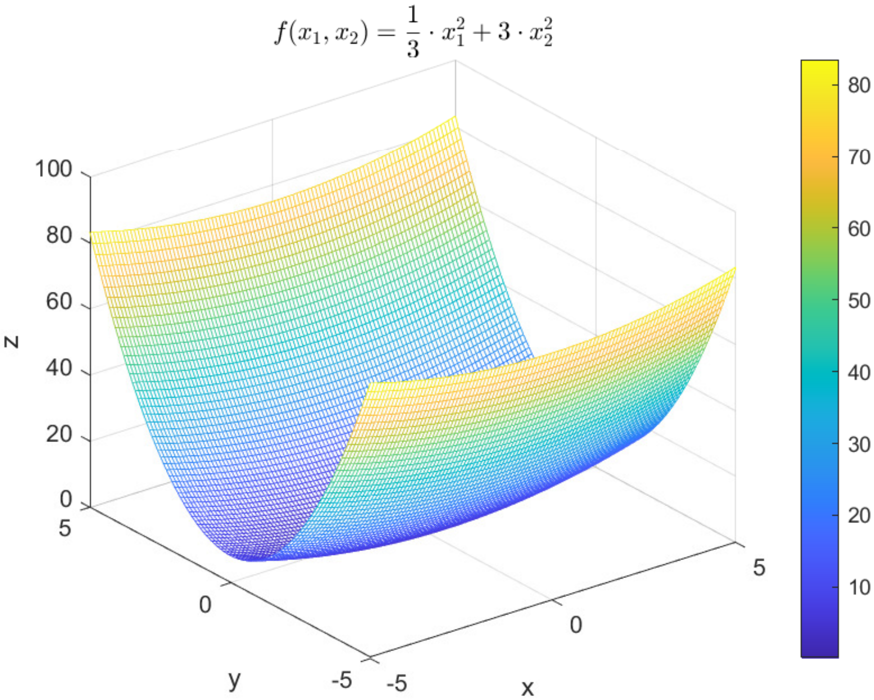
Τεχνικές Βελτιστοποίησης

Κουκουλέτσου Αικατερίνη 10218

Δεκέμβριος 2022

Μελέτη Αντικειμενικής Συνάρτησης

Η δοσμένη αντικειμενική συνάρτηση, είναι συνάρτηση δύο μεταβητών, x_1 και x_2. Δίνεται από τον τύπο $f(x_1, x_2) = \frac{1}{3} \cdot {x_1}^2 + 3 \cdot {x_2}^2$ και η γραφική της παράσταση φαίνεται στο παρακάτω σχήμα.



Στην παρούσα εργασία παρουσιάζεται η ελαχιστοποίηση της συνάρτησης αυτής, αρχικά με χρήση της μεθόδου της μέγιστης καθόδου και απουσία περιορισμών και έπειτα με χρήση της μεθόδου μέγιστης καθόδου με προβολή υπό τους περιορισμούς $-10 \leq x_1 \leq 5$ και $-8 \leq x_2 \leq 12$.

Μέθοδος Μέγιστης Καθόδου

Η μέθοδος της μέγιστης καθόδου ορίζει e την ακρίβεια - σταθερά τερματισμού και x το αρχικό σημείο. Όσο ισχύει η σχέση

$$|\nabla f(x_\kappa)| > e$$

θέτουμε ως κατεύθυνση αναζήτησης

$$d_k = -\nabla f(x_\kappa)$$

και ως γ_κ την τιμή που ελαχιστοποιεί την

$$f(x_\kappa + \gamma_\kappa \cdot d_\kappa)$$

ως προς γ_κ. Ορίζουμε την αναδρομική σχέση

$$x_{\kappa+1} = x_\kappa + \gamma_\kappa \cdot d_k$$

αυξάνουμε τον δείκτη επανάληψης κ κατά μία μονάδα και επαναλαμβάνουμε την ίδια διαδικασία. Σε περίπτωση που το κ ξεπεράσει το 1000, διακόπτουμε την λειτουργία του αλγορίθμου έτσι ώστε να αποφύγουμε τον ατέρμων βρόχο σε περιπτώσεις όπου η μέθοδος δεν συγκλίνει.

Θέμα 1

Εκτελούμε τον αλγόριθμο της μέγιστης καθόδου, θέτωντας την ακρίβεια e ιση με 0.001 και το αρχικό σημείο n ισο με $(-1.5, 1.5)$. Δοκιμάζουμε διαφορετικές τιμές για το μέγεθος γ_κ και λαμβάνουμε τις εξής προσομοιώσεις για γ_κ ίσο με 0.1, 0.3, 3, και 5 αντίστοιχα.

Παρατηρούμε ότι, για μικρές τιμές του γ_κ, δηλαδή για γ_κ ίσο με 0.1 και 0.3, ο αλγόριθμος φαίνεται να συγκλίνει στο ελάχιστο μετά από λίγες επαναλήψεις ενώ για μεγάλες τιμές του γ_κ, η επαναλήψεις αυξάνονται σημαντικά και μάλιστα κάποιες φορές η μέθοδος παύει να συγκλίνει.

Για να εξηγήσουμε αυτήν την συμπεριφορά, υπολογίζουμε το gradient της συνάρτησης και το αντικαθιστουμε στην αναδρομική σχέση

$$\nabla f = \begin{bmatrix} \frac{2}{3} \cdot x_\kappa \\ 6 \cdot y_\kappa \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} x_{\kappa+1} \\ y_{\kappa+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_\kappa \\ y_\kappa \end{bmatrix} - \gamma_\kappa \cdot \begin{bmatrix} \frac{2}{3}x_\kappa \\ 6y_\kappa \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} x_{\kappa+1} \\ y_{\kappa+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_\kappa \cdot (1 - \frac{2}{3} \cdot \gamma_\kappa) \\ y_\kappa \cdot (1 - 6 \cdot \gamma_\kappa) \end{bmatrix}$$

Ισχύει ότι, οι τιμές του βήματος γ_κ που εγγυώνται την ευστάθεια είναι αυτές που ικανοποιούν την συνθήκη:

$$\left|\frac{x_{\kappa+1}}{x_\kappa}\right| \leq 1 \Rightarrow \left|\frac{x_\kappa \cdot (1-\frac{2}{3}\cdot\gamma_\kappa)}{x_\kappa}\right| \leq 1 \Rightarrow \left|1-\frac{2}{3}\cdot\gamma_\kappa\right| \leq 1 \Rightarrow 0 \leq \gamma_\kappa \leq 3$$

$$\left|\frac{y_{\kappa+1}}{y_\kappa}\right| \leq 1 \Rightarrow \left|\frac{y_\kappa \cdot (1-\frac{2}{3}\cdot\gamma_\kappa)}{y_\kappa}\right| \leq 1 \Rightarrow \left|1-\frac{2}{3}\cdot\gamma_\kappa\right| \leq 1 \Rightarrow 0 \leq \gamma_\kappa \leq \frac{1}{3}$$

Οι δύο ανισώσεις συναληθεύουν όταν $0 \leq \gamma_\kappa \leq \frac{1}{3}$. Επομένως, συνιστάται να επιλέγουμε τιμές για το γ_κ που να ανήκουν σε αυτό το διάστημα.

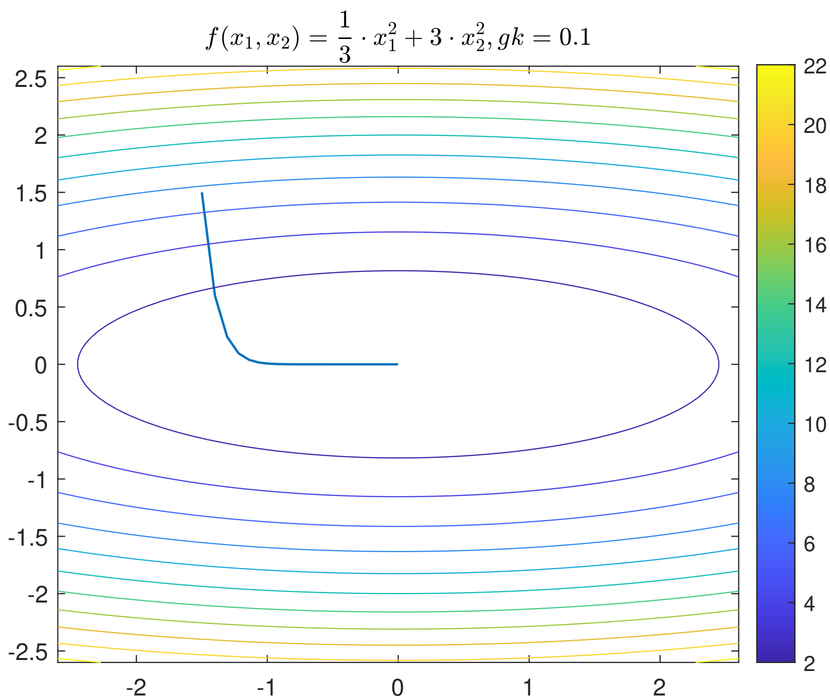
Το συμπέρασμα αυτό εξηγεί τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων αφού δοκιμάζοντας και άλλες τιμές για το βήμα γ_κ φαίνεται πώς για οποιαδήποτε επιλογή $\gamma_\kappa \leq 0.3333$ η μέθοδος συγκλίνει στο ελάχιστο ενώ για τιμές του $\gamma_\kappa \geq 0.3333$, η σύγλιση δεν είναι εγγυημένη. Μάλιστα, όσο αυξάνουμε την τιμή του γ_κ, δηλαδή για επιλογή $\gamma_\kappa \gg 0.3333$ οι μεταβολές των διαδοχικών τιμών του x_κ και y_κ είναι μεγάλες, οι επαναλήψεις πολλές και η σύγκλιση αβέβαια.

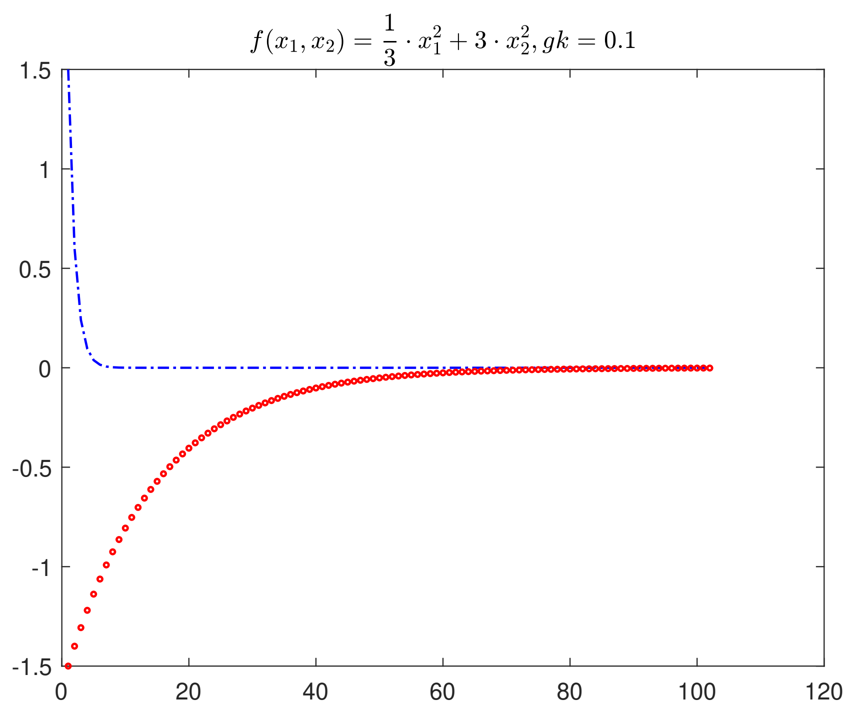
βήμα γ_κ	0.1	0.3	3	5
αριθμός επαναλήψεων	102	42	253	213

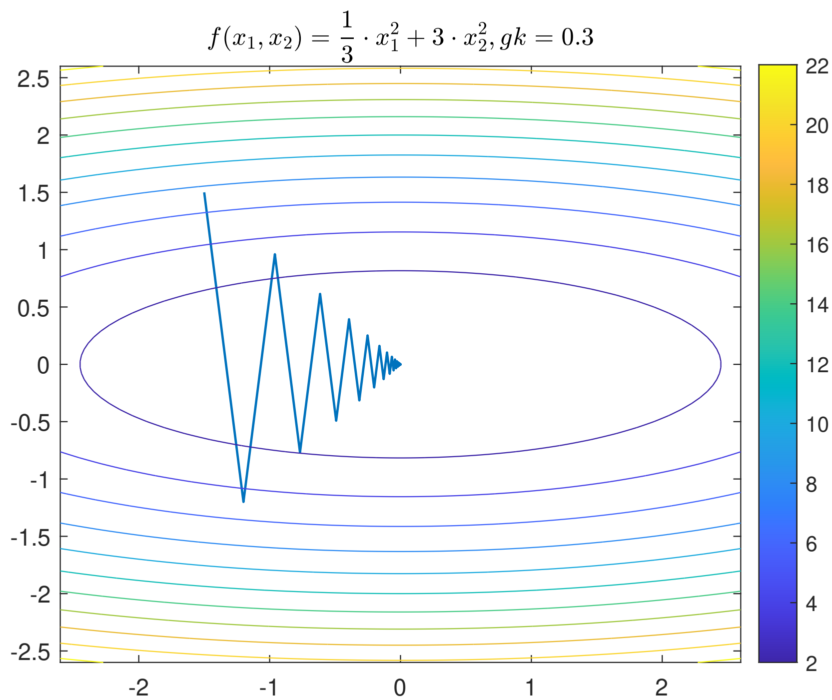
Για γ_κ ίσο με 3 και 5, μπορεί ο αριθμός των επαναλήψεων να είναι πεπερασμένος και μικρότερος του 1000 αλλά αυτό δεν σημαίνει ότι η μέθοδος συγκλίνει. Οι επαναλήψεις διακόπτονται γιατί οι αριθμοί που προκύπτουν εινα τόσο μεγάλοι, που ξεφεύγουν από το όριο του μεγαλύτερου αριθμού κινητής υποδιαστολής που δέχεται το περιβάλλον του Matlab και όχι γιατί έχει εντοπιστεί το ελάχιστο. Για αυτό και στο workspace, η τελευταία τιμή που φαίνεται να καταχωρείται στην μεταβλητή είναι NaN. Συνεπώς, η μέθοδος αποκλίνει.

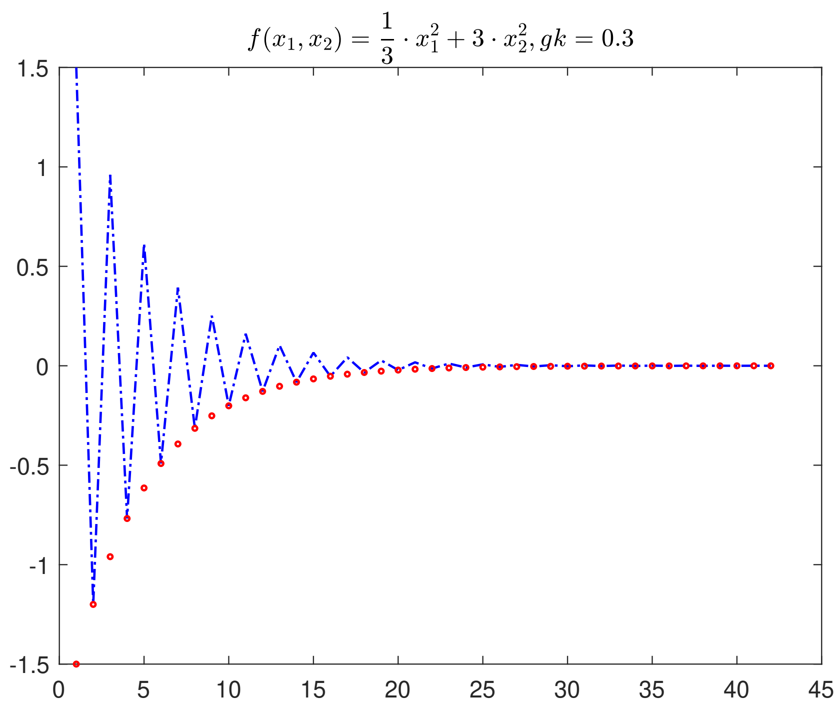
Παρακάτω, παρατίθενται τα διαγράμματα contour της συνάρτησης και των διαδοχικών τιμών του ζεύγους $(x_{1\kappa}, x_{2\kappa})$ για κάθε δοσμένη τιμή του γ_κ. Παρατηρούμε ότι για γ_κ ίσο με 3 ή 5, οι τιμές που παίρνουν οι μεταβλητές $x_{1\kappa}$ και $x_{2\kappa}$ είναι τόσο μεγάλες που όταν σχεδιάζονται στο ίδιο πλοτ η συνάρτηση δεν είναι καν ορατή.

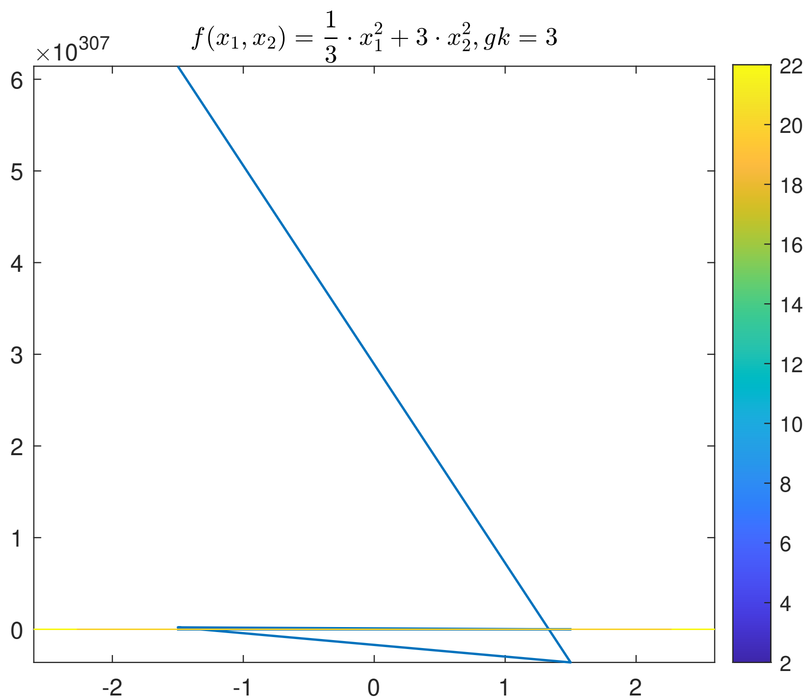
Αμέσως μετά, παρατίθενται και διαγράμματα που δείχνουν τις διαδοχικές τιμές που παίρνουν τα $x_{1\kappa}$ και $x_{2\kappa}$, σε κάθε επανάληψη και σε κοινό σύστημα αξόνων.

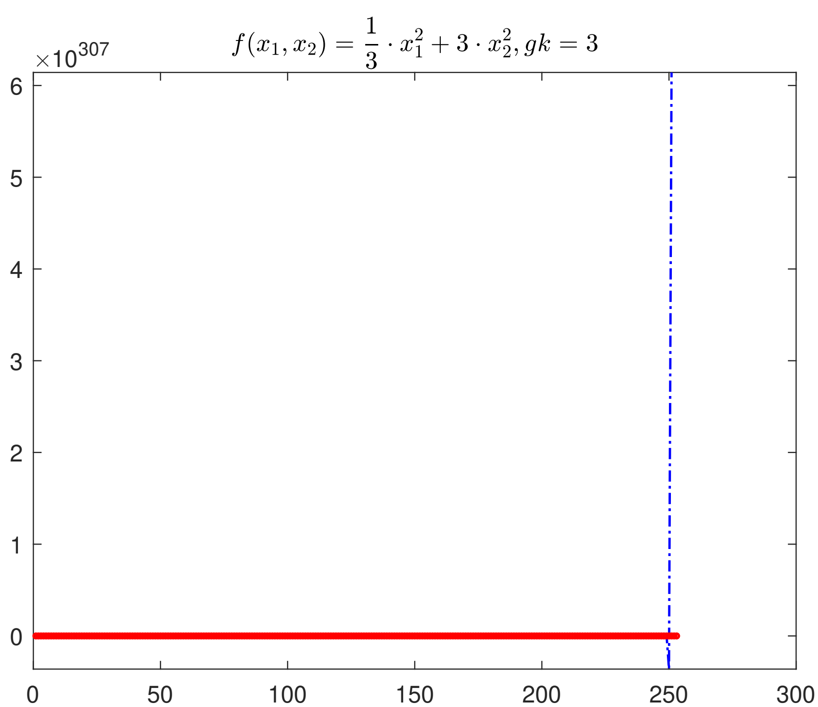

$f(x_1, x_2) = \frac{1}{3} \cdot x_1^2 + 3 \cdot x_2^2, gk = 0.1$


$f(x_1, x_2) = \frac{1}{3} \cdot x_1^2 + 3 \cdot x_2^2, gk = 0.1$

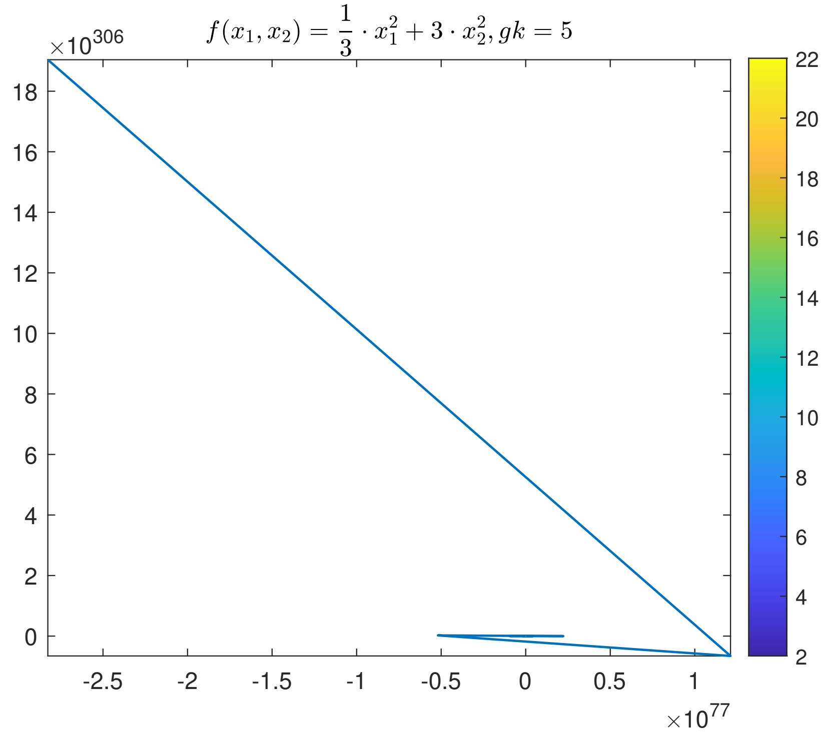

$f(x_1, x_2) = \frac{1}{3} \cdot x_1^2 + 3 \cdot x_2^2, gk = 0.3$
2.5
2
1.5
1
0.5
0
-0.5
-1
-1.5
-2
-2.5
-2
-1
0
1
2
22
20
18
16
14
12
10
8
6
4
2


$f(x_1, x_2) = \frac{1}{3} \cdot x_1^2 + 3 \cdot x_2^2, gk = 0.3$
1.5
1
0.5
0
-0.5
-1
-1.5
0
5
10
15
20
25
30
35
40
45

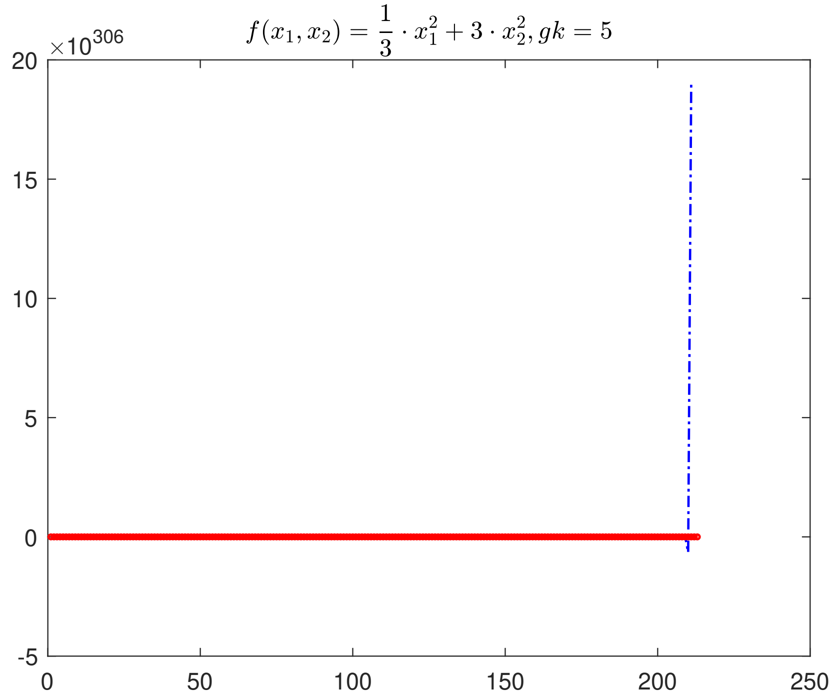

$f(x_1, x_2) = \frac{1}{3} \cdot x_1^2 + 3 \cdot x_2^2, gk = 3$
$\times 10^{307}$
6
5
4
3
2
1
0
-2
-1
0
1
2
22
20
18
16
14
12
10
8
6
4
2


$f(x_1, x_2) = \frac{1}{3} \cdot x_1^2 + 3 \cdot x_2^2, gk = 3$
$\times 10^{307}$
6
5
4
3
2
1
0
0
50
100
150
200
250
300

$f(x_1, x_2) = \frac{1}{3} \cdot x_1^2 + 3 \cdot x_2^2, gk = 5$



$f(x_1, x_2) = \frac{1}{3} \cdot x_1^2 + 3 \cdot x_2^2, gk = 5$



Μέθοδος Μέγιστης Καθόδου με Προβολή

Η μέθοδος μέγιστης καθόδου με προβολή αποτελείται από έναν βρόχο επανάληψης που έχει ως τερματική συνθήκη την

$$|\nabla f(x_\kappa)| < e$$

οπου ως e ορίζεται κάθε φορά η ζητούμενη ακρίβεια. Για όσο η συνθήκη είναι ψευδής, υπολογίζεται το νέο σημείο x σύμφωνα με την σχέση

$$x_{\kappa+1} = x_\kappa + \gamma_\kappa \cdot (\bar{x}_\kappa - x_\kappa)$$

όπου $\bar{x}_\kappa$, η προβολή του x_κ στο κυρτό σύνολο X, που δίνεται από την σχέση

$$\bar{x}_\kappa = Pr_X\{x_\kappa - s_\kappa \cdot \nabla f(x_\kappa)\}, s_\kappa > 0$$

Θέμα 2

Θέτουμε το s_κ ίσο με 5 και το γ_κ με 0.5. Ως αρχικό σημείο ορίζουμε το $(5, -5)$ και λαμβάνουμε τις ακόλουθες προσομοιώσεις. Ο αλγόριθμος φαίνεται να τερματίζει γιατί ο αριθμός των επαναλήψεων έχει ξεπεράσει το όριο που έχουμε θέσει και επομένως, ο εντοπισμός του ελαχίστου αποτυγχάνει.

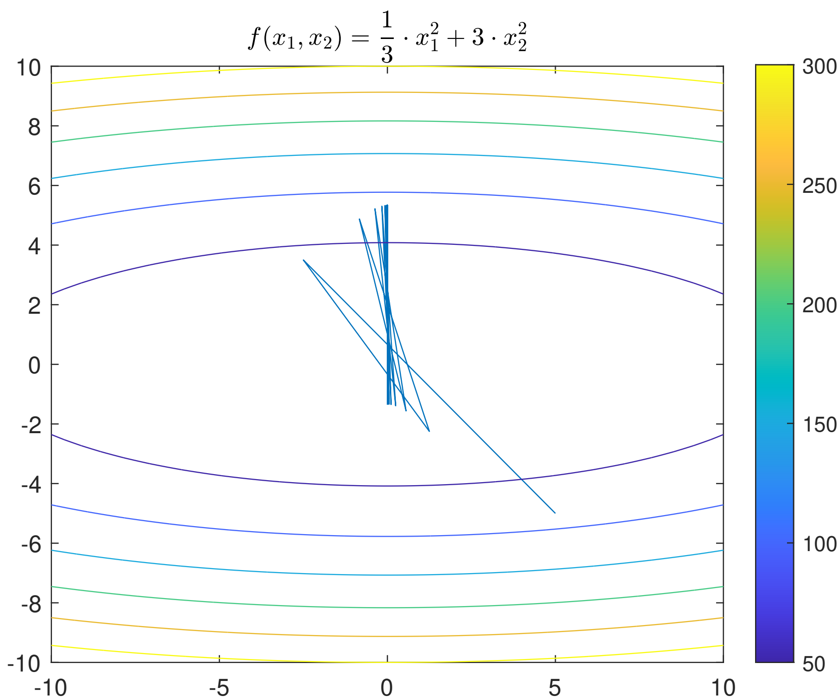
Φαίνεται, τόσο από το σχήμα όσο και από τον πίνακα τιμών πως ενώ η μεταβλητή x_1 συγκλίνει, η x_2, μετά την 18η επανάληψη, εναλλάσεται συνεχώς μεταξύ των τιμών -1.3333 και 5.3333. Αυτό συμβαίνει γιατί, συμπτωματικά, για τους δοσμένους περιορισμούς και τις δοσμένες τιμές γ_κ, s_κ και για $y_\kappa = 5.3333$ εχουμε

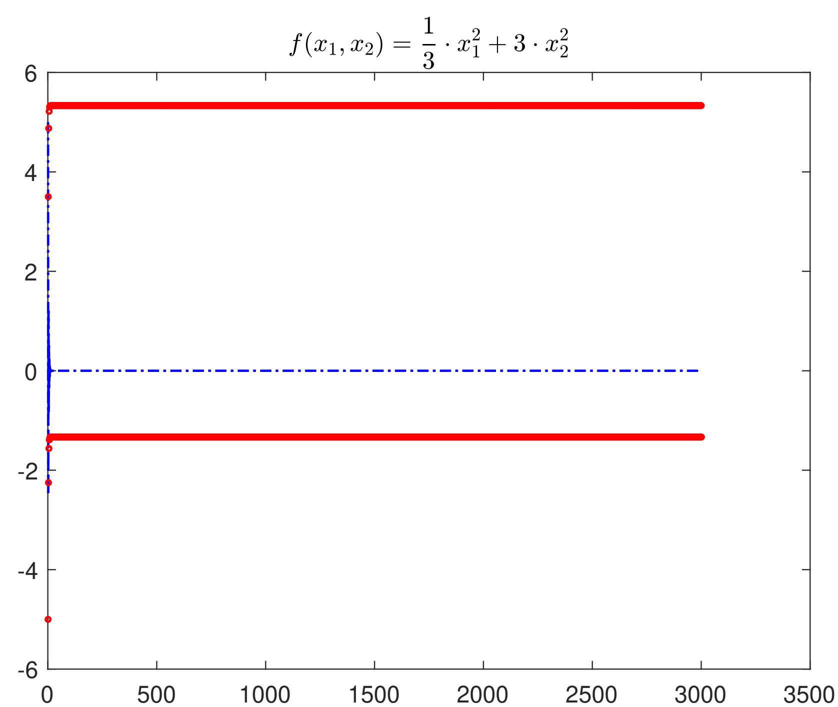
$$\bar{x_{2\kappa}} = Pr_X = \begin{cases} 12, & \text{αν x} \geq 12, \\ -8, & \text{αν x} \leq -8 \\ -29 \cdot x_{2\kappa}, & \text{αν} -8 < x < 12 \end{cases}$$

και άρα θα έχουμε $\bar{x_{2\kappa}} = -8$. Από την αναδρομική σχέση, $x_{2(\kappa+1)} = -1.3333$ το οποίο έχει ως αποτέλεσμα η νέα προβολή Pr_X να είναι ίση με 12 και το νέο $x_{2(\kappa+1)}$ να είναι 5.3333. Παρατηρείται δηλαδή ένας "εγκλωβισμός" εξαιτίας της συνιστώσας x_2 καθώς τυχαίνει ο αλγόριθμος να παγιδεύεται και να εναλλάσεται μεταξύ των δύο αυτών τιμών.

Σε αντίθεση με το θέμα 1, αυτήν την φορά τα x_κ που προκύπτουν σε κάθε επανάληψη, δεν απομακρύνονται ποτέ από το κυρτό σύνολο X. Αυτό είναι εφικτό, γιατί η αναδρομική σχέση που υπολογίζει το $x_{\kappa+1}$, είναι συνάρτηση της προβολής του x_κ με αποτέλεσμα, να εξασφαλίζεται κάθε φορά πως το νέο σημείο που προκύπτει θα ανήκει στο κυρτό σύνολο, θα είναι δηλαδή εφικτό.

Η χρήση της προβολής, παρόλ'αυτα, μπορεί να επιβάλλει το νέο σημείο να βρίσκεται εντός ενός κυρτού συνόλου, δεν υπόσχεται παρόλ'αυτά την σύγκλιση του αλγορίθμου.


$f(x_1, x_2) = \frac{1}{3} \cdot x_1^2 + 3 \cdot x_2^2$
10
8
6
4
2
0
-2
-4
-6
-8
-10
-10
-5
0
5
10
300
250
200
150
100
50


$f(x_1, x_2) = \frac{1}{3} \cdot x_1^2 + 3 \cdot x_2^2$
6
4
2
0
-2
-4
-6
0
500
1000
1500
2000
2500
3000
3500

Θέμα 3

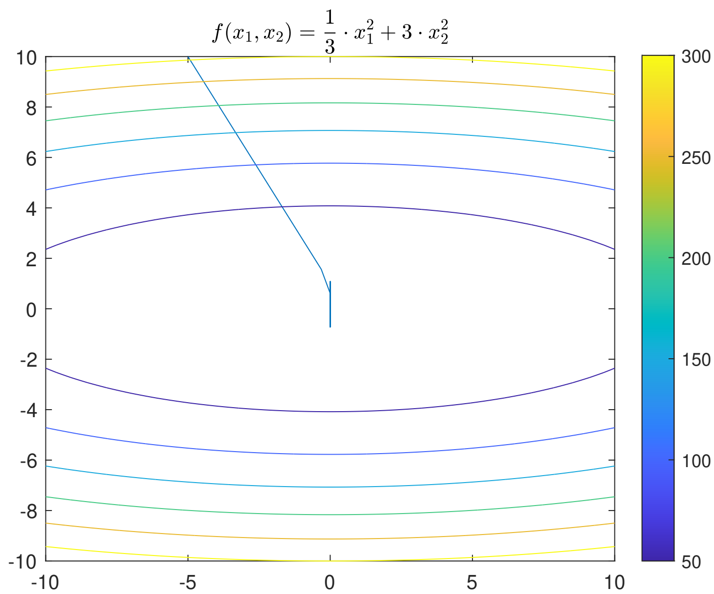
Θέτουμε γ_κ ίσο με 0.1 και s_κ ίσο με 15. Ως σημείο εκκίνησης ορίζεται το (-5, 10). Παρατηρουμε πως, σε αντίθεση με το θέμα 1 και 2, αυτήν την φορά η μέθοδος συγκλίνει. Πιο συγκεκριμένα, η μεταβλητή x_1 εντοπίζει το ελάχιστο μετά τις πρώτες 9 επαναλήψεις, ενώ η μεταβλητή x_2 χρειάζεται 2569. Για αυτό και στο πρώτο σχήμα παρατηρείται αυτή η διακύμανση μεταξύ των σημείων $(0, -0.673)$ και $(0, 1.077)$ στον κατακόρυφο άξονα μέχρι το x_2 να γίνει τελικά ίσο με 0.0015.

Πρώτος προτεινόμενος τρόπος βελτίωσης - Σταθερό s_κ

Προκειμένου να βελτιώσουμε τον αλγόριθμο με έναν απλό και πρακτικό τρόπο, επικεντρωνόμαστε στην επιλογή του βήματος s_κ. Είναι γνωστό πως μια καλή επιλογή στην τιμή του s_κ έχει ως αποτέλεσμα τη σύγκλιση της μέθοδου με λιγότερες επαναλήψεις και γενικά την καλύτερη λειτουργία του αλγορίθμου. Επομένως, μετά από δοκιμές, προτείνεται $s_\kappa = 10$. Για αυτήν την τιμή, έχουμε σύγκλιση του αλγορίθμου μετά από 80 επαναλήψεις. Τα αντίστοιχα διαγράμματα παρατίθενται ακριβώς κάτω από τα διαγράμματα για $s_\kappa = 15$.

Δεύτερος προτεινόμενος τρόπος βελτίωσης - Μεταβλητό s_κ

Εκτός από το σταθερό s_κ όμως, μπορούμε σε κάθε επανάληψη να επιλέγουμε το βέλτιστο. Θα μπορούσαμε δηλαδή να υπολογίζουμε το s_κ χρησιμοποιώντας τον κανόνα του Armijo ή να επιλέξουμε s_κ τ/ώ να ελαχιστοποιείται κάθε φορά το μέγεθος $f(x_\kappa + \gamma_\kappa \cdot (\bar{x}_\kappa - x_\kappa))$



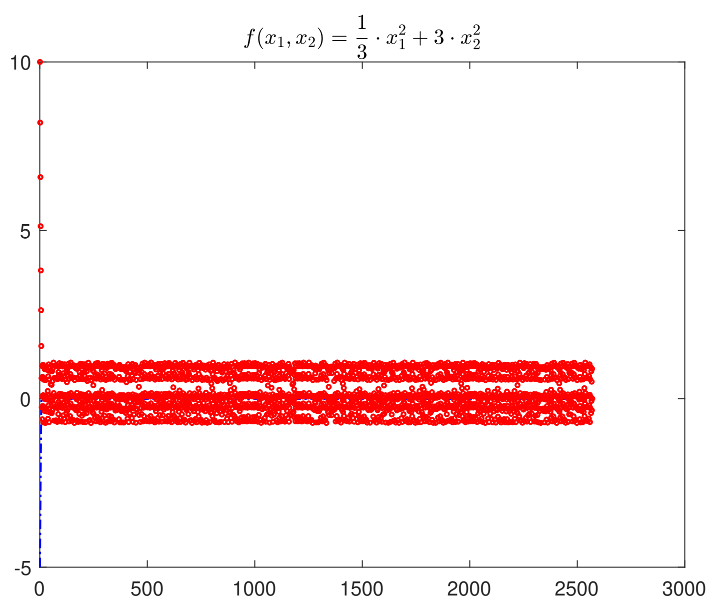


Figure 1: Διάγραμμα για $s_\kappa = 15$.

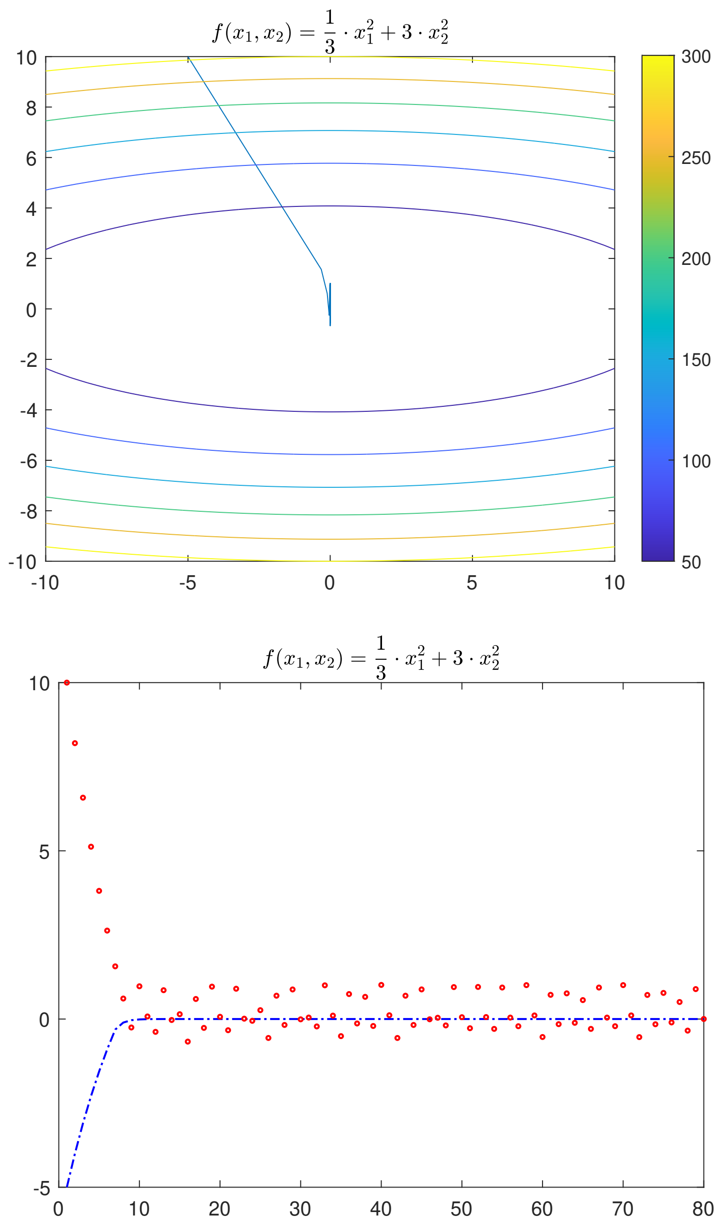


Figure 2: Διάγραμμα για $s_\kappa = 10$.

Θέμα 4

Αυτήν την φορά, το δοσμένο σημείο εκκίνησης (-8, 10) δεν ικανοποιεί τους περιορισμούς, δεν είναι δηλαδή εφικτό σημείο. Προκειμένου όμως να εφαρμόσουμε μία μεθόδο εφικτών κατευθύνσεων όπως είναι αυτή της μέγιστης καθόδου με προβολή πρέπει το σημείο εκκίνησης να είναι εφικτό. Περιμένουμε δηλαδή η μέθοδος αυτην την φορά να μην συγκλίνει. Παρόλ'αυτά, βλέπουμε πως μετά από 449 επαναλήψεις ο αλγόριθμος εντοπίζει το ελάχιστο. Αυτό πιθανότατα επιτυγχάνεται γιατί η αναδρομική σχέση περιέχει το μέγεθος της προβολής στο κυρτό σύνολο και έτσι όπως είναι ορισμένη η Pr_X καταφέρνει έπειτα από κάποιες επαναλήψεις να παράγει νέα $x_{\kappa+1}$ τα οποία ανήκουν στο κυρτό σύνολο X.

Δοκιμάζουμε να θέσουμε ως σημείο εκκίνησης όχι το δοσμένο $(-8, 10)$ αλλά την προβολή αυτού στο κυρτό σύνολο X. Οι προβολές υπολογίζονται σύμφωνα με τις σχέσεις

$$\bar{x_{1\kappa}} = Pr_X = \begin{cases} 5, & \text{αν x} \geq 5, \\ -10, & \text{αν x} \leq -10 \\ \frac{14}{15} \cdot x_{1\kappa}, & \text{αν} -10 < x < 5 \end{cases}$$

$$\bar{x_{2\kappa}} = Pr_X = \begin{cases} 12, & \text{αν x} \geq 12, \\ -8, & \text{αν x} \leq -8 \\ 0.4 \cdot x_{2\kappa}, & \text{αν} -8 < x < 12 \end{cases}$$

Επομένως, θα έχουμε ως σημείο εκκίνησης το (5, -8) Από τις νέες γραφικές παραστάσεις που προκύπτουν, παρατηρούμε ότι η πορεία που ακολουθεί είναι η ίδια με αυτή του άλλου σημείο, από την επανάληψη που εισέρχεται στο κυρτό σύνολο μέχρι την επανάληψη που εντοπίζει το ελάχιστο.

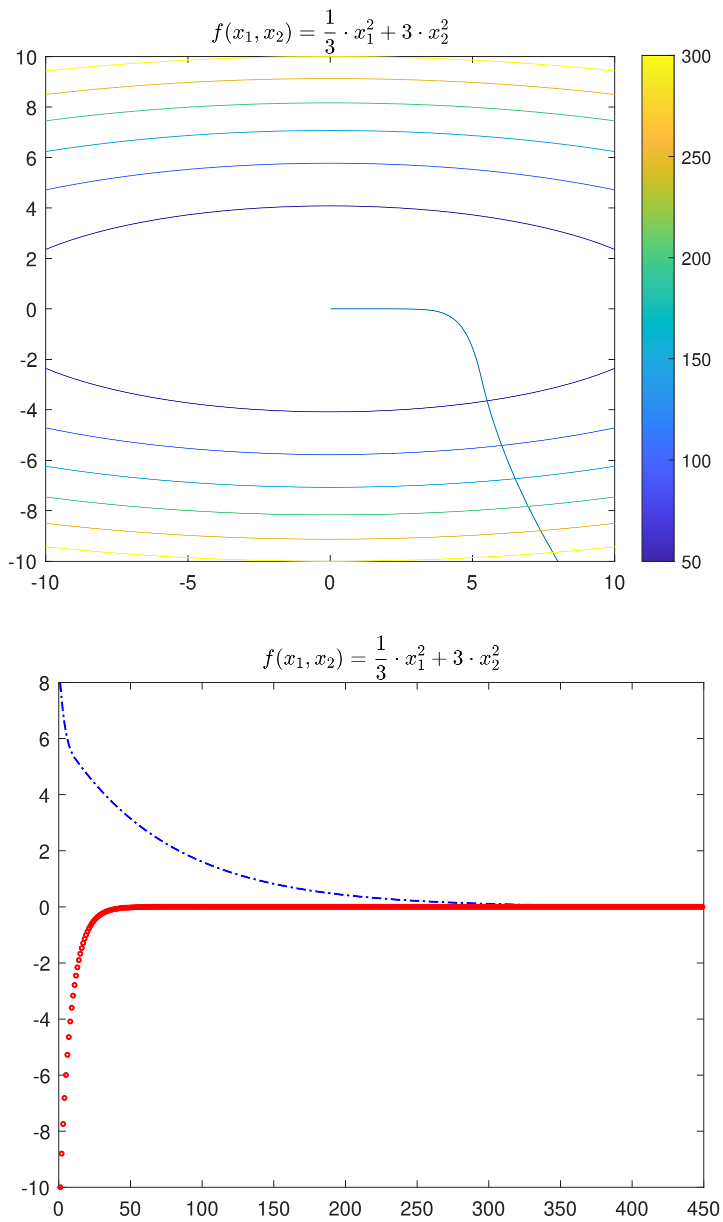
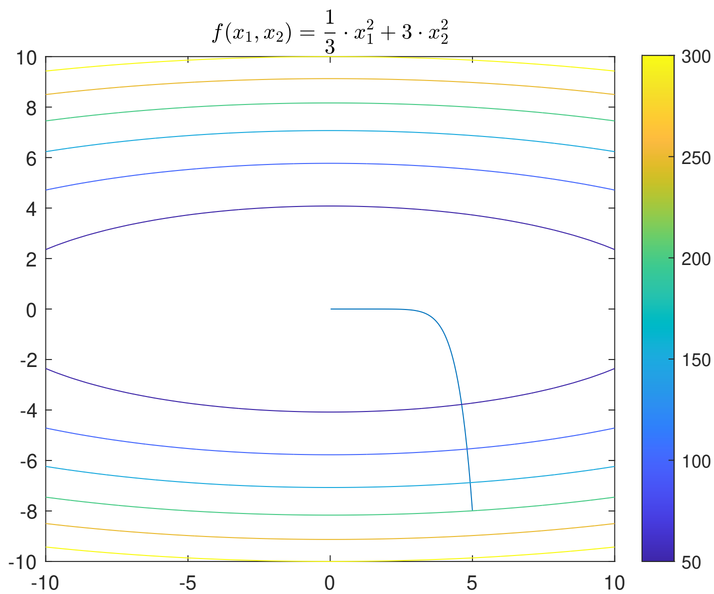


Figure 3: Διάγραμμα δοσμένου σημείου εκκίνησης.



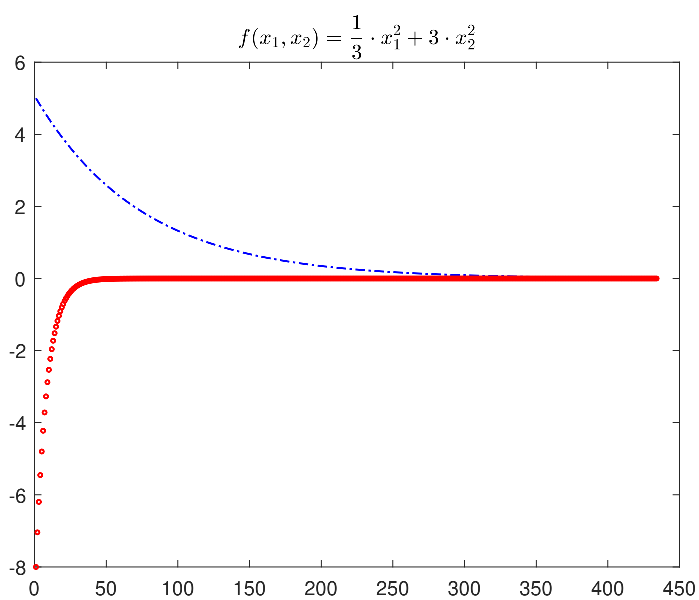


Figure 4: Διάγραμμα τροποποιημένου σημείου εκκίνησης.

Συγκεντρωτικός πίνακας επαναλήψεων

$s_\kappa = 5, \gamma_\kappa = 0.5$	$s_\kappa = 15, \gamma_\kappa = 0.1$	$s_\kappa = 15, \gamma_\kappa = 0.1$	$s_\kappa = 0.1, \gamma_\kappa = 0.2$	$s_\kappa = 0.1, \gamma_\kappa = 0.2$
3001	2570	80	449	434