

Τεχνικές Βελτιστοποίησης - 2η Εργαστηριακή Άσκηση

Ελαχιστοποίηση συναρτήσεων πολλών μεταβλητών χωρίς περιορισμούς με χρήση παραγώγων

Δάφνη Νικολαΐδου AEM:10546

Σε αυτή την άσκηση υλοποιούνται στο MATLAB 3 μέθοδοι για την ελαχιστοποίηση της δοθείσας συνάρτησης:

$$f(x, y) = x^3 e^{-x^2-y^4}$$

Για κάθε μια από τις μεθόδους, θα μελετήσουμε τις εξής περιπτώσεις:

- Βήμα γκ σταθερό

Γνωρίζουμε ότι δεν μπορεί να επιλεγεί οσοδήποτε μεγάλο η μικρό. Επιλέχθηκε ίσο με 1.

- Βήμα γκ τέτοιο ώστε να ελαχιστοποιείται η $f(x_k + \gamma_k \cdot dk)$

Για την ελαχιστοποίηση της συνάρτησης $f(x_k + \gamma_k \cdot dk)$ χρησιμοποιήθηκε η μέθοδος της Χρυσής Τομής, που υλοποιήθηκε στην 1η εργασία.

- Βήμα γκ βάσει του κανόνα Armijo

Επιλέχθηκαν οι παράμετροι $a = 0.01$, $b = 0.3$, $s = 2$, $m = 0$.

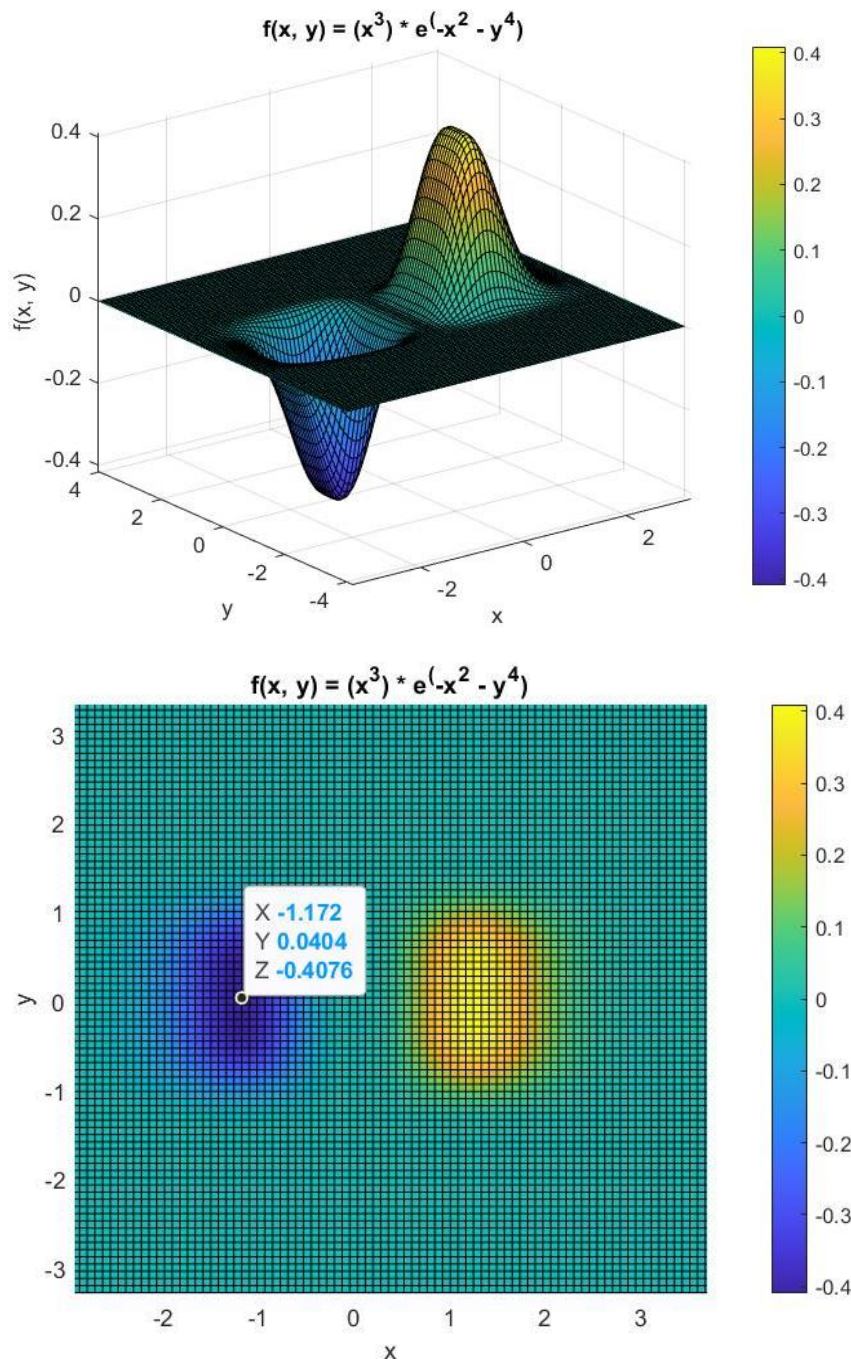
Επιπλέον, για κάθε μέθοδο και για κάθε περίπτωση επιλογής βήματος γκ συγκρίνουμε τα αποτελέσματα για διαφορετικά αρχικά σημεία έναρξης (x_1, y_1) :

- (0,0)
- (-1,-1)
- (1,1)

Σε όλες τις μεθόδους επιλέχθηκε σταθερά τερματισμού $\varepsilon = 0.001$.

Αρχικά, ας σχεδιάσουμε την f , ώστε να έχουμε μια εικόνα της μορφής της.

Το αρχείο MATLAB για την σχεδιάσή της έχει όνομα `thema1.m`

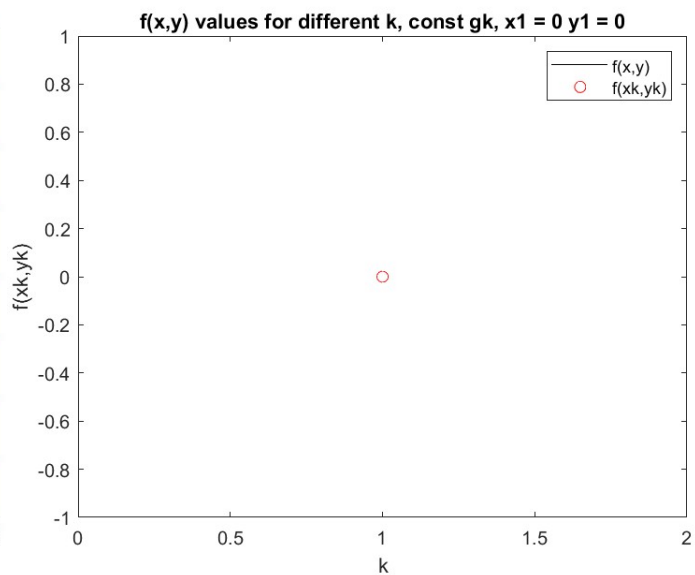
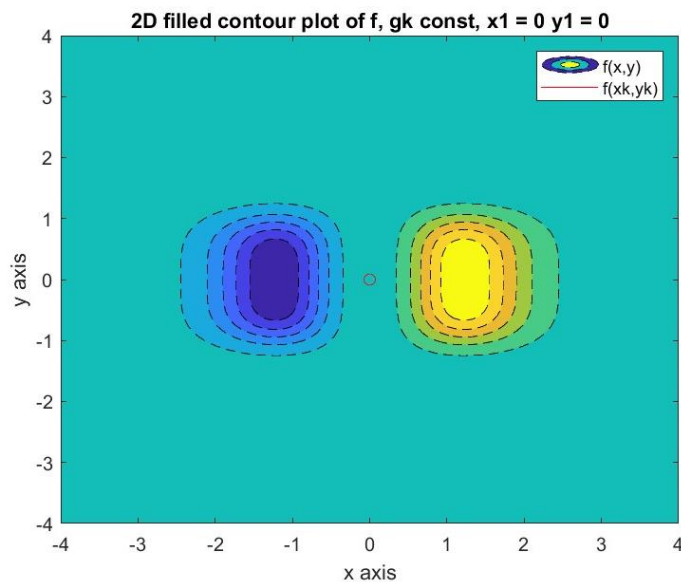


Περιστρέφοντας και το διάγραμμα, ώστε να δούμε τη μορφή του στις 2 διαστάσεις, εντοπίζουμε που περίπου βρίσκεται το ελάχιστο της συνάρτησης που αναζητούμε, κοντά στο σημείο $(x, y) = (-1, 0)$ με τιμή $z = 0.4$ προσεγγιστικά.

Σημείο έναρξης $(0, 0)$

Βλέποντας την μορφή της συνάρτησης f , διαπιστώνουμε ότι το σημείο $(x_1, y_1) = (0, 0)$ παρουσιάζει μία ιδιαιτερότητα. Τόσο η f , όσο και η παράγωγός της μηδενίζονται στο σημείο αυτό και αφού $\nabla f((0, 0)) = 0 < \varepsilon$, ο αλγόριθμος <<εγκλωβίζεται>> σε αυτό το κρίσιμο σημείο ανεξαρτήτως του βήματος γ_k και της μεθόδου που εφαρμόζουμε.

Για το λόγο αυτό παρατίθενται ενδεικτικά οι γραφικές παραστάσεις που προκύπτουν από τη Μέθοδο Μέγιστης Καθόδου με σταθερό γ_k και δεν θα κάνουμε περαιτέρω αναφορά στο σημείο $(0, 0)$, αφού τα αποτελέσματα των υπόλοιπων συνδυασμών μεθόδου-επιλογής γ_k , οδηγούν στο ίδιο ακριβώς αποτέλεσμα.

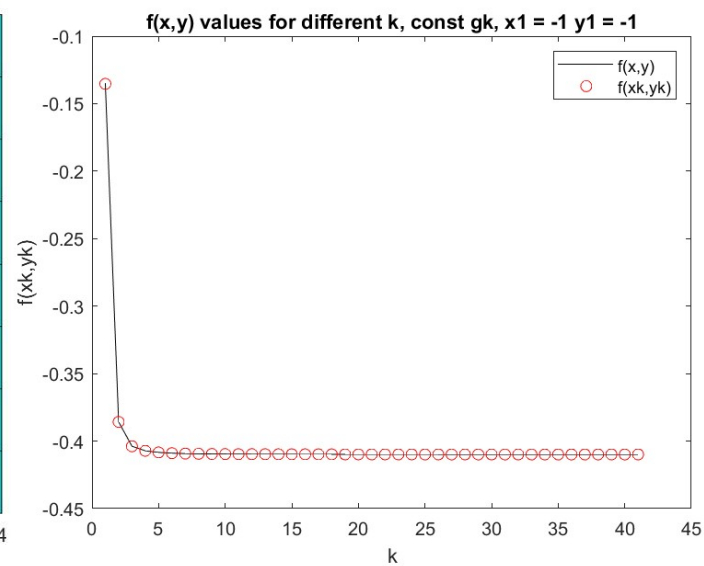
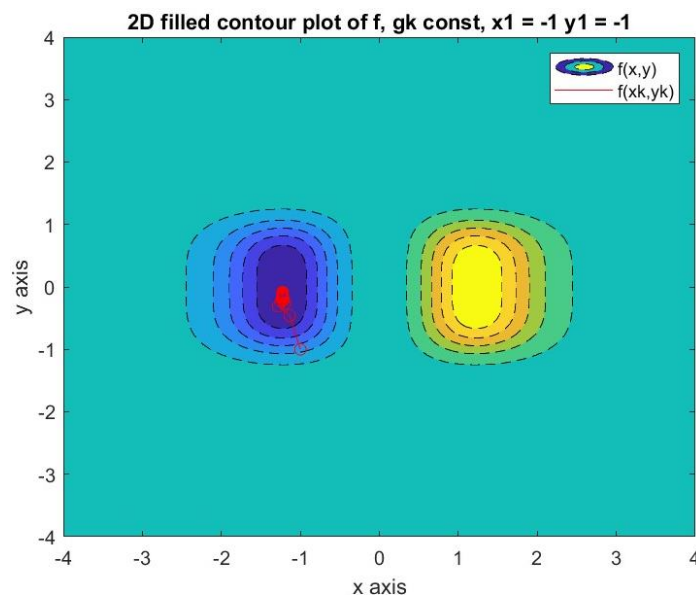


Μέθοδος Μέγιστης Καθόδου

Το αρχείο MATLAB για την υλοποίησή της έχει όνομα `thema2.m`

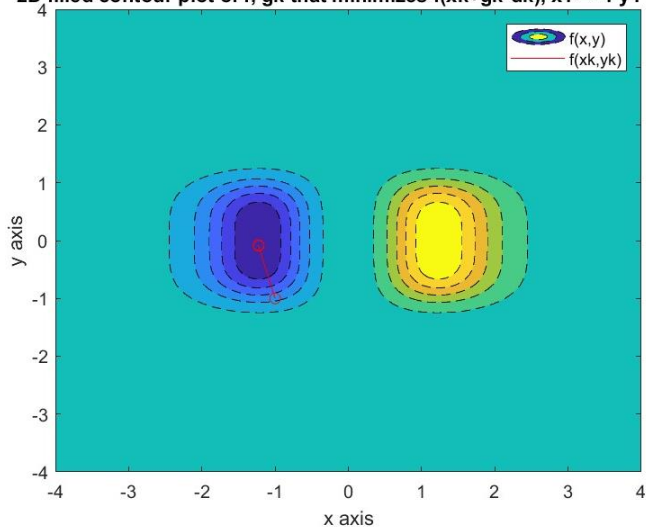
- Αποτελέσματα για σημείο έναρξης (-1,-1)

1. Σταθερό g_k

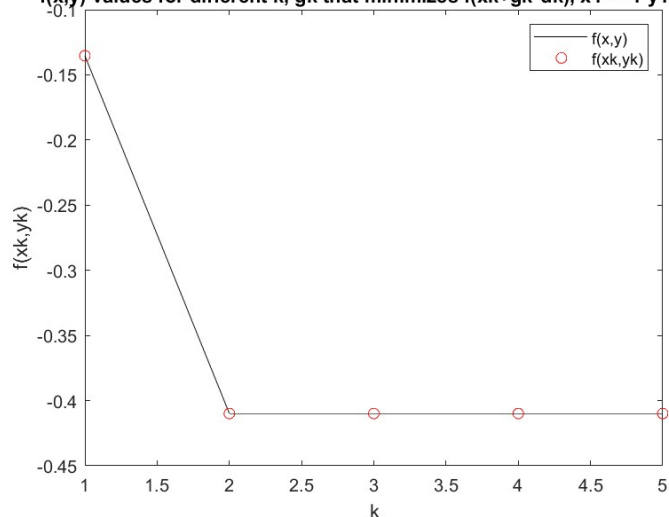


2. Βήμα g_k τέτοιο ώστε να ελαχιστοποιείται η $f(x_k + g_k \cdot dk)$

2D filled contour plot of f , g_k that minimizes $f(x_k + g_k \cdot dk)$, $x_1 = -1$ $y_1 = -1$

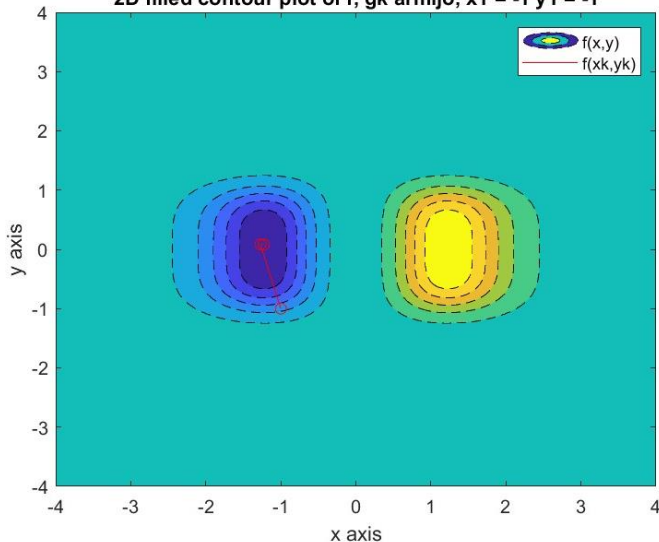


$f(x,y)$ values for different k , g_k that minimizes $f(x_k + g_k \cdot dk)$, $x_1 = -1$ $y_1 = -1$

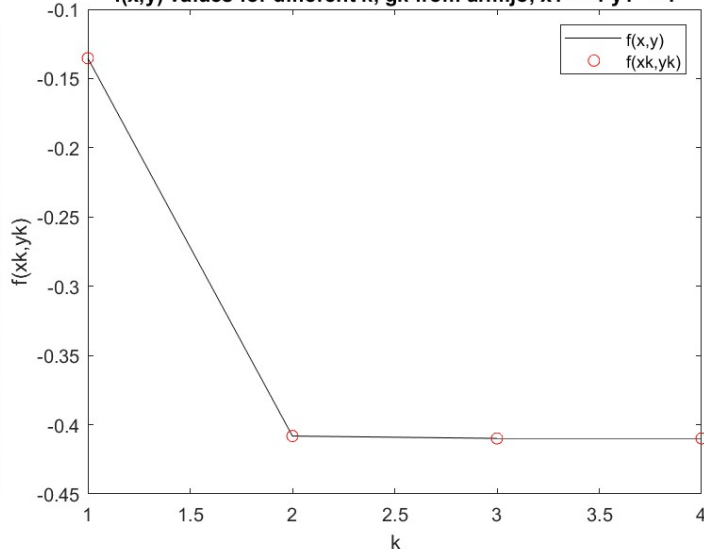


3. Βήμα g_k βάσει του κανόνα Armijo

2D filled contour plot of f , g_k armijo, $x_1 = -1$ $y_1 = -1$



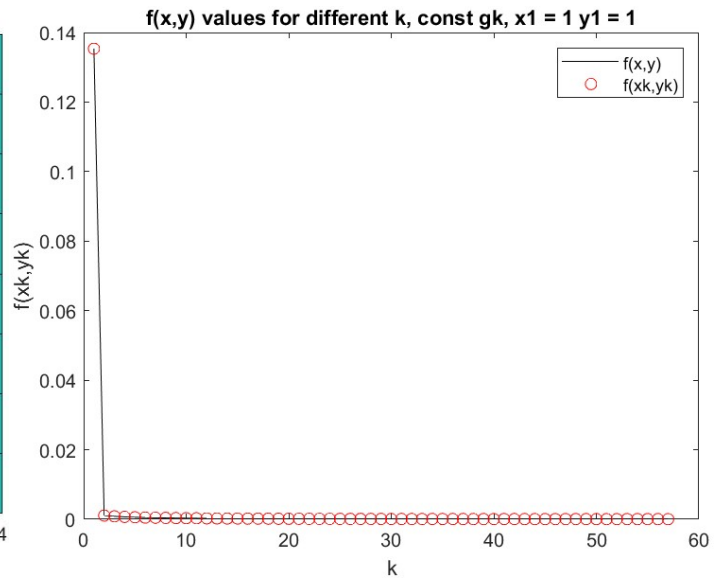
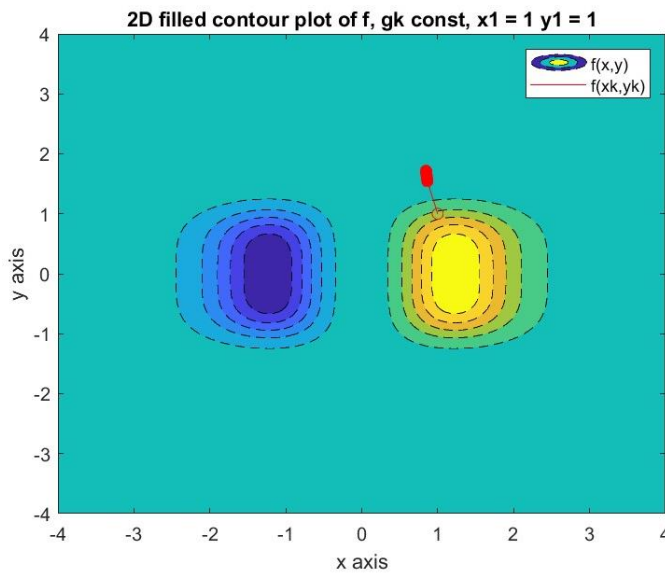
$f(x,y)$ values for different k , g_k from armijo, $x_1 = -1$ $y_1 = -1$



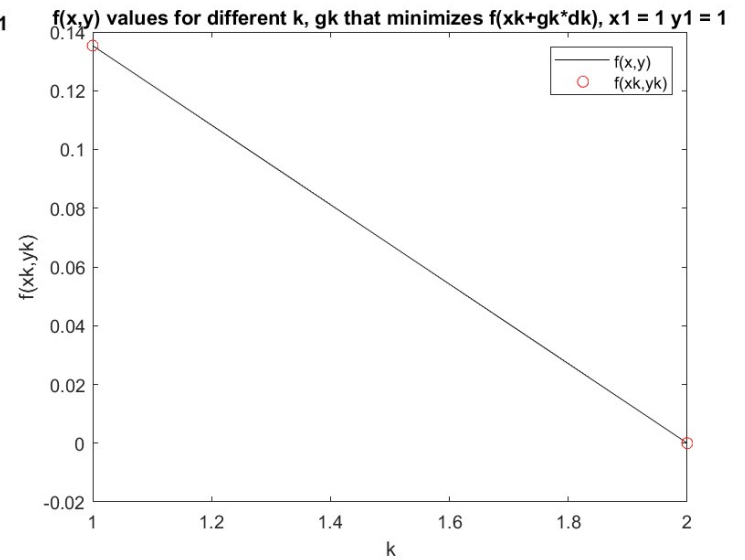
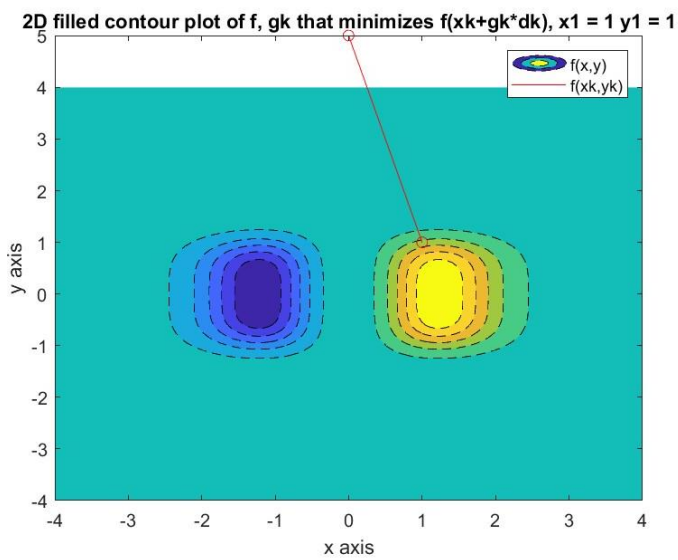
Με σημείο εκκίνησης το $(-1, -1)$, η Μέθοδος Μέγιστης Καθόδου καταφέρνει, και στις τρεις περιπτώσεις επιλογής του βήματος g_k , να συγκλίνει στο ολικό ελάχιστο της f . Όπως φαίνεται πιο αποτελεσματική είναι η επιλογή του βήματος βάσει του κανόνα Armijo, αφού χρειάζεται μόλις 4 επαναλήψεις, ενώ διακρίνεται και η κατωτερότητα της επιλογής σταθερού g_k , που χρειάζεται περίπου 40 επαναλήψεις για να φτάσει το επιθυμητό σημείο.

- Αποτελέσματα για σημείο έναρξης $(1, 1)$

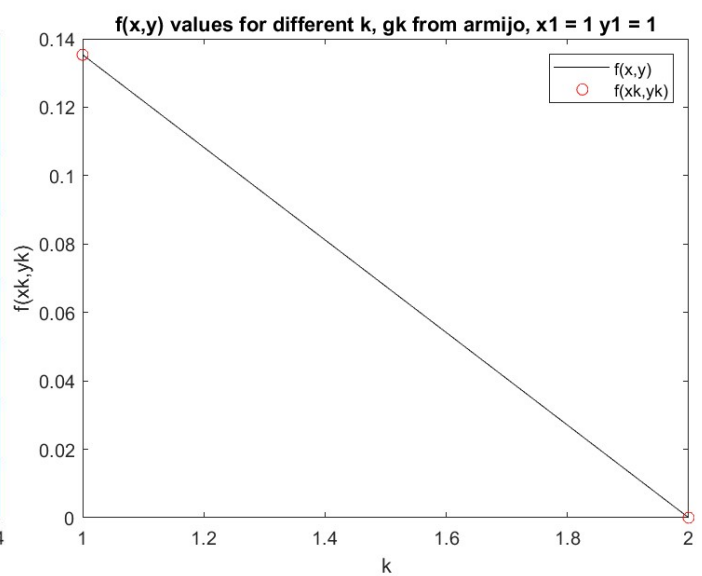
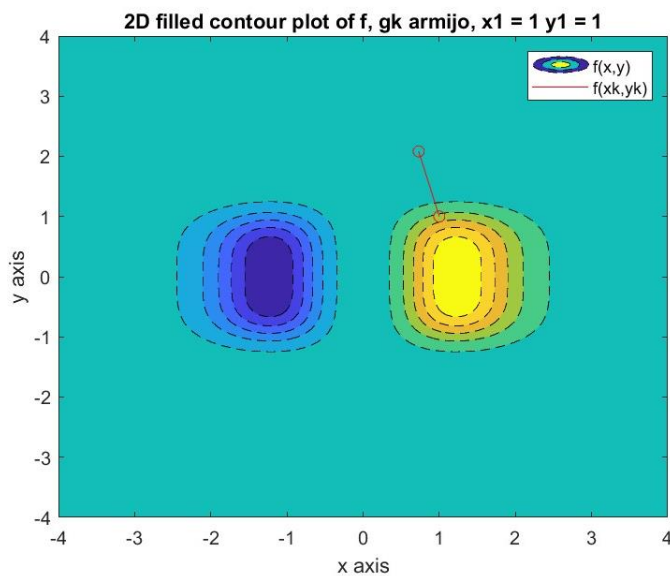
1. Σταθερό g_k



2. Βήμα g_k τέτοιο ώστε να ελαχιστοποιείται η $f(x_k + g_k \cdot dk)$



3. Βήμα g_k βάσει του κανόνα Armijo



Σε ότι αφορά την εκκίνηση από το σημείο (1,1), η Μέθοδος Μέγιστης Καθόδου αποτυγχάνει σε κάθε περίπτωση επιλογής βήματος γκ να φτάσει στο ολικό ελάχιστο της f, αφού ο αλγόριθμος <<εγκλωβίζεται>> σε τοπικό ελάχιστο πάνω στο οριζόντιο επίπεδο, όπου $f(x,y) = 0$ και $\nabla f((x, y)) = 0 < \varepsilon$.

Μέθοδος Newton

Το αρχείο MATLAB για την υλοποίησή της έχει όνομα thema3.m

Η υλοποίηση της μεθόδου Newton προϋποθέτει ότι ο εσσιανός πίνακας της συνάρτησης f για κάθε ένα από τα πιθανά σημεία εκκίνησης είναι θετικά ορισμένος. Όμως για τα σημεία (-1,-1) και (1,1), αυτό δεν ισχύει αφού έχουμε:

Hessian matrix at (-1,-1):

$$\begin{bmatrix} 4 \cdot \exp(-2) & 4 \cdot \exp(-2) \\ 4 \cdot \exp(-2) & -4 \cdot \exp(-2) \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 4 \cdot \exp(-2) & -4 \cdot \exp(-2) \\ -4 \cdot \exp(-2) & 4 \cdot \exp(-2) \end{bmatrix}$$

Hessian matrix at (1,1):

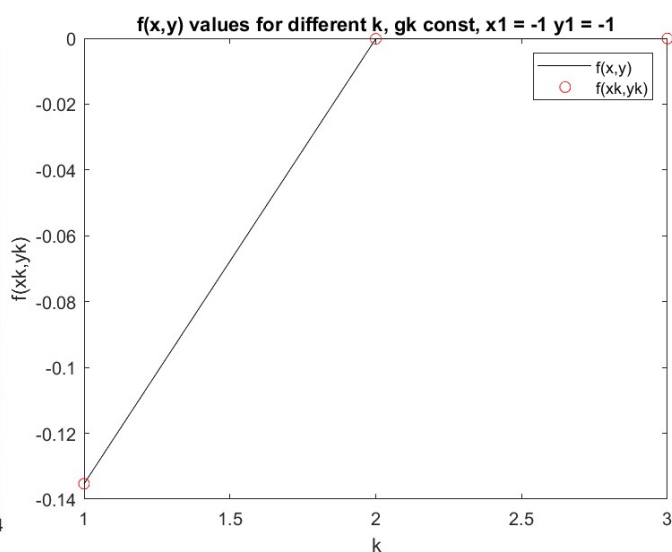
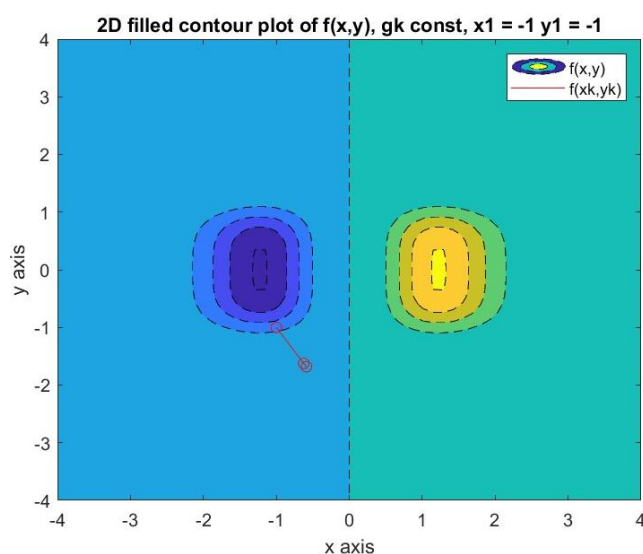
$$\begin{bmatrix} -4 \cdot \exp(-2) & -4 \cdot \exp(-2) \\ -4 \cdot \exp(-2) & 4 \cdot \exp(-2) \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} -4 \cdot \exp(-2) & 4 \cdot \exp(-2) \\ 4 \cdot \exp(-2) & 4 \cdot \exp(-2) \end{bmatrix}$$

Γι' αυτό τον λόγο, όπως βλέπουμε και από τις γραφικές παραστάσεις που προκύπτουν, για κανένα από τα δοθέντα σημεία εκκίνησης δεν καταφέρνουμε να φτάσουμε στο ολικό ελάχιστο μέσω της μεθόδου Newton, ανεξαρτήτως της επιλογής βήματος γκ.

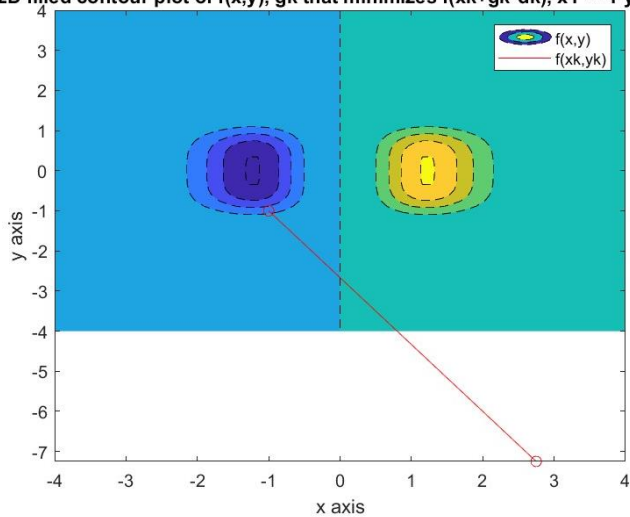
- Αποτελέσματα για σημείο έναρξης (-1,-1)

1. Σταθερό γκ

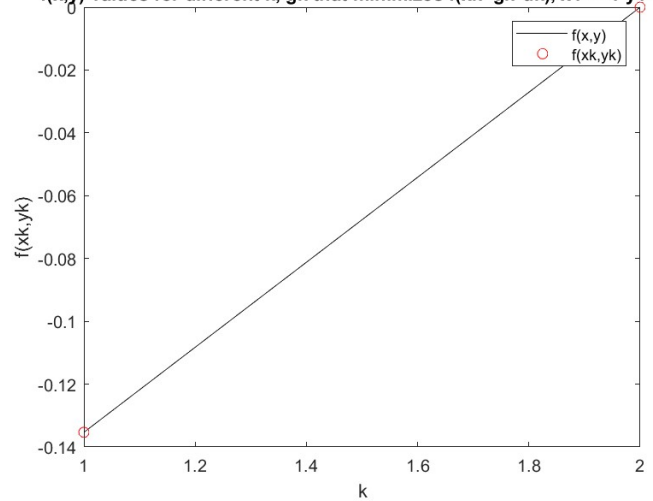


2. Βήμα γκ τέτοιο ώστε να ελαχιστοποιείται η $f(x_k + \gamma_k \cdot dk)$

2D filled contour plot of $f(x,y)$, g_k that minimizes $f(x_k+g_k \cdot dk)$, $x_1 = -1$ $y_1 = -1$

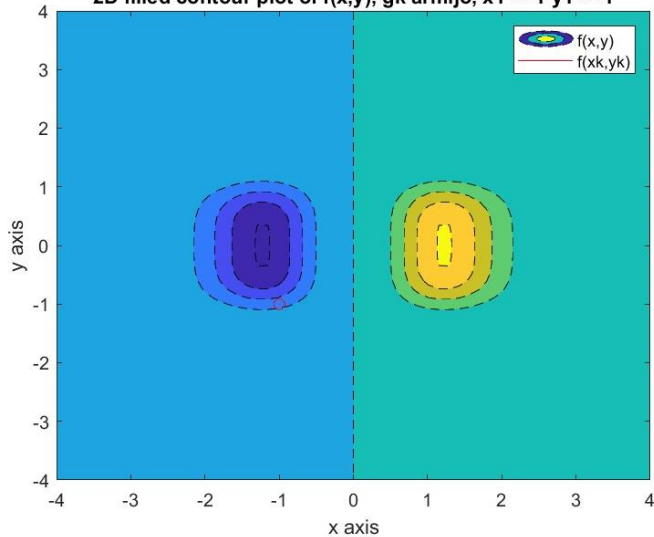


$f(x,y)$ values for different k , g_k that minimizes $f(x_k+g_k \cdot dk)$, $x_1 = -1$ $y_1 = -1$

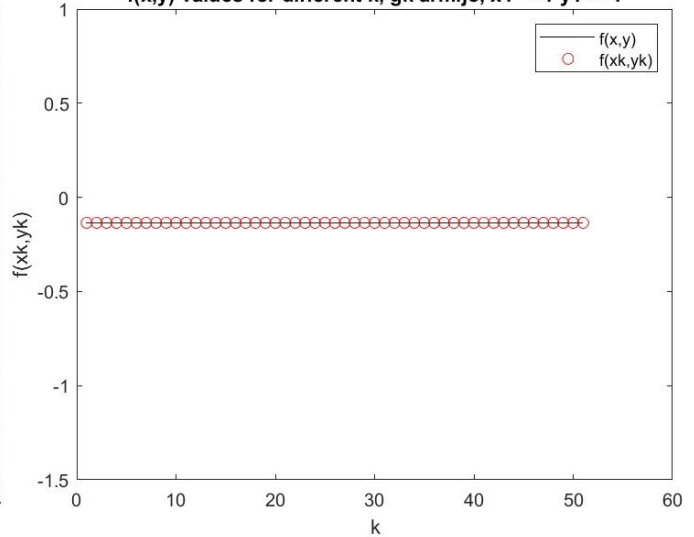


3. Βήμα g_k βάσει του κανόνα Armijo

2D filled contour plot of $f(x,y)$, g_k armijo, $x_1 = -1$ $y_1 = -1$

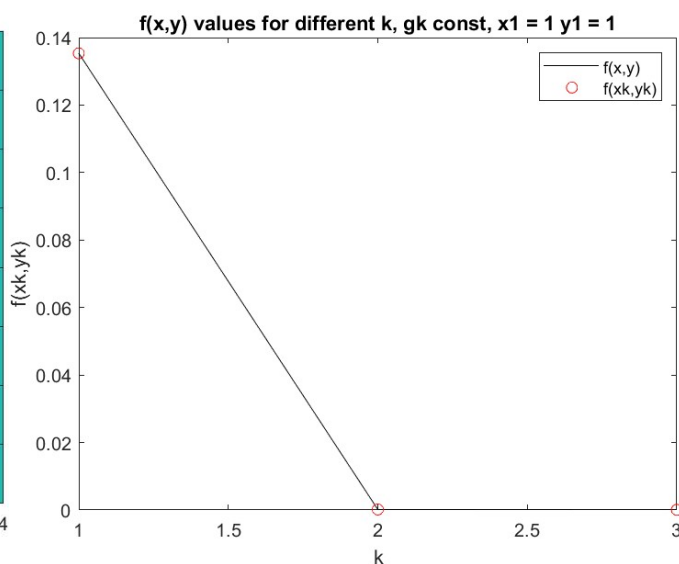
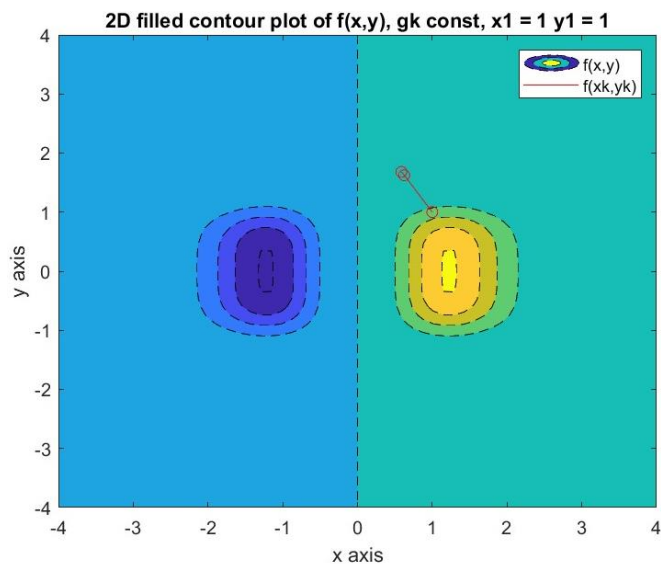


$f(x,y)$ values for different k , g_k armijo, $x_1 = -1$ $y_1 = -1$

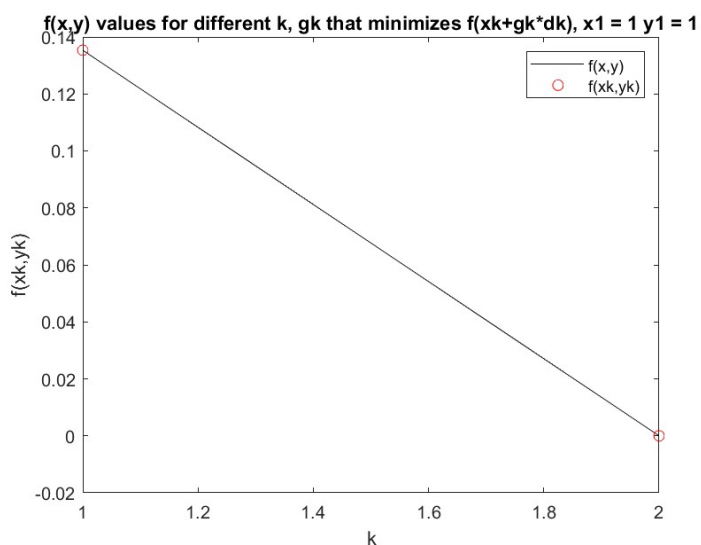
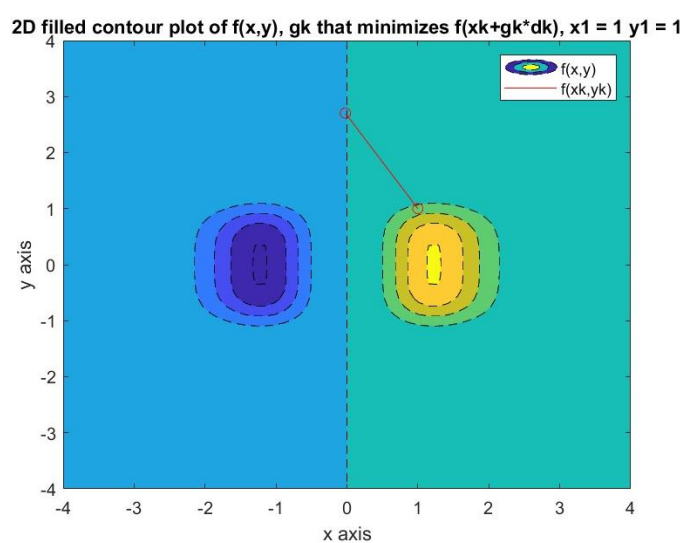


- Αποτελέσματα για σημείο έναρξης (1,1)

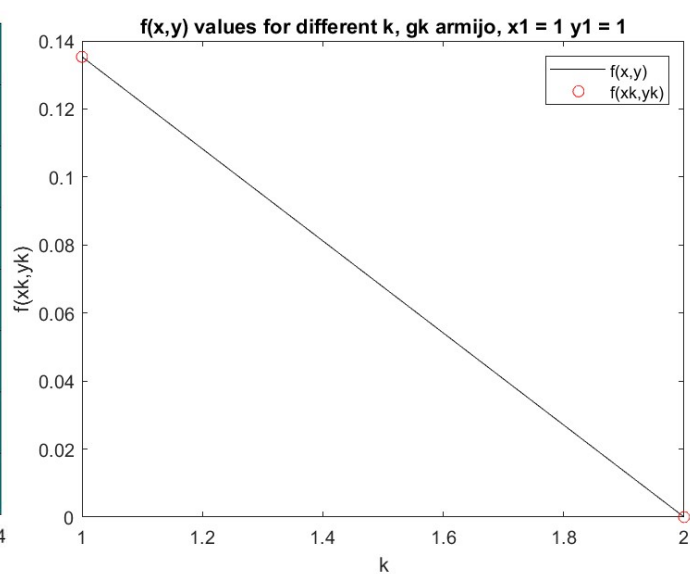
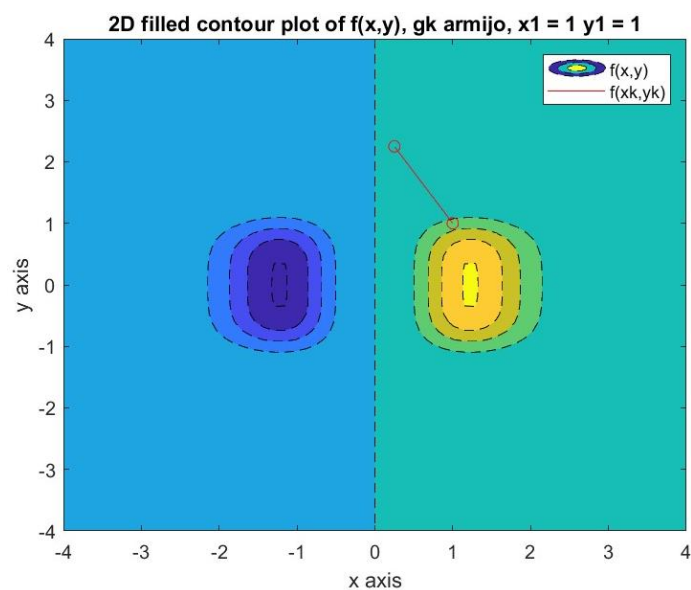
1. Σταθερό g_k



2. Βήμα g_k τέτοιο ώστε να ελαχιστοποιείται η $f(x_k + g_k \cdot d_k)$



3. Βήμα g_k βάσει του κανόνα Armijo



Μέθοδος Levenberg – Marquardt

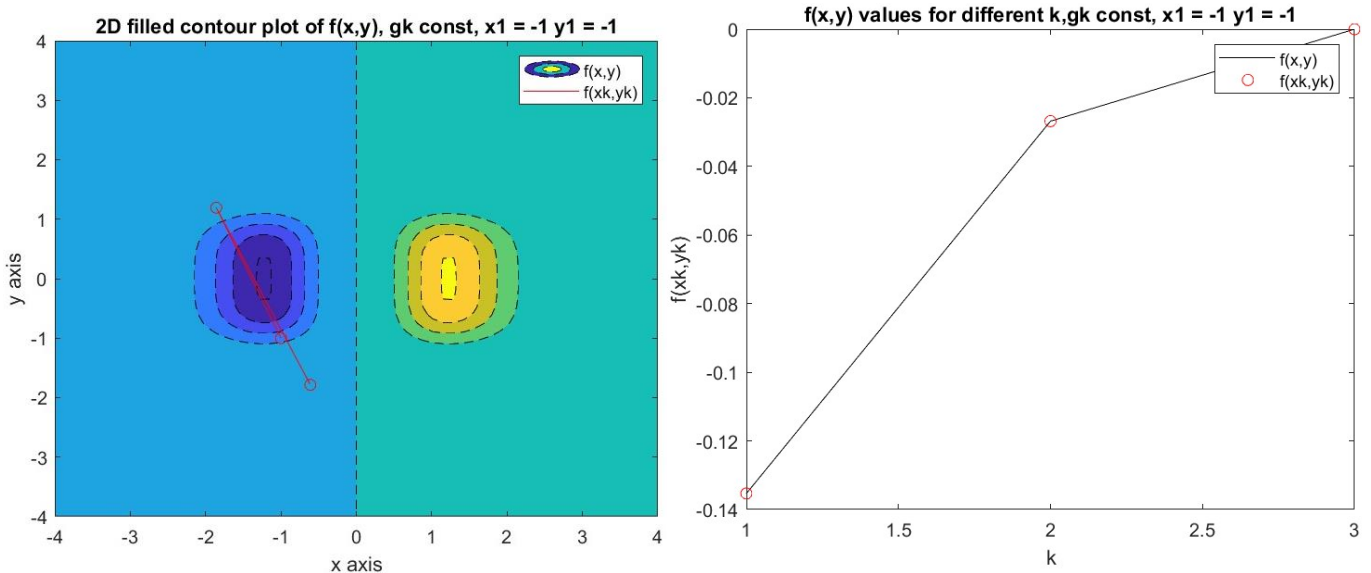
Το αρχείο MATLAB για την υλοποίησή της έχει όνομα thema4.m

Η μέθοδος αυτή αποτελεί τροποποίηση της μεθόδου Newton και λύνει το πρόβλημα του μη θετικά ορισμένου εσσιανού πίνακα, καθώς βρίσκει έναν ισοδύναμο πίνακα του εσσιανού ο οποίος να είναι θετικά ορισμένος.

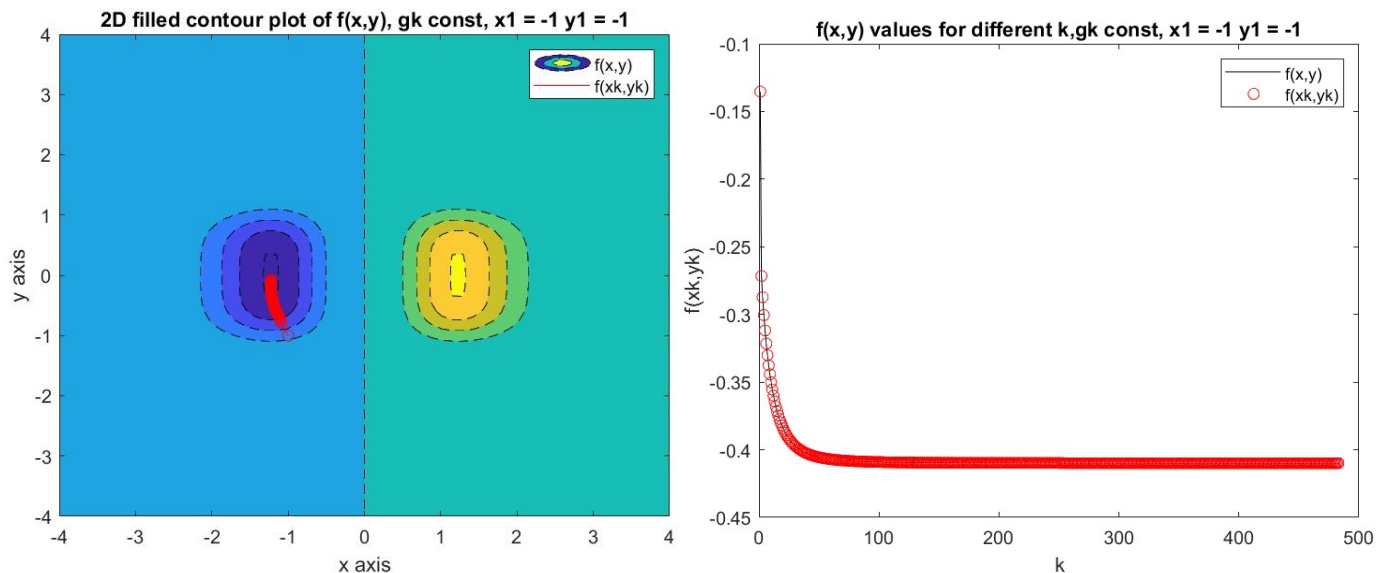
- Αποτελέσματα για σημείο έναρξης (-1,-1)

1. Σταθερό γ_k

Βλέπουμε ότι για $\gamma_k = 1$, ο αλγόριθμος δεν καταφέρνει να φτάσει στο ολικό ελάχιστο.

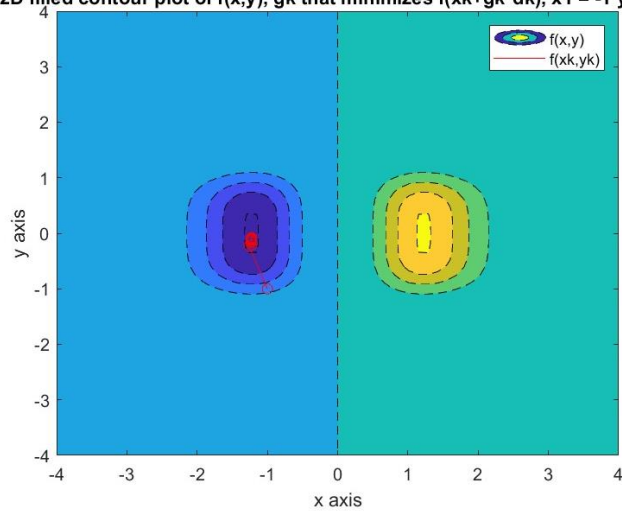


Αν όμως δοκιμάσουμε ένα μικρότερο βήμα $\gamma_k = 0.5$, η μέθοδος, αν και μετά από πολλές επαναλήψεις, φτάνει επιτυχώς στο ολικό ελάχιστο της f .

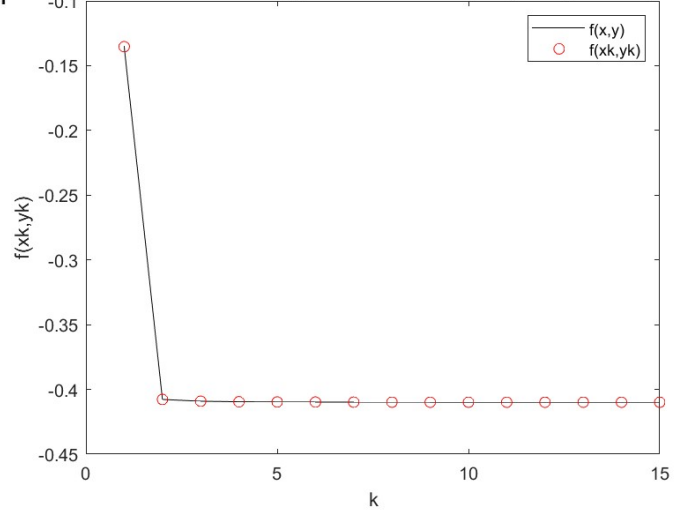


2. Βήμα γ_k τέτοιο ώστε να ελαχιστοποιείται η $f(x_k + \gamma_k \cdot dk)$

2D filled contour plot of $f(x,y)$, g_k that minimizes $f(x_k+g_k \cdot dk)$, $x_1 = -1$ $y_1 = -1$

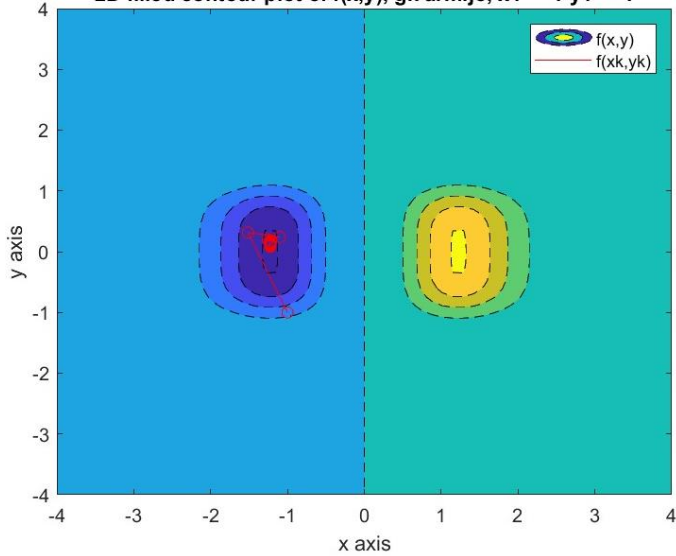


$f(x,y)$ values for different k , g_k that minimizes $f(x_k+g_k \cdot dk)$, $x_1 = -1$ $y_1 = -1$

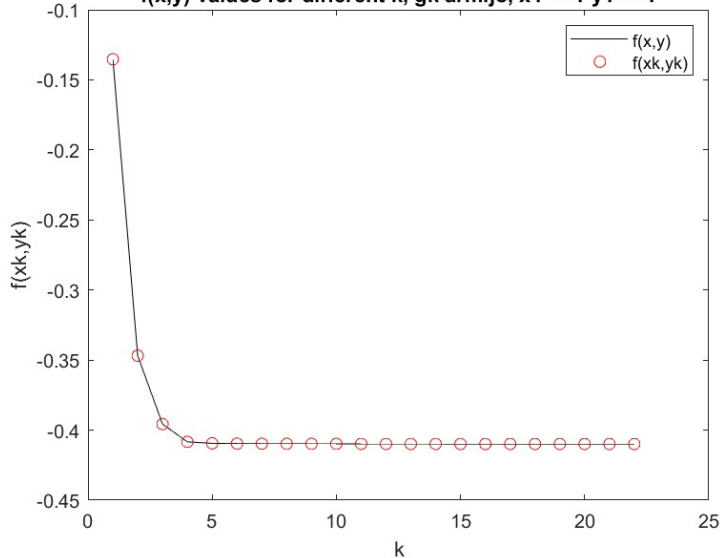


3. Βήμα g_k βάσει του κανόνα Armijo

2D filled contour plot of $f(x,y)$, g_k armijo, $x_1 = -1$ $y_1 = -1$



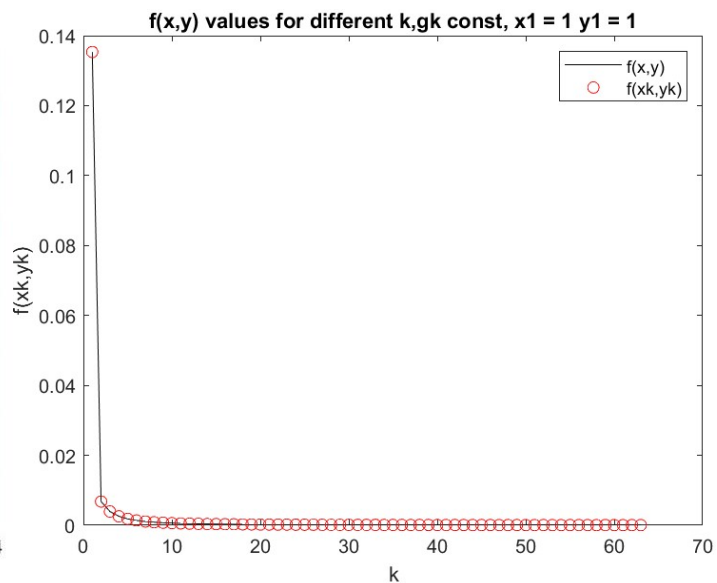
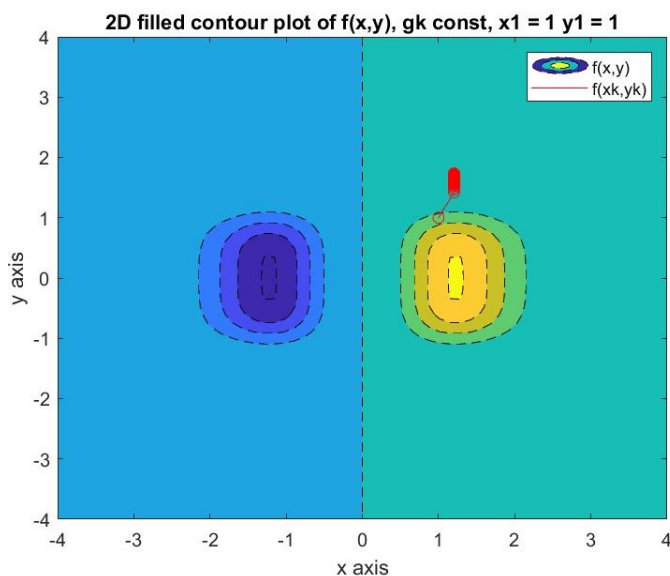
$f(x,y)$ values for different k , g_k armijo, $x_1 = -1$ $y_1 = -1$



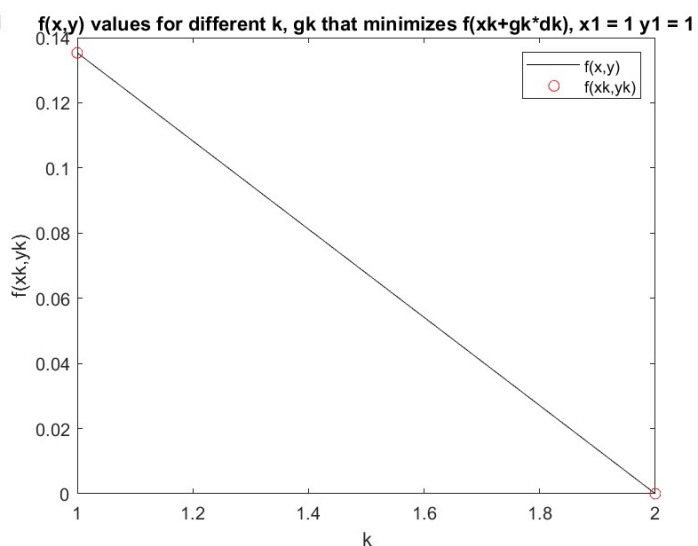
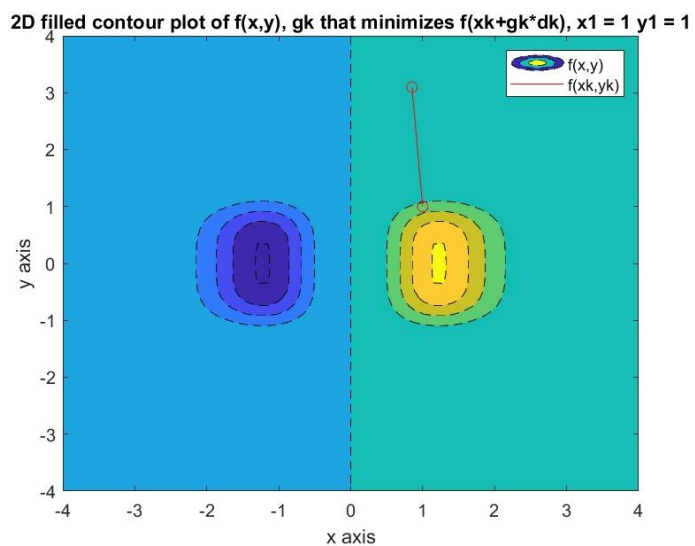
Με σημείο εκκίνησης το $(-1,-1)$, η Μέθοδος Levenberg – Marquardt καταφέρνει, και στις τρεις περιπτώσεις επιλογής του βήματος g_k , να συγκλίνει στο ολικό ελάχιστο της f . Όπως φαίνεται πιο αποτελεσματική είναι η επιλογή του βήματος που ελαχιστοποιεί την $f(x_k+g_k \cdot dk)$, αφού χρειάζεται μόλις 15 επαναλήψεις, ενώ διακρίνεται και η κατωτερότητα της επιλογής σταθερού g_k , που χρειάζεται περίπου 500 επαναλήψεις για να φτάσει το επιθυμητό σημείο.

- Αποτελέσματα για σημείο έναρξης (1,1)

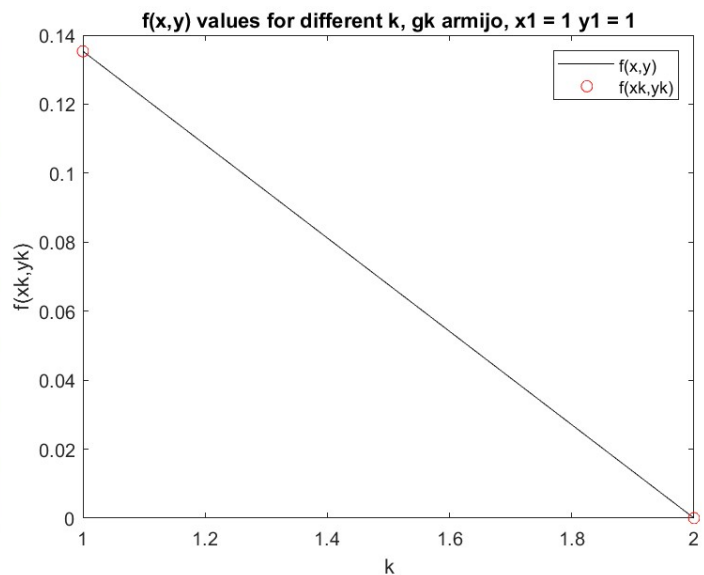
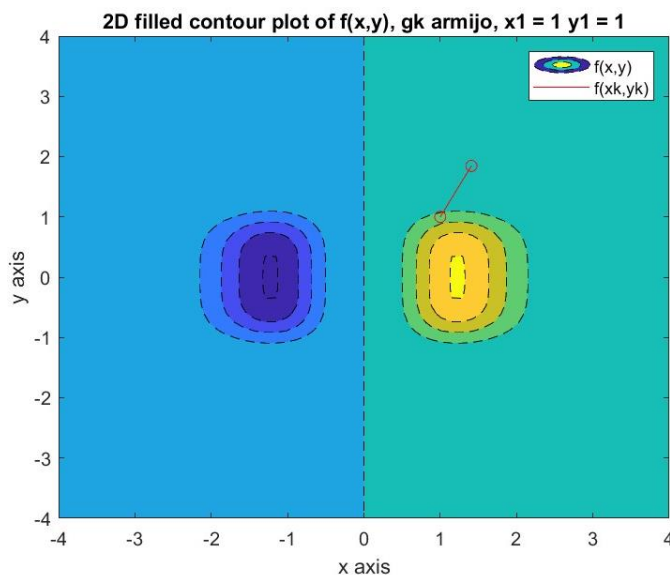
1. Σταθερό γ_k



2. Βήμα γ_k τέτοιο ώστε να ελαχιστοποιείται η $f(x_k + \gamma_k \cdot dk)$



3. Βήμα γ_k βάσει του κανόνα Armijo



Όσον αφορά την εκκίνηση από το σημείο $(1,1)$, η Μέθοδος Levenberg – Marquardt αποτυγχάνει σε κάθε περίπτωση επιλογής βήματος γ_k να φτάσει στο ολικό ελάχιστο της f , αφού ο αλγόριθμος <<εγκλωβίζεται>> σε τοπικό ελάχιστο πάνω στο οριζόντιο επίπεδο όπου $f(x,y) = 0$ και $\nabla f((x, y)) = 0 < \varepsilon$.

Σύγκριση μεθόδων - επιλογής βήματος

Καθώς κανένας συνδυασμός επιλογής μεθόδου και βήματος γ_k δεν ελαχιστοποιεί τη συνάρτηση f για τα σημεία εκκίνησης $(0,0)$ και $(1,1)$, έχει νόημα η σύγκριση μόνο για το αρχικό σημείο $(-1,-1)$.

$(-1,-1)$	Μέθοδος Μέγιστης Καθόδου	Μέθοδος Newton	Μέθοδος Levenberg – Marquardt
$\gamma_k = \text{const.}$	$K = 41$	Δεν ελαχιστοποιείται	$K \approx 500$
γ_k για ελαχιστοποίηση της $f(x_k + \gamma_k \cdot dk)$	$K = 5$	Δεν ελαχιστοποιείται	$K = 15$
γ_k βάσει κανόνα Armijo	$K = 4$	Δεν ελαχιστοποιείται	$K = 23$

Αποδοτικότερη φαίνεται να είναι η Μέθοδος Μέγιστης Καθόδου, καθώς χρειάζεται λιγότερα βήματα για την ελαχιστοποίηση της $f(x,y)$ από τη Levenberg – Marquardt, ενώ η Μέθοδος Newton αποτυγχάνει σε κάθε περίπτωση.

Όσον αφορά την επιλογή βήματος γ_k , γενικά συμφερότερη αποδεικνύεται η επιλογή γ_k τέτοιο ώστε να ελαχιστοποιείται η $f(x_k + \gamma_k \cdot dk)$, αφού έχει σχεδόν παρόμοια αποτελέσματα με την επιλογή βάσει Armijo για τη Μέθοδο Μέγιστης Καθόδου, αλλά αρκετά καλύτερα στη περίπτωση της Μεθόδου Levenberg – Marquardt.