Aalto-yliopisto
Perustieteiden korkeakoulu

Optimization techniques for the moment-constrained entropy minimization problem on the sphere (valmiin työn esittely)

Aleksi Porokka

30.06.2014

Ohjaaja: *Dr. Graham Alldredge*

Valvoja: *Prof. Harri Ehtamo*

Systeemianalyysin laboratorio

Tutkimusongelman esittely

- Halutaan ratkaista konveksi optimointiongelma muotoa

$$\underset{\alpha \in \mathbb{R}^{N+1}}{\text{minimize}} \; f(\boldsymbol{\alpha}) = \langle \exp(\boldsymbol{\alpha}^T \mathbf{m}) \rangle - \boldsymbol{\alpha}^T \mathbf{u}.$$

  jossa **u** on momenttivektori ja **m** koostuu niin kutsutuista spherical harmonics-funktioista

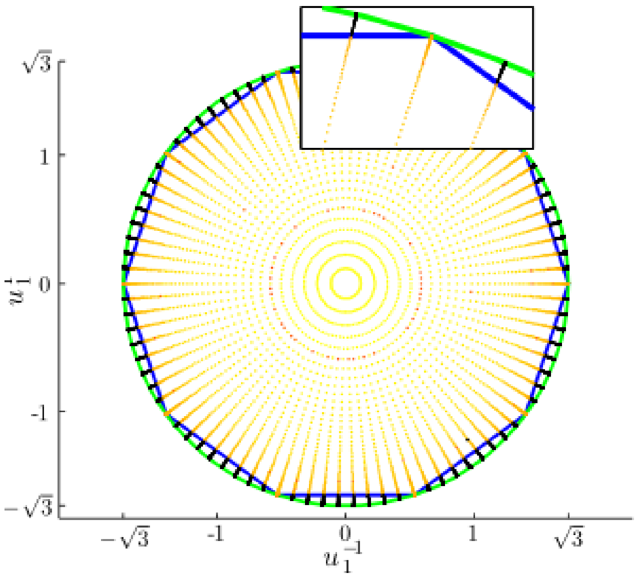
- Pitää johtaa ehdot sille, että milloin vektorin **u** alkiot ovat positiivisen jakauman momentteja
- Esim. jos käytetään vain momentteja ensimmäiseen asteeseen asti, niin ehto on muotoa $\|\mathbf{u}_1\|_2 \leq \sqrt{3}$

Tutkimusongelman esittely jatkuu

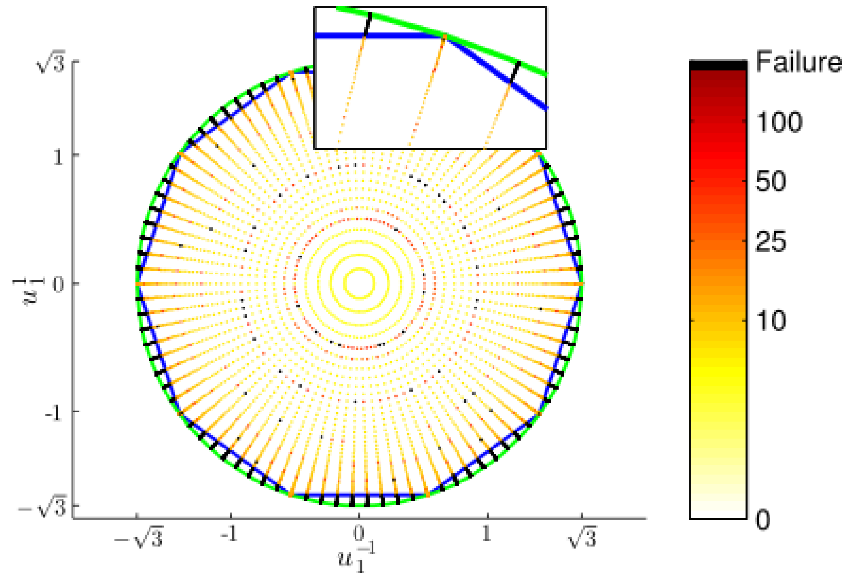
- Työssä on vertailtu Adaptive Cubic Overestimation (ACO) algoritmia ja Newtonin menetelmää optimointitehtävän, jossa käytetään korkeintaan toisen asteen momentteja, ratkaisemiseen
- ACO mallintaa kohdefunktion kolmannen asteen polynomilla $f(\alpha) + \mathbf{s}^T \mathbf{g} + \frac{1}{2}\mathbf{s}^T H \mathbf{s} + \frac{1}{3}\sigma \|\mathbf{s}\|_2^3$
- Kun taas Newtonin menetelmä käyttää toisen asteen polynomia $f(\alpha) + \mathbf{s}^T \mathbf{g} + \frac{1}{2}\mathbf{s}^T H \mathbf{s}$

Tulokset

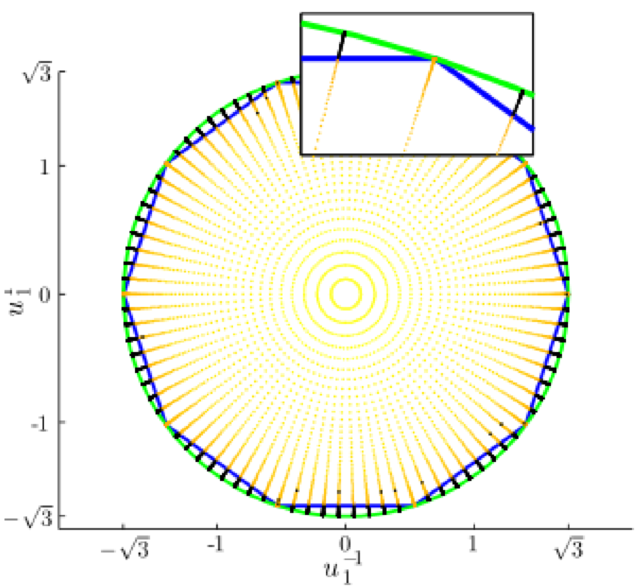
- Yleisvertailu kuinka hyvin kuinka hyvin ACO ja Newtonin menetelmä pystyvät ratkomaan tehtäviä, kun käytetään momentteja joko ensimmäiseen tai toiseen asteeseen asti
- Toisen asteen momentteja on viisi, joten kuvissa kolme momenteista on vakiota ja kahta muuta varioidaan



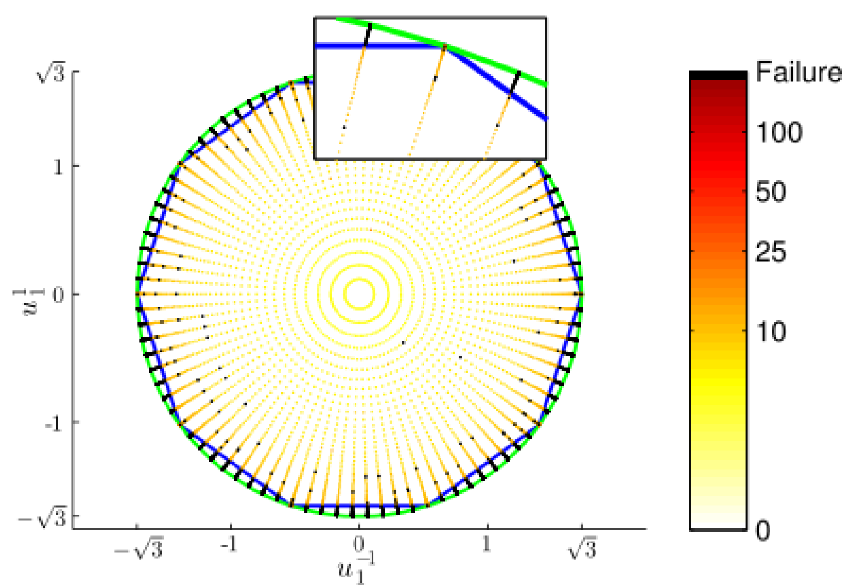
(a) The ACO algorithm with $\tau = 10^{-8}$



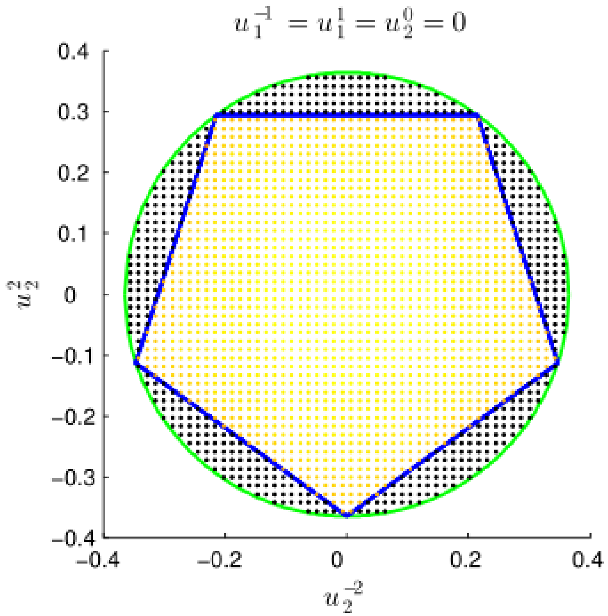
(b) The ACO algorithm with $\tau = 10^{-9}$



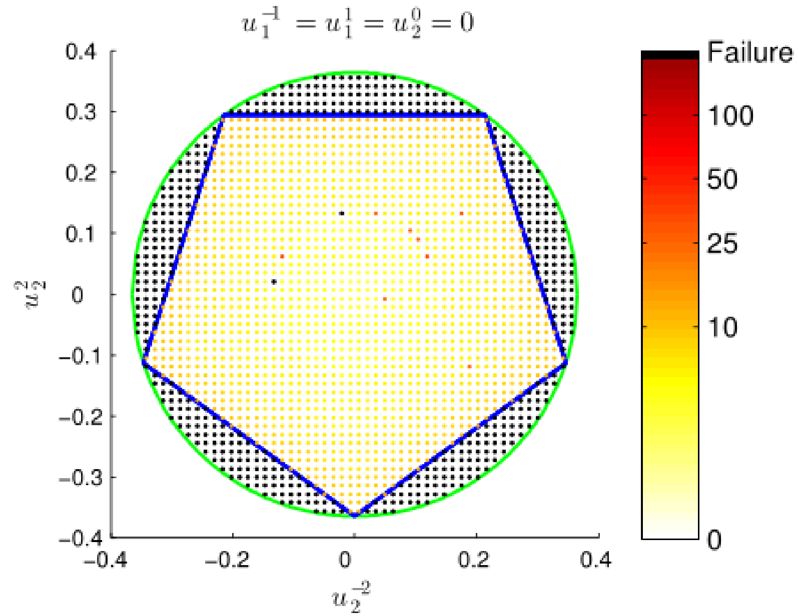
(c) Newton's method with $\tau = 10^{-8}$



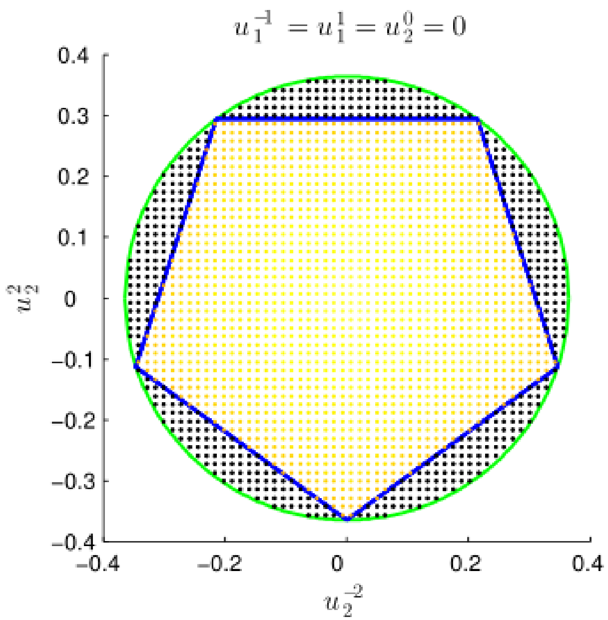
(d) Newton's method with $\tau = 10^{-9}$



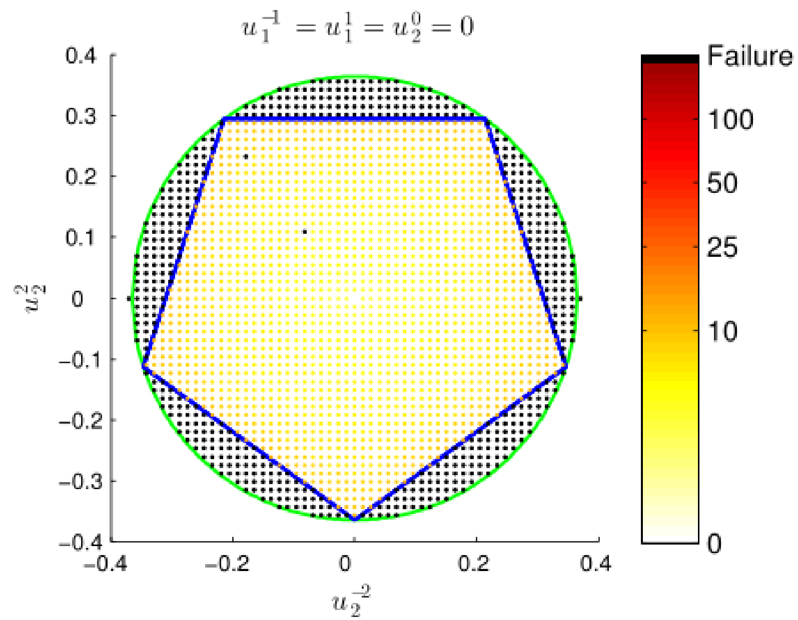
(a) The ACO algorithm with $\tau = 10^{-7}$



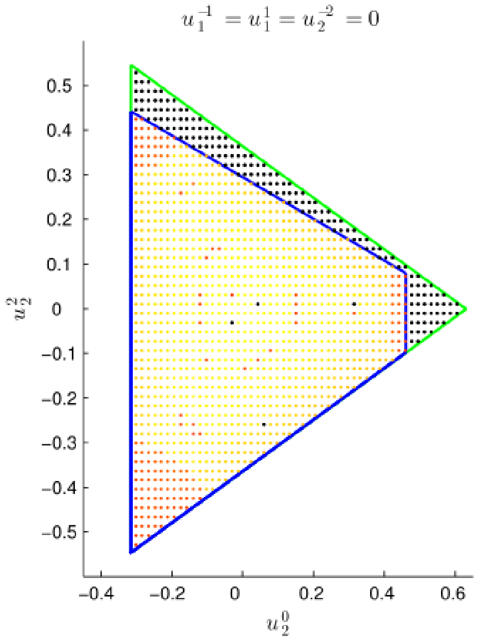
(b) The ACO algorithm with $\tau = 10^{-8}$



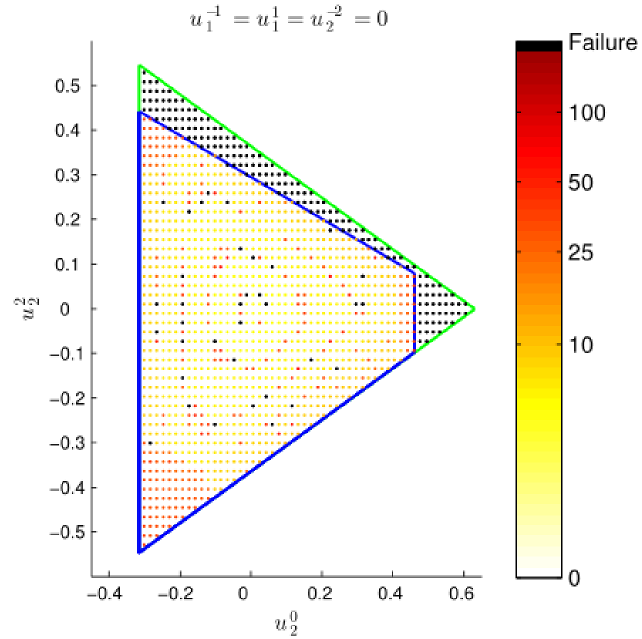
(c) Newton's method with $\tau = 10^{-7}$



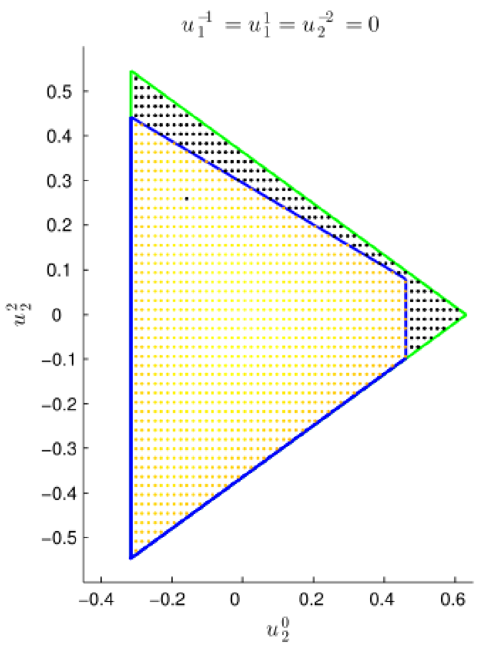
(d) Newton's method with $\tau = 10^{-8}$



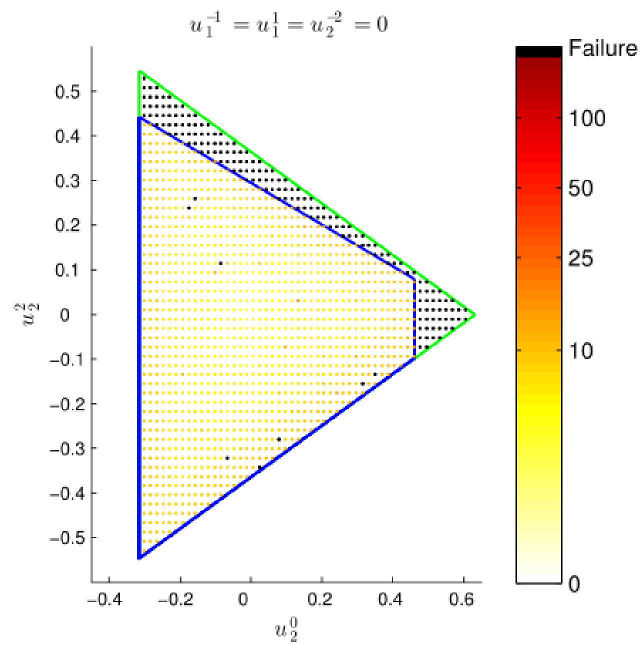
(a) The ACO algorithm with $\tau = 10^{-8}$



(b) The ACO algorithm with $\tau = 10^{-9}$



(c) Newton's method with $\tau = 10^{-8}$



(d) Newton's method with $\tau = 10^{-9}$

Lisää tuloksia

- On tärkeää tietää kuinka lähellä joukon reunaa algoritmit voivat ratkoa tehtäviä, koska haasteellisimmat ongelmat ovat siellä
- Halutaan myös tietää kuinka nopeasti algoritmit ratkaisevat tehtävät

Table 1: The value for λ, which is the weight in the convex combination between the moment on the boundary of $\mathcal{R}_m^Q$ $(\mathbf{u})$ and the isotropic moment $(\mathbf{u}_{iso})$ $(1-\lambda)\mathbf{u}+\lambda\mathbf{u}_{iso}$ in M_1, when three gradient tolerance τ values are used.

			τ		
			10^{-6}	10^{-7}	10^{-8}
$n_q = 15$	**1.** u $\approx [1,\ 0,\ -1.7225]$	Newton	10^{-9}	10^{-8}	10^{-3}
		ACO	10^{-16}	10^{-16}	10^{-16}
	2. u $\approx [1,\ 0.1810,\ -1.7225]$	Newton	10^{-9}	10^{-8}	10^{-3}
		ACO	10^{-16}	10^{-16}	10^{-3}
$n_q = 21$	**3.** u $\approx [1,\ 0,\ -1.7272]$	Newton	10^{-8}	10^{-8}	10^{-8}
		ACO	10^{-16}	10^{-16}	10^{-8}
	4. u $\approx [1,\ 1.2696,\ -1.1790]$	Newton	10^{-8}	10^{-8}	10^{-3}
		ACO	10^{-16}	10^{-8}	10^{-8}
$n_q = 29$	**5.** u $\approx [1,\ 0,\ -1.7295]$	Newton	10^{-7}	10^{-7}	10^{-2}
		ACO	10^{-8}	10^{-7}	10^{-7}
	6. u $\approx [1,\ 1.3788,\ -1.0481]$	Newton	10^{-7}	10^{-7}	10^{-4}
		ACO	10^{-10}	10^{-7}	10^{-7}

Table 4: The run times and the iteration counts when solving a problem that's well inside the $\mathcal{Q}$-realizable set.

$\mathbf{u} = [1,\ -0.8,\ 0.5]$	Algorithm			
	Newton		ACO	
Grad. tol.	t (ms)	iterations	t (ms)	iterations
10^{-6}	3.9	6	5.0	6
10^{-7}	3.9	6	5.0	6

Johtopäätökset

- ACO pystyy ratkoa tehtäviä yhtä lähellä tai lähempänä joukon reunaa kuin Newtonin menetelmä
- Newtonin menetelmä on aina nopeampi
- Molemmilla algoritmeilla numeerisia ongelmia, jotka johtuvat liukulukujen riittämättömästä tarkkuudesta, kun konvergenssivaatimukset ovat todella korkeat
- Olisi mahdollista tehdä hybridialgoritmi, joka käyttää hyväksi Newtonin menetelmän nopeutta ja ACO:n kykyä ratkoa tehtäviä lähellä reunaa

Kirjallisuusviitteet

[1] R. V. Abramov. The multidimensional maximum entropy moment problem: A review on numerical methods. *Communications in Mathematical Sciences*, 8:377–392, 2009.

[2] R. V. Abramov. The multidimensional moment-constrained maximum entropy problem: A bfgs algorithm with constraint scaling. *Journal of Computational Physics*, 228:96–108, 2009.

[3] G. W. Alldredge, C. D. Hauck, D. P. O'Leary, and A. L. Tits. Adaptive change of basis in entropy-based moment closures for linear kinetic equations. *Journal of Computational Physics*, 258:489–508, 2014.

[4] K. Bandyopadhyay, A. K. Bhattacharya, and D. A. Drabold P. Biswas. Maximum entropy and the problem of moments: A stable algorithm. *Phys. Rev. E*, 71(057701), 2005.

[5] J. Borwein and W. Huang. A fast heuristic method for polynomial moment problems with boltzmann-shannon entropy. *SIAM J. on Optim.*, 5:69–99, 1995.

[6] C. Cartis, N. I. M. Gould, and P. L. Toint. Adaptive cubic overestimation methods for unconstrained optimization. Technical report, 2008.

[7] S.-C. Fang, J. R. Rajasekera, and H.-S. J. Tsao. *Entropy Optimization and Mathematical Programming*. Kluwer Academic Publishers, 1997.

[8] C. Kristopher Garrett and Cory Hauck. A comparison of moment closures for linear kinetic transport equations: the line source benchmark. *To Appear*, 2014.

[9] R. Gordon, R. Bender, and G. Herman. Algebraic reconstruction techniques (art) for three-dimensional electron microscopy and x-ray photography. *Journal of theoretical biology*, 29, 1970.

[10] C. D. Hauck, C. D. Levermore, and A. L. Tits. Convex duality and entropy-based moment closures: Characterizing degenerate densities. *SIAM J. Control Optim.*, 47:1997–2015, 2008.

[11] W. Huang. Heuristic solutions to polynomial moment problems with some convex entropic objectives. *Numerical Algorithms*, 12:297–308, 1996.

[12] M. Junk. Domain of definition of levermore's five moment system. *J. Stat. Phys*, 93:1143–1167, 1998.

[13] M. Junk. Maximum entropy for reduced moment problems. *Math. Models Meth. Appl. Sci.*, 10:1001–1025, 2000.

[14] D. S. Kershaw. Flux limiting nature's own way – a new method for numerical solution of the transport equation. Technical report, 1976.

[15] J. Nocedal and S. Wright. *Numerical Optimization*. Springer, 2 edition, 2006.

[16] J. Schneider. Entropic approximation in kinetic theory. *Math. Model. Numer. Anal*, 38:541–561, 2004.

[17] I. Turek. A maximum-entropy approach to the density of states within the recursion method. *Journal of Physics C: Solid State Physicl*, 21:3251, 1988.