(x)^\top d \leq 0$$

cioè **nessuna** dir. in D è **di discesa**



... e quindi ...

per il metodo **compass search** che usa

- $D = \{\pm e_1, \ldots, \pm e_n\}$,
- $\kappa(D) = 1/\sqrt(n) > 0$

quando il punto corrente **non** è stazionario ($\nabla f(x) \neq 0$)

- esiste sempre (almeno) una direzione $d \in D$ che è **di discesa**

$$\nabla f(x)^\top d < 0$$

- per passi Δ sufficientemente piccoli **deve accadere**

$$f(x + \Delta d) < f(x)$$

cioè il punto x corrente (se non-stazionario) prima o dopo viene aggiornato

... e quindi ...

per il metodo **Nelder&Mead** che usa

- D t.c. $\kappa(D) \leq 0$

anche se il punto corrente **non** è stazionario ($\nabla f(x) \neq 0$)

- le direzioni $d \in D$ potrebbero tendere a direzioni $\bar{d}$ che **non** sono di discesa
$$\nabla f(x)^\top \bar{d} \geq 0$$
- anche per spostamenti piccolissimi (i.e. punti in X vicinissimi) nessuno dei punti x_r, x_e, x_{oc}, x_{ic} migliora il valore $f(x)$

cioè il punto x corrente non-stazionario non viene **mai** aggiornato!!