Harjoitus 9: Optimointi I (Matlab)

MS-C2107 Sovelletun matematiikan tietokonetyöt 2021

Aalto University
School of Science

Systems
Analysis Laboratory

Harjoituksen aiheita

- Optimointimallin muodostaminen
- Optimointitehtävien luokittelu
- Optimointitehtävien ratkaiseminen Matlabilla

Oppimistavoitteet

- Tiedät mitä on optimointi ja mitkä ovat optimointimallin osat
- Osaat käyttää Matlabin valmiita optimointityökaluja
- Osaat toteuttaa yksinkertaisen optimointialgoritmin
- Osaat analysoida optimoinnin tuloksen herkkyyttä mallin parametrien suhteen

Mitä on optimointi?

- Optimoinnissa pyritään hakemaan ongelmalle paras (eli optimaalinen) ratkaisu.

Optimointimallin osat

- Päätösmuuttujat (Engl. Decision variables)
- Mahdolliset rajoitukset (Engl. Constraints) koskien päätösvaihtoehtoja
- Kohdefunktio (Engl. Objective function) jota maksimoidaan tai minimoidaan

Esimerkki: väännetään rautalangasta

- L:n pituisesta rautalangasta on väännettävä suorakaide, jonka pinta-ala on suurin mahdollinen.
  - päätösmuuttujat:
    x : leveys [m]
    y : korkeus [m]
  - rajoitukset:
    $2(x+y)=L$: suorakaiteen kehän pituus on L
    $x, y \geq 0$: muuttujat positiivisia
  - kohdefunktio:
    $f(x,y)=xy$: suorakaiteen pinta-ala

... Esimerkki

- Optimointitehtävä:

$$\begin{array}{llcr} \max\limits_{x,y} & f(x,y) & = & xy \\ \text{st.} & 2(x+y) & = & L \\ & x,y & \geq & 0 \end{array}$$

  st. : ”subject to”

- Päätösmuuttujien arvot, jotka toteuttavat tehtävän yhtälö- ja epäyhtälörajoitukset muodostavat tehtävän käyvän joukon (Engl. search space tai choice set).
- Tehtävän ratkaisu: $x = y = L/4$. Rautalangasta kannattaa siis taivuttaa neliö.

Optimointitehtävien luokittelu

Lineaarinen optimointi

- Kohdefunktio ja rajoitukset lineaarisia
- Esim. leipomo maksimoi kinuski- ja suklaakakuista saatavan myyntituoton
- MS-E2121 Linear optimization

Epälineaarinen optimointi

- Kohdefunktio ja/tai rajoitukset epälineaarisia
- Esim. etsi muoto liikkuvalle kappaleelle siten että ilmanvastus minimoituu
- MS-E2122 Nonlinear optimization

... Optimointitehtävien luokittelu

Monitavoiteoptimointi

- Yhden kohdefunktion sijasta monta kohdefunktiota
- Esim. portfolion optimointi: halutaan sekä maksimoida tuottoa että minimoida riskiä

Kokonaislukuoptimointi

- Päätösmuuttujat ovat kokonaislukuja
- Esim. Halutaan määrittää optimaalinen tilausten lukumäärä, jolla yrityksen voitto maksimoituu
- MS-E2146 Integer programming

... Optimointitehtävien luokittelu

Dynaaminen optimointi

- Päätösmuuttujat ovat funktioita toisista muuttujista, esim. ajasta
- Kohdefunktio on funktionaali, esim. integraali
- Esim. muodosta kulutus-säästöstrategia pääomalle kahden vuoden ajaksi; kulutuksesta seuraa hyöty, säästöstä korko
- MS-E2148 Dynamic optimization

Stokastinen optimointi

- Tehtävä sisältää satunnaismuuttujia.
- MS-C2111 Stochastic Processes

Optimointitehtävien ratkaiseminen

- Tehtäviä ratkaistaan analyyttisesti tai numeerisesti
- Optimointitehtävien numeerinen ratkaisu perustuu iterointiin.
  - Piste päätösmuuttujien käyvässä joukossa edustaa ratkaisukandidaattia
  - Lähdetään tietystä alkupisteestä liikkeelle
  - Lasketaan uusi piste tietyn algoritmin mukaisesti
  - Jatketaan kunnes löydetään optimipiste
- Sopii tietokoneen ratkaisukeinoksi
- Historiallisista syistä tiettyjä numeerisia ratkaisumenetelmiä kutsutaan ohjelmoinniksi (esim. lineaarinen ohjelmointi)

Optimointitehtävien ratkaisu Matlabilla

- Matlab Optimization Toolbox
  - `fminbnd`: Etsii yhden muuttujan funktion minimin annetulta väliltä.
  - `fmincon`: Etsii minimin optimointitehtävälle, jossa kohdefunktio on epälineaarinen monen muuttujan funktio ja rajoitteet mielivaltaisia yhtälö- ja epäyhtälörajoitteita.
  - `fminsearch` ja `fminunc`: Etsii minimin epälineaariselle kohdefunktiolle, kun rajoitusehtoja ei ole.
  - `linprog`: Ratkoo lineaarisia optimointitehtäviä.
  - `quadprog`: Ratkoo kvadraattisia (neliöllisiä) optimointitehtäviä.

fmincon

- `fmincon`-syntaksi:

```
X = fmincon(@(x) FUN(x,?...),X0,A,B,Aeq,Beq,LB,UB,@(x) mycon(x,?...))
```

- `FUN(x,?...)` on kohdefunktio, joka määritellään omassa m-tiedostossaan. `@(x)` kohdefunktion edessä kertoo, minkä argumentin suhteen optimointi tehdään. `?...` viittaa kohdefunktion mahdollisiin parametreihin.
- `X0` on optimointialgoritmille annettava alkuarvaus ratkaisusta
- `A,B,Aeq,Beq` liittyvät tehtävän lineaarisiin rajoitusehtoihin. `LB` ja `UB` määrittävät päätösmuuttujille ala- ja ylärajat.
- Funktion `mycon(x,?...)` avulla voi lisätä kaikenlaisia yhtälö- ja epäyhtälörajoitteita, myös epälineaarisia. `?...` viittaa mahdollisiin parametreihin.

Rautalankatehtävä Matlabissa

```
% Omaan m-tiedostoon "pintaala.m"
function A = pintaala(x)
 A = -x(1)*x(2);
% Omaan m-tiedostoon "rajoitus.m"
function [c ceq] = rajoitus(x, L)
c=[];
ceq=[2*(x(1)+x(2))-L];
% Matlabin komentoriviltä
>> L = 29.3;
>> [x,fval] = fmincon(@(x) pintaala(x),[1; L/2-1],[],[],[],[],...
[0; 0],[],@(x) rajoitus(x,L))
Local minimum found that satisfies the constraints ...
x =   7.3250
      7.3250
fval = -53.6556
```

... Rautalankatehtävä Matlabilla

- Kohdefunktiolle oltava oma funktiotiedosto
- `rajoitus`-funktiolla voisi toteuttaa myös epälineaarisia rajoitteita
- Huomaa `@`-symbolin käyttö
- Oletusarvoisesti minimoidaan; helppo muuntaa maksimoinniksi merkkimuutoksella:

funktion $f(x)$ maksimointi $\Leftrightarrow$ funktion $-f(x)$ minimointi

Tehtävä A: Öljyfirman kustannusten minimointi

- EOQ-malli (Economic Order Quantity) kuvaa yrityksen varastointi- ja tilauskustannuksia
- Mallissa kustannukset $f(x_1)$ tilauskoolla x_1, tilauskustannuksilla a_1, vuosikysynnällä b_1 ja varastointikuluilla h_1 muodostuvat seuraavasti

$$f(x_1) = \underbrace{a_1 \times \frac{b_1}{x_1}}_{\substack{\text{Kustannukset per tilaus} \times \\ \text{tilauksien lkm}}} + \underbrace{h_1 \times \frac{x_1}{2}}_{\substack{\text{varastointikulut per yksikkö} \times \\ \text{keskimäärinen varasto}}} \tag{1}$$

- Malli pätee, kun tilauskustannukset, toimitusajat sekä kysyntä ovat tasaisia yli vuoden.

Tehtävä A: Kohdefunktio

- Auta öljyfirmaa minimoimaan öljyn varastointi- ja tilauskustannuksia. Öljyä on kahta tyyppiä, jolloin EOQ malli on

$$f(x_1, x_2) = \left(\frac{a_1 b_1}{x_1} + \frac{h_1 x_1}{2}\right) + \left(\frac{a_2 b_2}{x_2} + \frac{h_2 x_2}{2}\right), \tag{2}$$

missä x_i = Öljytyypin i tilauskoko [tonnia / tilauskerta],
a_i = Öljytyypin i tilauskustannus [10 000 €/ tilauskerta],
b_i = Öljytyypin i kysyntä vuodessa [tonnia],
h_i = Öljytyypin i varastointikulut yksikköä kohti vuodessa [10 000 €/ tonni].

1. Toteuta funktio `function f = oljykustannusfunktio(x,a,b,h)` joka ottaa sisäänsä päätösmuuttujat $x = [x_1, x_2]$, parametrit $a = [a_1, a_2], b = [b_1, b_2], h = [h_1, h_2]$ ja palauttaa kustannukset.

Tehtävä A: Rajoitusehdot

- Varastointitila on rajattu ja tilausmäärien on oltava positiivisia:

$$g(x_1, x_2) = t_1 x_1 + t_2 x_2 \leq T, \tag{3}$$

$$x_1, x_2 \geq 0, \tag{4}$$

  missä t_i = vaadittava varastointitila per tonni tyypin i öljyä ja T = olemassa oleva varastointitila.

- Varaston koko $T = 24$.

Tehtävä A: Rajoitusehdot

2. Luo `function [c ceq] = oljyrajoitus(x,t,T)`. Funktio ottaa sisäänsä tilauskoot x sekä parametrit $t = [t_1, t_2]$ ja T.

- Funktion palauttaman arvon `c` tulee kertoa yhtälörajoitteen (3) vasemman- ja oikeanpuoleisen lausekkeen erotus. Aseta `ceq=[]`.
- `fmincon` hyödyntää tätä funktiota siten, että optimointin edetessä toteutuu `c <= 0`.
- Ei-negatiivisuusrajoitteet (4) toteutetaan suoraan `fmincon`:iin, jota käytetään optimaalisen tilauksen ratkaisemiseen.

Tehtävä A: Optimointi

3. Ratkaise optimaaliset arvot päätösmuuttujille x_1 ja x_2 käyttäen funktiota `fmincon`. Käytä seuraavia parametrien arvoja:

Öljytyyppi	a_i	b_i	h_i	t_i
i=1	10	2	0.4	2
i=2	6	3	0.15	4

Vinkkejä:

- Katso `!help fmincon` viimeinen esimerkki.
- Käytä apuna kohdissa 1 ja 2 luomiasi funktioita.
- Kirjoittamalla kohdefunktion eteen `@(x)` ilmaiset minkä argumentin suhteen kohdefunktiota optimoidaan.
- Käytä optimointialgoritmin alkuarvauksena $(x_1, x_2) = (4, 4)$

Tehtävä A: Optimointi

✍ Kuinka suuria tilausmäärien tulee olla, jotta öljyfirman kustannukset minimoituvat? Kuinka suuret kustannukset tällöin ovat?

Tehtävä B: Gradienttimenetelmä

- Rosenbrockin banaanifunktio on esimerkki funktiosta, jonka minimiä monet optimointialgoritmit eivät löydä.
- Tutkitaan banaanifunktion

$$f(x_1, x_2) = 10 \cdot (x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2$$

minimoimista itse toteutetulla optimointialgoritmilla, gradienttimenetelmällä.

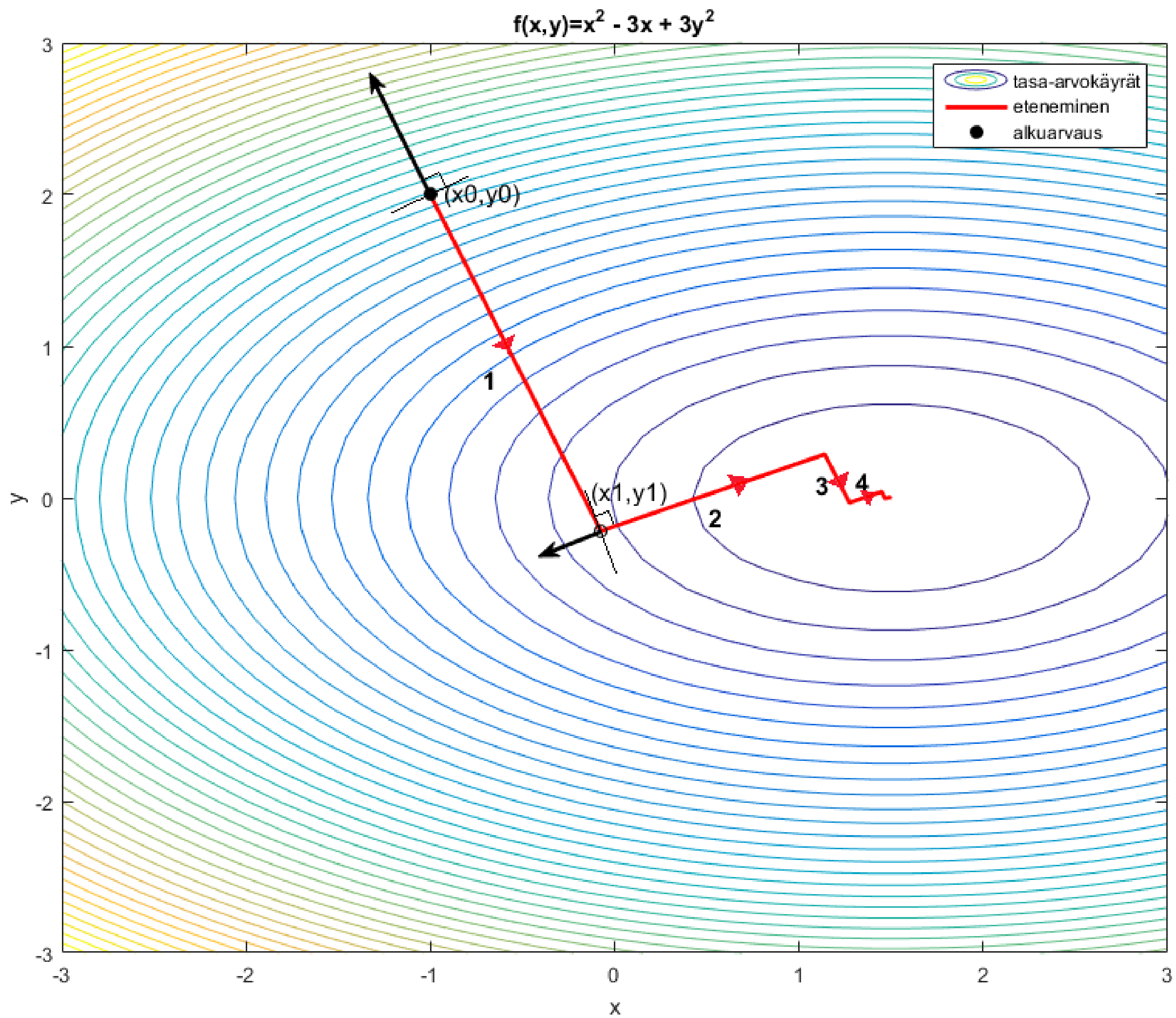
Tehtävä B: Gradienttimenetelmä

- Ratkaisukandidaattia $x(i) = [x_1(i), x_2(i)]'$ päivitetään iteratiivisesti käyttäen gradienttia.
- Pisteessä $x(i)$ lasketaan funktion gradientti $\nabla f(x_1(i), x_2(i))$ ja siirrytään gradienttia vastakkaisen suunnan mukaisesti pisteeseen $x(i+1)$, s.e.

$$\begin{bmatrix} x_1(i+1) \\ x_2(i+1) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1(i) \\ x_2(i) \end{bmatrix} - \alpha \cdot \nabla f(x_1(i), x_2(i)) \tag{5}$$

missä α on askelpituus. Askelpituus on tässä ratkaiseva, jotta ei mennä liian pitkälle tai jäädä liian lyhyeen gradientin suuntaan edetessä.

Tehtävä B: Gradienttimenetelmän kulku



Tehtävä B: Toteutus

1. Muodosta `function [grad] = gradientti(x)`, joka laskee kohdefunktion gradientin `grad=[g1;g2]` funktiolle annetussa pisteessä `x=[x1;x2]`. Gradientti on muotoa

$$\nabla f(x_1, x_2) = \begin{bmatrix} 10 \cdot 2 \cdot (x_2 - x_1^2) \cdot (-2 \cdot x_1) - 2 \cdot (1 - x_1) \\ 10 \cdot 2 \cdot (x_2 - x_1^2) \end{bmatrix}$$

2. Muodosta `function [f_uusi]=viiva(alpha,grad,x)`, joka palauttaa kohdefunktion arvon uudessa pisteessä, johon päädytään kun pisteestä `x` siirrytään `alpha`-pituinen matka suuntaan `-grad`. Askelpituus α saadaan yksiulotteiden optimointitehtävän (viivahaun) ratkaisuna. Viivahaussa haetaan α:n arvo, jolla kohdefunktio minimoituu, kun edetään `-grad` suuntaisesti.

... Tehtävä B: Toteutus

3. Kirjoita ohjelma, jolla tutkit algoritmin etenemistä, kun lähdetään alkupisteestä $(x_1, x_2) = (-1, 2)$. Askelpituus `alpha` määritetään erikseen jokaisella askeleella, käyttäen Matlabin funktiota `fminbnd`. Ohjelman runko:

```
x = zeros(2,100) % Varataan tilaa ratkaisuille
x(:,1) = [-1;2]  % 1. sarake vastaa alkupistettä
for i = 2:100 % Suoritetaan 100 askelta (iteraatiota)
     % Määritä gradientin suunta pisteessä x(:,i-1)
     grad = ???
     % Määritä askelpituus alpha minimoimalla funktiota
     % viiva(alpha,grad,x(:,i-1)) välillä 0 <= alpha <= 5
     alpha = fminbnd(@(???) minimoitava funktio?,0,5)
     x(:,i) = x(:,i-1) + ??? % Päivitä piste
end
```

Tehtävä B: Kysymyksiä

✍ Mitä pistettä gradienttimenetelmä lähestyy? Onko tämä piste funktion minimi, ja jos on, mistä tiedät sen?

✍ Kuinka monen askeleen kuluttua lähtöarvauksesta on algoritmi päässyt banaanilaakson pohjalle ja kulku merkittävästi hidastunut?

🖮 Liitä vastauksiisi kuva josta näkyy iteraation kulku gradienttimenetelmällä (iteroidut pisteet ja niitä yhdistävä murtoviiva) sekä kohdefunktion tasa-arvokäyrät (x_1, x_2)-tasossa. Nimeä akselit. Käytä tasa-arvokäyrien piirtämisessä komentoja `meshgrid` ja `contour`. Esimerkiksi funktiolle $xe^{-x^2-y^2}$ saat piirrettyä tasa-arvokäyrät näin:

```
[X,Y] = meshgrid(-2:.2:2, -2:.2:2);
Z = X .* exp(-X.^2 - Y.^2);, contour(X,Y,Z,100);
```

Kotitehtävä: Jatkoa EOQ-tehtävälle

Esitit EOQ-mallin tulokset öljy-yrityksen johdolle. Esittämäsi tulos ei kuitenkaan riitä johtoportaalle, joka vaatii sinulta lisää.

- Johtoporras esittää seuraavan kysymyksen:
  Mitä kustannuksille käy, jos yritys muuttaa varaston kokoa, s.e. $T \in \{14, 15, ..., 34\}$*?*

1. Tutki miten optimoidut kustannukset käyttäytyvät T:n funktiona.

- Luo `function fval = optimi_kustannus(a,b,h,t,T)`, joka palauttaa optimoidut kustannukset annetuilla parametreilla. (Vinkki: Käytä tunnilla tehtyjä funktioita ja `fmincon`:illa toteutettua optimointia.)

Kotitehtävä: Jatkoa EOQ-tehtävälle

- Piirrä kuvaaja optimoiduista kustannuksista, kun `T=14:1:34`.

🖨 Liitä kuva kustannuksista varastokoon funktiona. Nimeä akselit. Kommentoi kuvaajaa.

✍ Kuinka paljon T:n kasvattaminen 24:stä 30:een saa korkeintaan maksaa, jotta investointi tuottaisi itsensä takaisin vuoden aikana?

Kotitehtävä: Kustannusten kehitys tilauskustannusten funktiona

Yrityksen johtoporrasta kiinnostaa lisäksi, miten optimoidut kustannukset muuttuisivat, jos tilauskustannukset a_1, a_2 muuttuvat, mutta varastokoko ei muutu, eli $T = 24$.

2. Tehtävänä on visualisoida optimoidut kustannukset, kun $a_1 \in \{8, 8.25, ..., 12\}$ ja $a_2 \in \{4, 4.25, ..., 8\}$. Toteutus täydentämällä seuraavan kalvon koodinpätkää (sisemmän for-silmukan sisään).

```
a1_grid=[8:0.25:12]; a2_grid=[4:0.25:8];
F=zeros([length(a2_grid),length(a1_grid)]);
for i=1:length(a1_grid)
    for j=1:length(a2_grid)
        a(1)=a1_grid(i);
        a(2)=a2_grid(j);
        F(j,i)= %Tallenna F(j,i):hin optimi näillä a(1)
                %ja a(2) arvoilla
    end
end
%Pinnan piirto
surf(a1_grid,a2_grid,F)
colorbar %väriselite
%Nykytilanteen merkkaus 3D-kuvaan
text(10, 6.05, 10.3966,'\leftarrow Cost now','FontSize', 16)
xlabel('a1')
ylabel('a2')
```

Kotitehtävä: Kysymyksiä

✍ Selitä mitä edellisen kalvon matlab-komennon `text` parametrit tekevät.

🖩 Liitä piirtämäsi kuva. Käännä sitä sopivaan asentoon matlabin figure-ikkunan työkalulla Rotate 3D (Tools → Rotate 3D). Nimeä akselit sopivasti. Kommentoi kuvaa.

✍ Miten optimoidut kustannukset riippuvat tilauskustannuksista?

Yritykselle tarjoutuu mahdollisuus vaihtaa toimittajaan, jolta tilattaessa kustannukset olisivat $a_1 = 9.5$, $a_2 = 5$. Lue kuvasta mitkä kustannukset olisivat tällöin. Vinkki: Tools → Data Cursor

✍ Kuinka paljon yritys säästäisi vuosittain, jos se vaihtaisi toimittajaa?