Otto von Guericke Universität Magdeburg

Prozessoptimierung

Projektübung

Abgabe bis zum: 8. Januar 2015

6. Januar 2015

Autoren
Pascal Bock
Marius Hörnschemeyer
Marianne Stecklina

Dozent
Dr. Kai höffner

Übungsleiter
Dipl. Ing. Holger eisenschmidt

Inhaltsverzeichnis

1 Multiple Choice Fragen

Tabelle 1.1: richtige Antwortmöglichkeiten bei Aufgabe 1

Aufgabe	richtige Antwort
1.1	b
1.2	b,c
1.3	a,d
1.4	b,c

2 Gradientenmethoden

2.1 Bedingungen an die Suchrichtung

Die Suchrichtung $v^{(k)}$ des k-ten Iterationsschrittes muss die sogenannte Abstiegsbedingung erfüllen. Die Funktionswerte müssen auf einem zulässigen Intervall um den Startpunkt in dieser Richtung abnehmen.
Dazu muss gelten:

$$\left(v^{(k)}\right)^T \cdot F_x^{(k)} < 0 \tag{2.1}$$

Dabei ist $F_x^{(k)}$ der Gradient der Funktion $F(x)$:

$$\left(v^{(k)}\right)^T = \begin{pmatrix} v_1^{(k)} \\ \vdots \\ v_n^{(k)} \end{pmatrix}^T = \begin{pmatrix} v_1^{(k)} & \cdots & v_n^{(k)} \end{pmatrix} \tag{2.2}$$

$$F_x^{(k)} = \begin{pmatrix} \frac{\partial F}{\partial x_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial F}{\partial x_n} \end{pmatrix} \tag{2.3}$$

2.1.1 Methode des steilsten Abstiegs

Bei der Methode des steilsten Abstiegs wird eine Liniensuche in der Richtung durchgeführt, in der die Funktionswerte der Zielfunktion am schnellsten abnehmen.
Bei dieser Methode wird die Suchrichtung als entgegengesetzte Richtung des Gradienten definiert.

$$v^{(k)} := -F_x^{(k)} \tag{2.4}$$

Es ergibt sich für die Suchrichtung nach Gleichung 2.4,

$$\left(v^{(k)}\right)^T = -\left(F_x^{(k)}\right)^T = -\begin{pmatrix} \frac{\partial F}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial F}{\partial x_n} \end{pmatrix} \tag{2.5}$$

und für die Abstiegsbedingung folgt

$$\left(v^{(k)}\right)^T \cdot F_x^{(k)} = -\begin{pmatrix} \frac{\partial F}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial F}{\partial x_n} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \frac{\partial F}{\partial x_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial F}{\partial x_n} \end{pmatrix} \tag{2.6}$$

$$= -\left(\underbrace{\left(\frac{\partial F}{\partial x_1}\right)^2 + \cdots + \left(\frac{\partial F}{\partial x_n}\right)^2}_{||F_x^{(k)}||^2}\right) \tag{2.7}$$

$$= -\underbrace{||F_x^{(k)}||^2}_{>0} < 0 \tag{2.8}$$

Damit ist gezeigt, dass die Abstiegsbedingung nach Gleichung 2.1 erfüllt ist.
Der Betrag ist definiert als:

$$||F_x^{(k)}|| = \sqrt{\left(\frac{\partial F}{\partial x_1}\right)^2 + \cdots + \left(\frac{\partial F}{\partial x_n}\right)^2} > 0 \tag{2.9}$$

2.2 Unterproblem bei jeder Iteration

Bei jedem Iterationsschritt muss zusätzlich zur Suchrichtung auch noch die Schrittweite bestimmt werden. Diese gibt an, wie weit sich der neue Punkt vom alten Suchpunkt in Suchrichtung entfernt. Dazu können verschiedene Verfahren genutzt werden:

- Suchmethoden (z.B.: äquidistante Suche, Goldener Schnitt)
- Interpolationsverfahren (z.B.: Quadratische Interpolation, Hermitesche Interpolation)

2.2.1 Simplex-Verfahren nach Nelder-Mead

Das Simplex-Verfahren nach Nelder-Mead ist ein abgewandeltes Simplex-Verfahren. Bei einem Simplex-Verfahren rotiert der Simplex um den 'besten' (kleinsten) Funktionswert aller Simplex-Punkte.
Für eine eindimensionale Liniensuche entspricht der Simplex einer Linie und besitzt nur zwei Simplex-Punkte. Je nachdem welcher der Punkt den 'besseren' Funktionswert hat, wird die Linie an diesem gespiegelt.
Das Simplex-Verfahren nach Nelder-Mead führt nun zu einer Reflexion, Kontraktion und Expansion der einzelnen Spiegelungen.
Das Verfahren ist daher für eine Liniensuche geeignet und kann zur Lösung des Unterproblems genutzt werden.

3 Newton-Methoden

3.1 Interpretation des Newton-Raphson-Verfahrens

3.1.1 Lineare Approximation des Gradienten (Newton-Ansatz)

Die notwendige Bedingung zur Lösung der Optimalitätsbedingung eines Optimierungsproblems lautet:

$$F_x(x) = 0 \tag{3.1}$$

Gleichung 3.1 folgt aus der Taylorreihenentwicklung (TRE) der mathematischen Bedingung für ein Optimum am Punkt x' und der Bedingung, dass in linearer Näherung die Funktionswerte für ein Minimum nicht kleiner werden dürfen.

$$\underbrace{F_x^T(x') \cdot \Delta x}_{\text{lin. Term TRE}} = 0 \text{ , } \Delta x \neq 0 \tag{3.2}$$

$$F_x(x') = 0 \tag{3.3}$$

Wird nun wiederum Gleichung 3.1 am Punkt $x = x^{(k)}$ linear approximiert, so erhalten wir:

$$\tilde{F}_x = F_x(x^{(k)}) + F_{xx}(x^{(k)}) \cdot \Delta x^{(k)} = 0 \tag{3.4}$$

3.1.2 Quadratische Approximation der Zielfunktion

Anstelle einer linearen Approximation des Gradienten kann auch die Zielfunktion selbst quadratisch approximiert werden.

$$\tilde{F} = F(x^{(k)}) + (\Delta x)^T \cdot F_x(x^{(k)}) + \frac{1}{2}(\Delta x)^T F_{xx}(x^{(k)}) \cdot \Delta x \tag{3.5}$$

Die notwendige Bedingung für ein lokales Minimum für Gleichung 3.5 lautet:

$$\tilde{F}_{\Delta x} = F_x(x^{(k)}) + F_{xx}(x^{(k)}) \cdot \Delta x^{(k)} = 0 \tag{3.6}$$

Es fällt auf, dass Gleichung 3.6 genau Gleichung 3.4 entspricht. ((3.4) = (3.6))

3.1.3 Iterationsvorschrift

Durch Umstellen von Gleichung 3.4 beziehungsweise Gleichung 3.6 erhält man:

$$F_{xx}(x^{(k)}) \cdot \Delta x^{(k)} = -F_x(x^{(k)}) \tag{3.7}$$

$$\Delta x^{(k)} = -F_{xx}(x^{(k)})^{-1} \cdot F_x(x^{(k)}) \tag{3.8}$$

Der Newtonschritt ist damit

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \Delta x^{(k)} \tag{3.9}$$

und 'beinhaltet' sowohl Suchrichtung als auch Schrittweite.

3.2 Schwierigkeiten bei der Anwendung des Newton-Raphson-Verfahrens

Bei der Anwendung des Newton-Raphson-Verfahrens kommt es zu folgenden Problemen:

- Berechnung der Inversen von F_{xx} ist aufwendig (siehe Gleichung 3.8)
- Konvergenz in ein Minimum ist nicht in allen Fällen gewährleistet. Dazu muss die Hesse-Matrix $F_{xx}(x)$ am Punkt $x = x^{(k)}$ positiv definit sein
- Oszillationen in 'engen Tälern' um das Minimum

3.2.1 Abhilfe durch Quasi-Newton-Verfahren

Die sogenannten Quasi-Newton-Verfahren schaffen bei den oben genannten Problemen Abhilfe.
Die Hesse-Matrix und deren Inverse wird durch $F_{xx} \approx B$ und $F_{xx}^{-1} \approx H$ approximiert. Die verwendeten Verfahren (DFP-Formel, BFGS-Formel) sind weniger rechenaufwendig und sichern eine positiv definite Matrix ab.