5. Numerický experiment

5.1. Minimalizácia bikvadratickej funkcie

V teoretickej časti tejto práce je uvedený všeobecný algoritmus kvázinewtonovských formúl, ktorý je postupne konkretizovaný pre prípad Orenovej triedy formúl až do tvaru algoritmu 3. Tento algoritmus neurčuje jednoznačne parametre, ktoré v ňom vystupujú. V závere tretej a štvrtej kapitoly sme navrhli stratégie na voľbu parametrov tohto algoritmu . Odvodenie stratégii bolo motivované správaním sa algoritmu pri minimalizácii kvadratickej funkcie, ktorej minimum vo všeobecnosti určí za n krokov.

V tejto kapitole je algoritmus 3 aplikovaný na bikvadratickú funkciu tvaru:

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{4}(\mathbf{x}^T\mathbf{G}_1\mathbf{x})^2 + \frac{1}{2}(\mathbf{x}^T\mathbf{G}_2\mathbf{x}) + \mathbf{x}^T\mathbf{h}_1 . \qquad (1)$$

Orenov parameter γ a Broydenov parameter φ je volený na základe Stratégie 1 a Stratégie 2 z časti 3.8, čím dostávame dve Orenove formuly.

Tieto Orenove formuly sme porovnávali s DFP, BFGS a SR1 formulami. Všetky spomínané formuly patria do Orenovej triedy formúl. DFP zodpovedá voľbe Orenovho parametra $\gamma = 1$ a Broydenovho parametra $\varphi = 1$. BFGS zodpovedá voľbe parametrov $\gamma = 1$ a $\varphi = 1$ a SR1 zodpovedá voľbe parametrov $\gamma = 1$ a φ je definované vzťahom (4.6).

Použitý algoritmus

Na začiatku algoritmu je náhodne zvolený optimálny bod $\mathbf{x}_{opt}$. Pre tento bod je postupne vygenerovaná sada 100 úloh s rôznymi štartovacími bodmi $\mathbf{x}_0$, ktorých vzdialenosť od bodu minima sme vopred určili. Každá táto úloha ja riešená pomocou všetkých vyššie uvedených formúl. Počet kvázinewtonovských iterácií pre úlohu je z hora ohraničený násobkom rozmeru úlohy. Druhým kritériom (ukončenia minimalizačného procesu) je veľkosť normy gradientu funkcie v jednotlivých bodoch priblíženia.

Na nájdenie optimálneho kroku je použitá metóda zlatého rezu (viď [1]) s presnosťou $\varepsilon = 10^{-6}$.

Výstupom úlohy je aproximácia $\mathbf{x}^*$ bodu minima, norma vektora $\Delta\mathbf{x} = \mathbf{x}^* - \mathbf{x}_{opt}$ a počet vykonaných kvázinewtonovských iterácii. Po všetkých úlohách je vypočítaná priemerná norma vektora $\Delta\mathbf{x}$ a priemerný počet iterácií pre celú sadu úloh.

5.2. Dosiahnuté výstupy

V algoritme, ako je popísaný v predchádzajúcej časti, máme možnosť meniť rozmer úlohy, vzdialenosť štartovacieho bodu od bodu minima, kritérium pre normu gradientu funkcie a maximálny počet iterácií.

Na základe tejto variability sú uvedené nasledovné výstupy.

Pre jednoduchší popis označme:

- n - rozmer úlohy
- ε - kritérium pre normu gradientu funkcie (1)
- k_{priem} - priemerný počet iterácií
- k_{max} - maximálny počet iterácií
- vzdialenosť - $\| \mathbf{x}_0 - \mathbf{x}_{opt} \|$ - vzdialenosť optimálneho bodu od začiatočného bodu
- priem. odchýlka - priemerná norma vektora $\| \mathbf{x}^* - \mathbf{x}_{opt} \|$
- max. odchýlka - maximálna norma vektora $\| \mathbf{x}^* - \mathbf{x}_{opt} \|$ dosiahnutá danou metódou v priebehu sady úloh

Vzdialenosť 100.

a) n = 10, ε = 0.0001, k_{max} = 30,

Metóda	priem. odchylka	max. odchylka	k*
Oren – Strat.1	2.3E-0010	4.4E-0009	29
Oren – Strat.2	7.0E-0010	5.2E-0008	29
DFP	5.2E-0011	1.5E-0009	27
BFGS	3.4E-0011	4.5E-0010	27
SR1	6.0E-0011	1.7E-0009	27

b) n = 10, ε = 0.000001, k_{max} = 30,

Metóda	priem. odchylka	max. odchylka	k*
Oren – Strat.1	2.4E-0010	3.5E-0009	30
Oren – Strat.2	5.1E-0010	2.6E-0008	30
DFP	1.2E-0010	2.7E-0009	29
BFGS	7.1E-0011	8.7E-0010	29
SR1	2.1E-0010	1.1E-0008	29

c) n = 15, ε = 0.0001, k_{max} = 45,

Metóda	priem. odchylka	max. odchylka	k*
Oren – Strat.1	1.1E-0011	9.1E-0011	39
Oren – Strat.2	9.9E-0012	5.7E-0011	39
DFP	7.8E-0012	5.6E-0011	35
BFGS	8.1E-0012	3.4E-0011	35
SR1	6.7E-0012	2.9E-0011	36

d) n = 15, ε = 0.000001, k_{max} = 75,

Metóda	priem. odchylka	max. odchylka	k*
Oren – Strat.1	1.3E-0013	4.2E-0013	43
Oren – Strat.2	1.3E-0013	3.7E-0013	43
DFP	9.1E-0014	3.3E-0013	39
BFGS	9.2E-0014	3.5E-0013	39
SR1	8.5E-0014	5.3E-0013	39

Vzdialenosť 200.

a) n = 15, ε = 0.000001, k_{max} = 75,

Metóda	priem. odchylka	max. odchylka	k*
Oren – Strat.1	1.7E-0013	5.9E-0013	44
Oren – Strat.2	1.6E-0013	4.4E-0013	43
DFP	9.4E-0014	4.2E-0013	45
BFGS	1.1E-0013	4.0E-0013	45
SR1	9.7E-0014	6.4E-0013	45

5.3. Záver experimentu

Z dosiahnutých výstupov môžeme konštatovať, že konvergencia metódy v prípade Orenových formúl so stratégiami 1 a 2 bola (v daných prípadoch) zrovnateľná s konvergenciou metódy pri použití DFP, BFGS a SR1 formúl. Vo všetkých prípadoch bola o niečo horšia, s výnimkou posledného, kedy s požadovanou presnosťou skonvergovala v priemere o dve iterácie rýchlejšie. Pozorované zaostávanie Orenových formúl so stratégiami 1 a 2 môže byť spôsobené ich väčšou náročnosťou z hľadiska vyhodnocovania operácii.

V kapitole 4. bola navrhnutá stratégia pre voľbu Orenovho parametra pre prípad SR1 formuly Orenovho typu. Na rovnakom experimente bola vyskúšalná aj táto stratégia. Jej výstupy tu nie sú uvedené. Môžme však konštatovať, že táto stratégia nekonvergovala pre žiadnu úlohu.