2η Εργαστηριακή Άσκηση

Εργασία της Πλευρίδη Βασιλική Βαρβάρα (ΑΕΜ:10454)

Η άσκηση αυτή έχει ως στόχο την ελαχιστοποίηση μιας δοσμένης συνάρτησης f πολλών μεταβλητών χωρίς κάποιον περιορισμό με την χρήση των εξής μεθόδων:

- **Μέθοδος Μέγιστης Καθόδου (Steepest Descent)**
- **Μέθοδος Newton**
- **Μέθοδος Levenberg Marquardt**

Η αντικειμενική συνάρτηση της οποίας ψάχνουμε το ελάχιστο είναι η $\boldsymbol{f(x,y) = x^3 e^{-x^2-y^4}}$

Στα θέματα 2,3,4 θα παρουσιαστούν γραφικά η σχέση της τιμής της f καθώς ο αριθμός των επαναλήψεων k αυξάνεται αλλά και η σύγκλιση των (x,y) στην πάροδο της κάθε μεθόδου χρησιμοποιώντας ως σημεία έναρξης τα $(x_0,y_0) = [(1,1),(-1,-1),(0,0)]$.

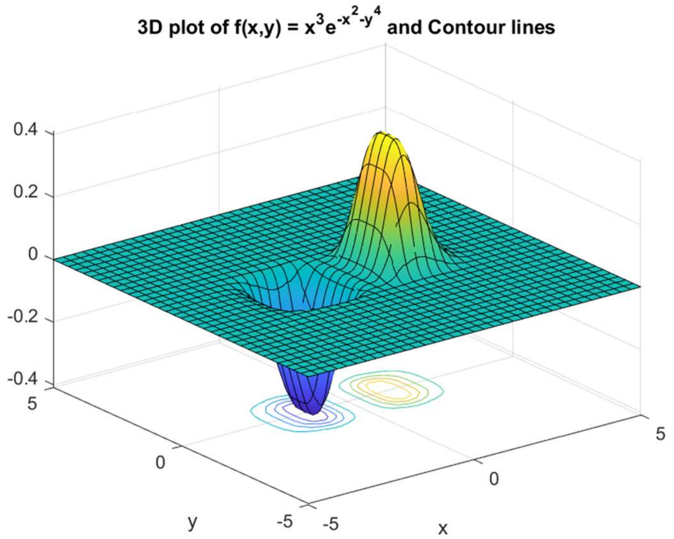
Ιδιαίτερα σημαντική είναι η επιλογή του βήματος γ_k, το οποίο παίζει καθοριστικό ρόλο στην εξέλιξη του κάθε αλγορίθμου καθώς χρησιμοποιείται για τον υπολογισμό του νέου x_{k+1} σε κάθε επανάληψη. Η κάθε μέθοδος λοιπόν θα μελετηθεί για γ_k:

1. σταθερό και ίσο με **0.5**
2. τέτοιο ώστε να ελαχιστοποιεί την $f(x_k + \gamma_k d_k)$
3. βάσει του κανόνα Armijo

Σε κάθε θέμα λοιπόν, θα παρατηρηθούν οι διαφορές που εκφέρουν τα διαφορετικά γ_k και τα διαφορετικά σημεία εκκίνησης στην υλοποίηση της κάθε μεθόδου.

Θέμα 1

Στο θέμα αυτό γίνεται μια γραφική παρουσίαση της f σε τρισδιάστατο χώρο, με την προσθήκη των ισοϋψών καμπυλών της. Όπως είναι εύκολο να παρατηρηθεί από τα παρακάτω γραφήματα, η f ελαχιστοποιείται στα αρνητικά x και κοντά στον άξονα $y = 0$, ενώ παράλληλα παρουσιάζει τοπικό ελάχιστο στο σημείο $(x,y) = (0,0)$:



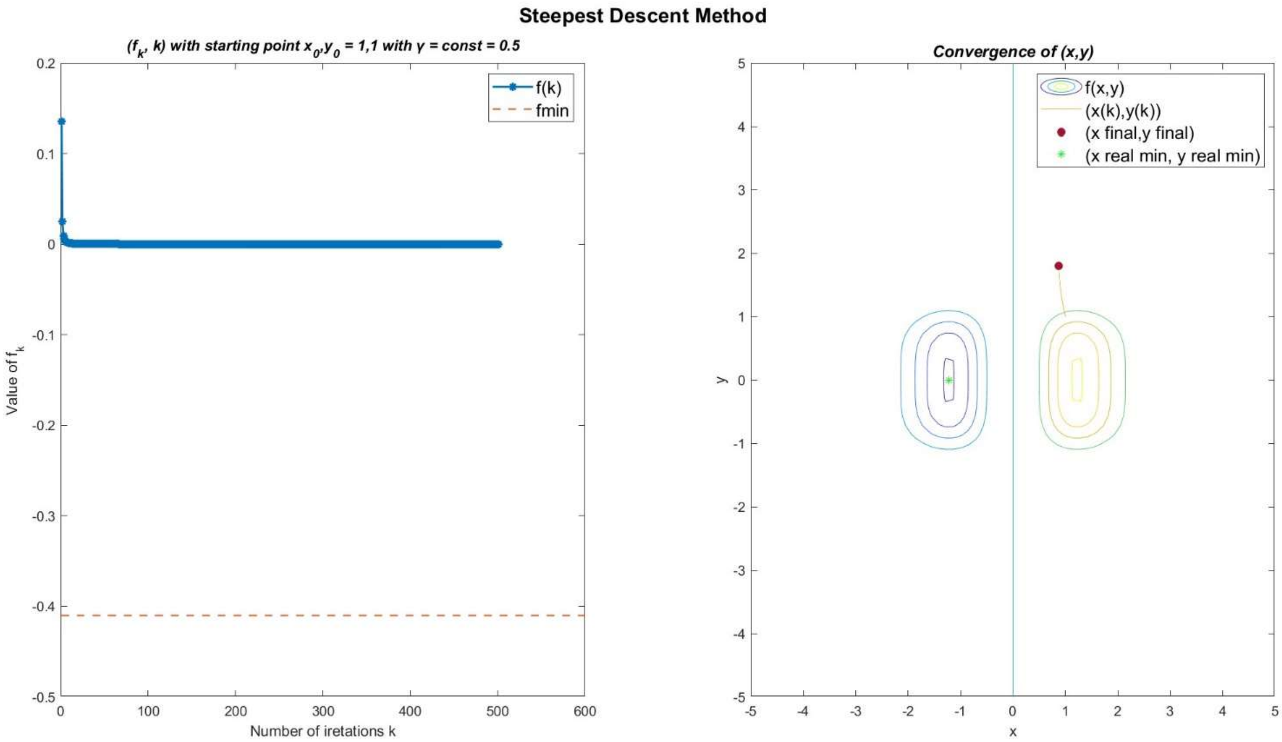
Θέμα 2 - Μέθοδος Μέγιστης Καθόδου

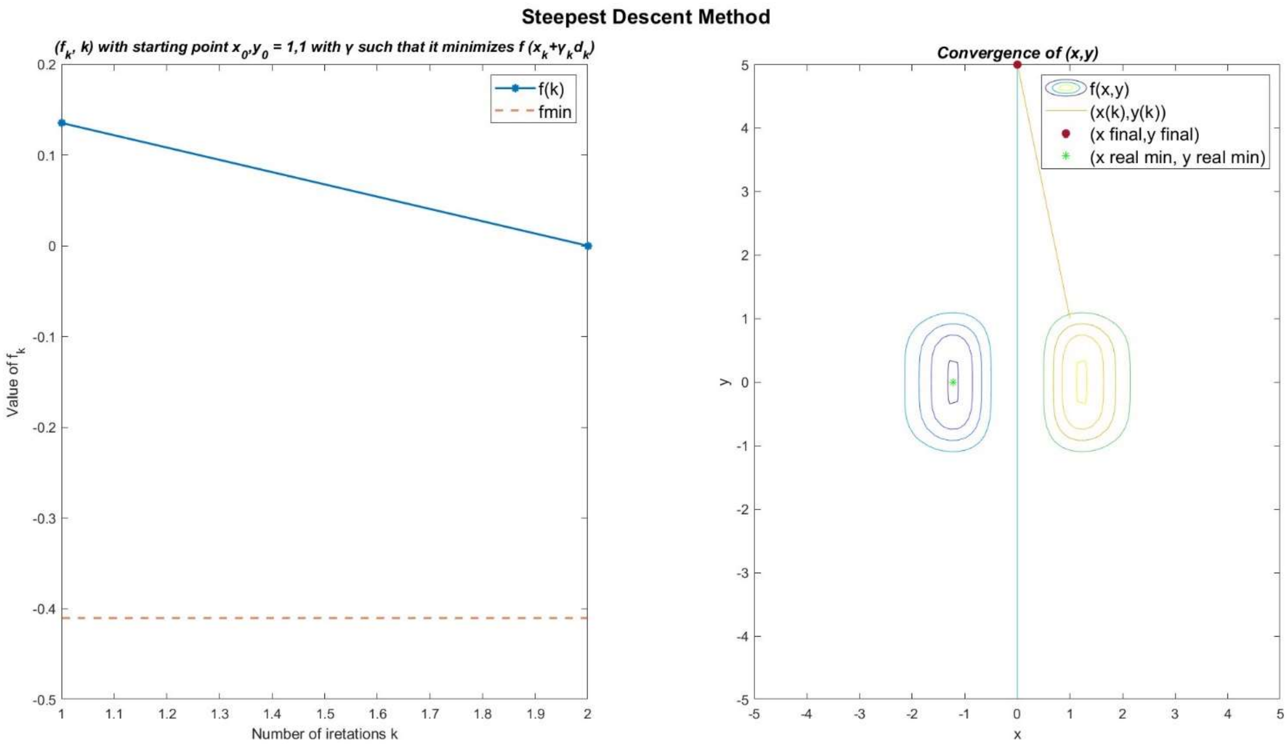
Ως πρώτη μέθοδο ελαχιστοποίησης χρησιμοποιείται η **Μέθοδος Μέγιστης Καθόδου.** Η μέθοδος αυτή, όπως και οι υπόλοιπες που θα μελετηθούν, είναι μέθοδος κλίσης, δηλαδή έχει ως κύριο άξονα υλοποίησης την ιδέα της επαναληπτικής καθόδου. Ο αλγόριθμος λοιπόν, εξελίσσεται με κάθετα βήματα προς το ελάχιστο που όλο και μικραίνουν και που πρακτικά όμως είναι άπειρα. Για να οδηγηθούμε λοιπόν σε τερματισμό, επιλέγεται μια **σταθερά τερματισμού** του αλγορίθμου $\boldsymbol{\varepsilon = 10^{-4}}$, η οποία θα είναι κοινή για όλες τις μεθόδους που θα ακολουθήσουν.

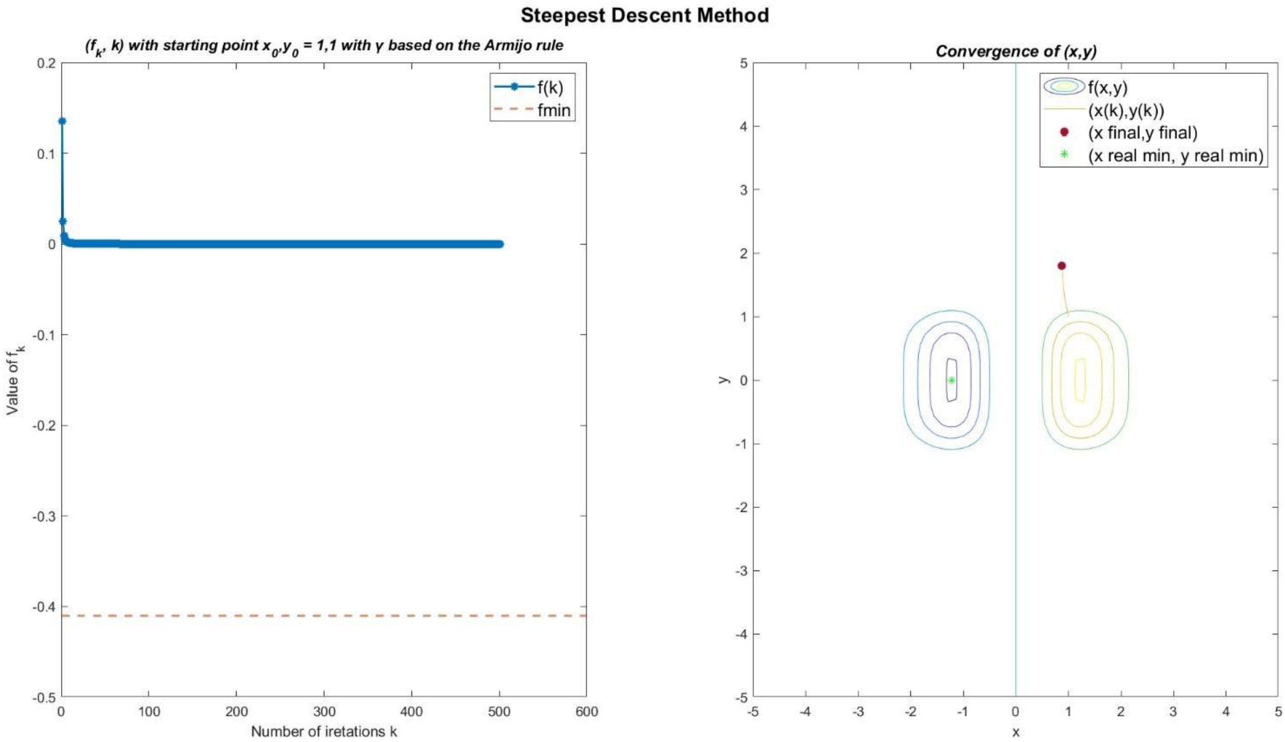
Η κατεύθυνση αναζήτησης αυτού του αλγορίθμου ορίζεται ως $d_k = -\Delta_k \nabla f(x_k)$ με $\Delta_k = I$.

Τα γραφικά αποτελέσματα όπως αυτά προκύπτουν μέσω της υλοποίησης στο MATLAB είναι τα εξής:

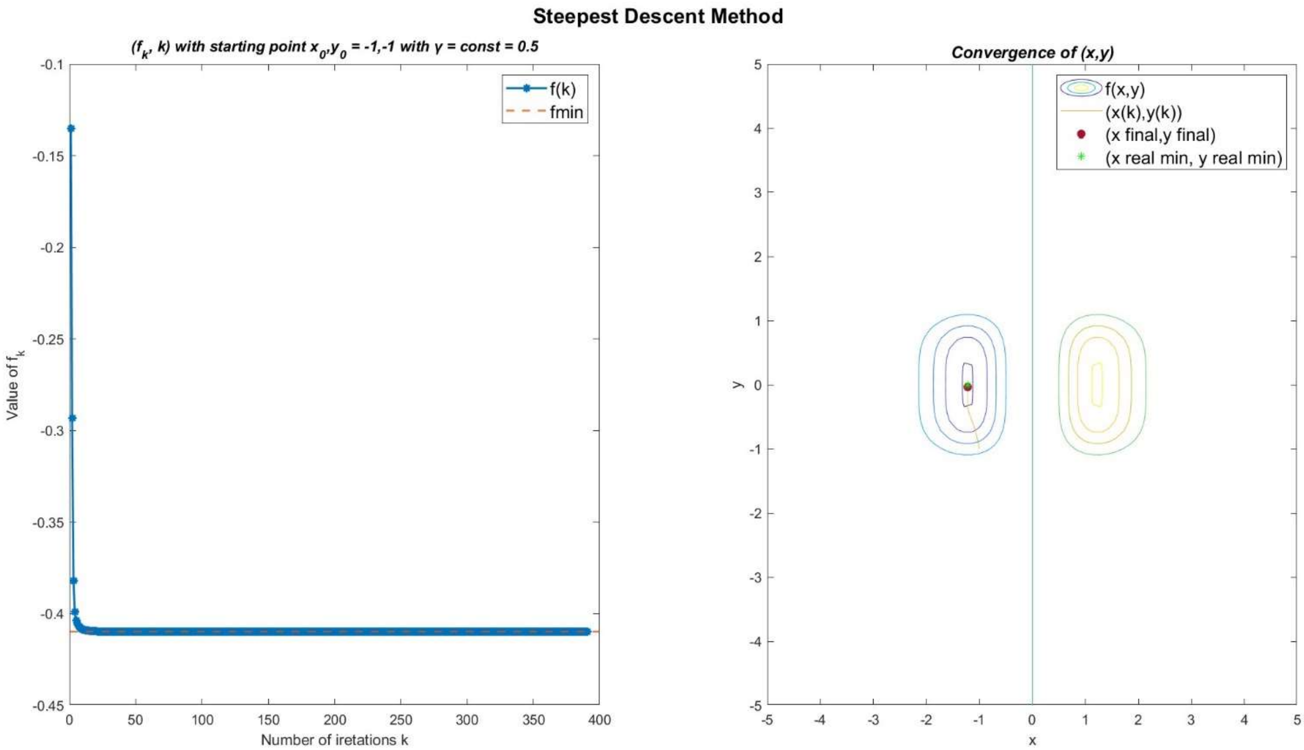
Με σημείο εκκίνησης το $(\mathbf{1}, \mathbf{1})$:

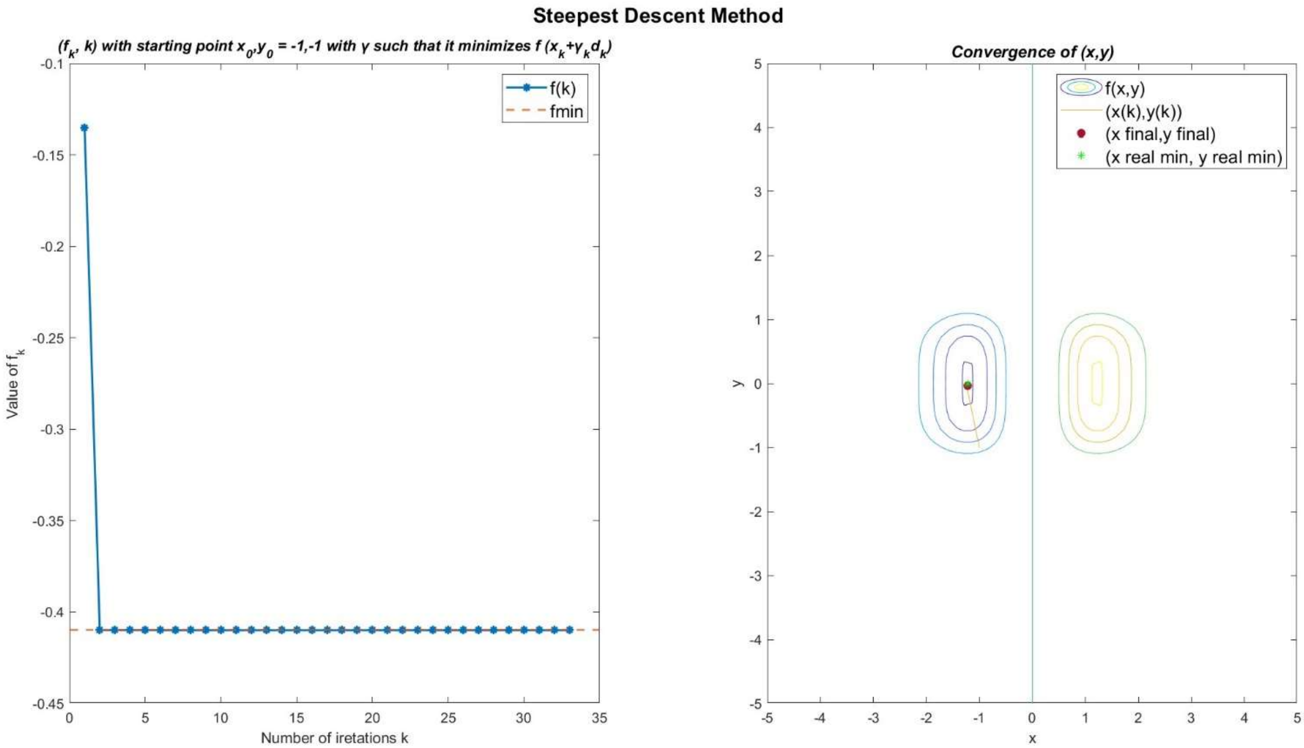


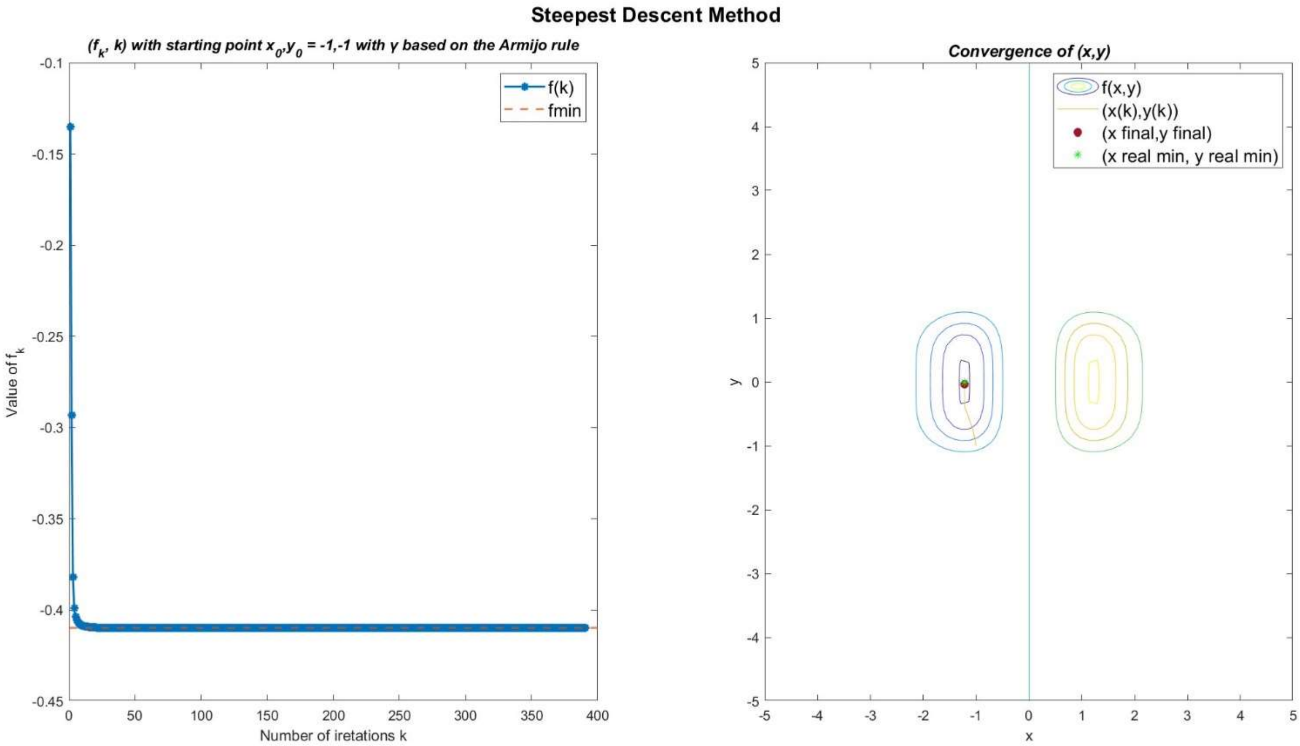




Με σημείο εκκίνησης το $(-\mathbf{1}, -\mathbf{1})$:







Ένας γενικότερος σχολιασμός για την μορφή και του τι παρουσιάζουν τα παραπάνω γραφήματα είναι χρήσιμος για την καλύτερη κατανόησή τους. Στο αριστερό υπογράφημα, βλέπουμε με την μπλε γραμμή την εξέλιξη της ελαχιστοποιημένης f_k στην πάροδο των k επαναλήψεων ενώ με την διακεκομμένη κόκκινη την πραγματική ελάχιστη τιμή της f. Έτσι, μπορούμε με ευκολία να καταλάβουμε αν ο αλγόριθμος οδηγεί στο όντως ζητούμενο αποτέλεσμα.

Σχετικά με το δεξί υπογράφημα, σκοπός του είναι η παρατήρηση της σταδιακής σύγκλισης των (x, y). Για την καλύτερη μελέτη των αποτελεσμάτων, εισαγάγουμε και πάλι την θέση του πραγματικού ελαχίστου, την θέση του τελικού προσεγγισμένου ελαχίστου από τον αλγόριθμο, τοποθετημένα και παρατηρούμενα πάνω στην f.

<u>Σύγκριση με βάση τα σημεία εκκίνησης</u>

Τα γραφήματα με σημείο εκκίνησης το $(0,0)$ παραλείπονται αφού δεν παρουσιάζουν κάποιο ιδιαίτερο αποτέλεσμα. Αυτό συμβαίνει γιατί όπως είπαμε η f παρουσιάζει τοπικό ελάχιστο στο σημείο αυτό και έτσι όταν ξεκινάμε τον αλγόριθμο από εκεί, τερματίζει κατευθείαν χωρίς καμία επανάληψη k καθώς παγιδεύεται και συγκλίνει κατευθείαν στο τοπικό ελάχιστο.

Αναφορικά με τα υπόλοιπα αποτελέσματα με αρχικά σημεία τα $(1,1)$ και $(-1,-1)$, στην πρώτη περίπτωση, πάλι ο αλγόριθμος παγιδεύεται στο τοπικό ελάχιστο και αδυνατεί να συνεχίσει την αναζήτηση του ολικού. Στην δεύτερη όμως, και με τις 3 επιλογές του γ_k, παρατηρείται ότι το ελάχιστο προσεγγίζεται αρκετά καλά.

<u>Σύγκριση με βάση την επιλογή του βήματος</u>

Για την καλύτερη μελέτη των αποτελεσμάτων, παρατίθεται παρακάτω ένας πίνακας που παρουσιάζει τις επαναλήψεις k για κάθε σημείο εκκίνησης και επιλεγόμενο γ_k:

Μέθοδος Μέγιστης Καθόδου			
Αριθμός επαναλήψεων k	*γ=0.5*	*γ(k) τέτοιο ώστε να ελαχιστοποιεί την f(x(k)+γ(k)d(k))*	*γ(k) σύμφωνα με τον κανόνα Armijo*
[1,1]	*500*	*1*	*500*
[-1,-1]	*390*	*32*	*390*
[0,0]	*0*	*0*	*0*

Η μέθοδος παγιδεύεται σε τοπικό ελάχιστο
Η μέθοδος προσεγγίζει σωστά το ελάχιστο

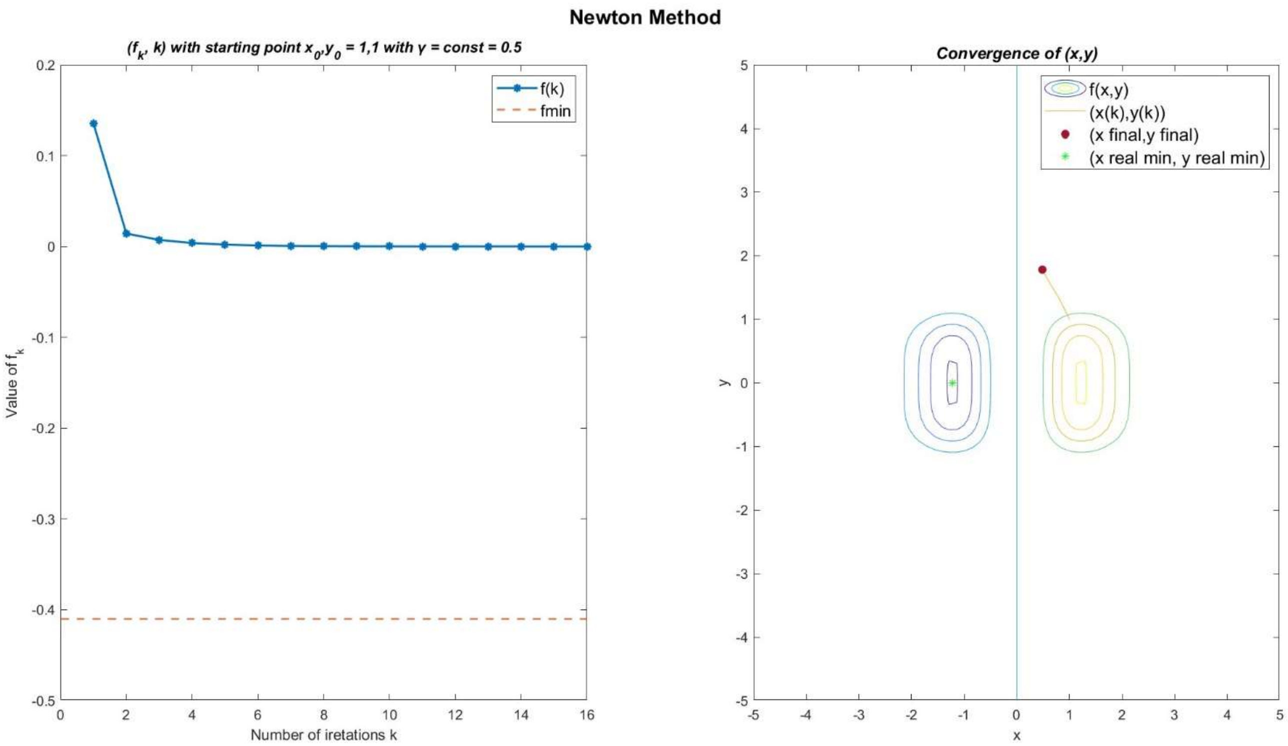
Όπως παρατηρείται εύκολα από τα παραπάνω, επιλέγοντας το γ_k τέτοιο ώστε να ελαχιστοποιεί την $f(x(k) + \gamma(k)d(k))$, ο αλγόριθμος συγκλίνει πολύ πιο γρήγορα συγκριτικά με τις άλλες δύο επιλογές. Να σημειωθεί ότι για την ελαχιστοποίηση της ζητούμενης συνάρτησης χρησιμοποιήθηκε η μέθοδος του χρυσού τομέα που υλοποιήθηκε στην πρώτη εργαστηριακή άσκηση.

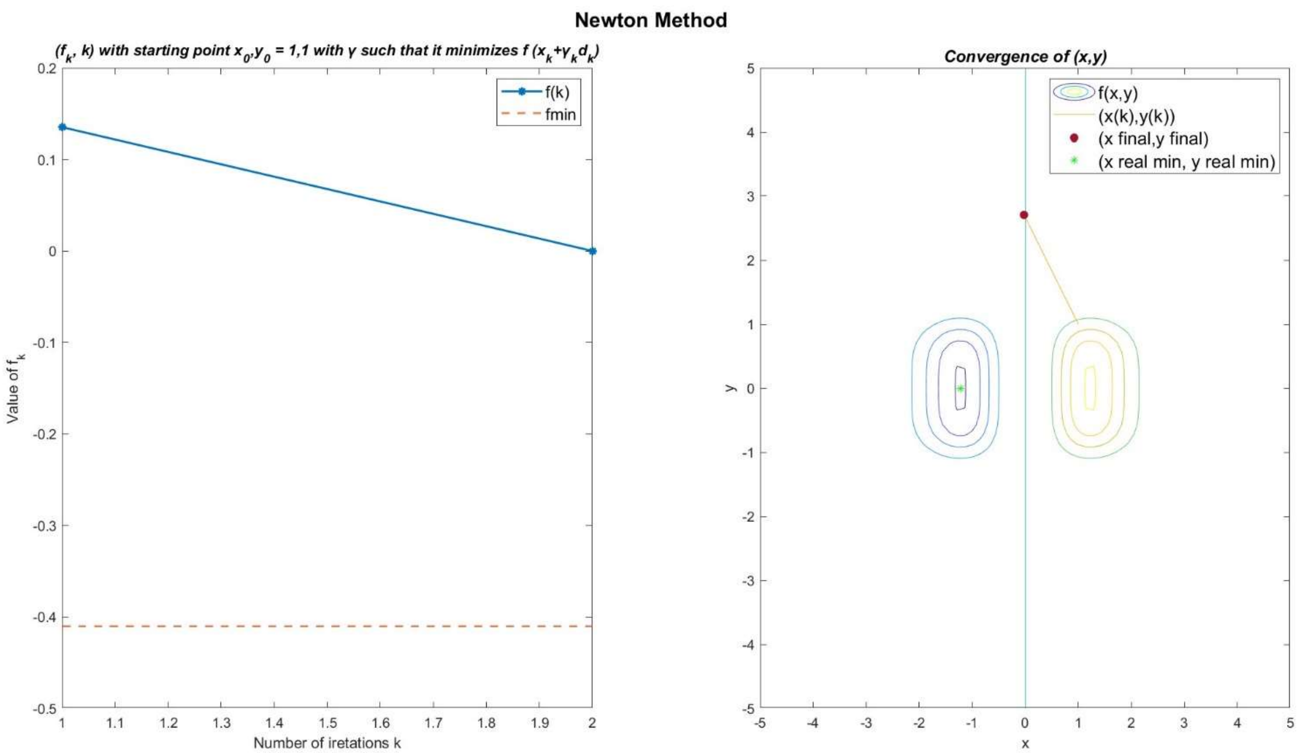
<u>Θέμα 3 Μέθοδος Newton</u>

Η διαφορά αυτής της μεθόδου με την προηγούμενη είναι η κατεύθυνση αναζήτησης $d_k = -\Delta_k \nabla f(x_k)$ αφού σε αυτή την περίπτωση $\Delta_k = [\nabla^2 f(x_k)]^{-1}$ με $[\nabla^2 f(x_k)]$ θετικά ορισμένο. Σημαντικό είναι να σημειωθεί ότι στην περίπτωση που ο παραπάνω πίνακας δεν είναι θετικά ορισμένος, η μέθοδος θα αναζητήσει μέγιστο καθώς δεν κάνει διαχωρισμό μεταξύ σημείων ελαχίστου και μεγίστου.

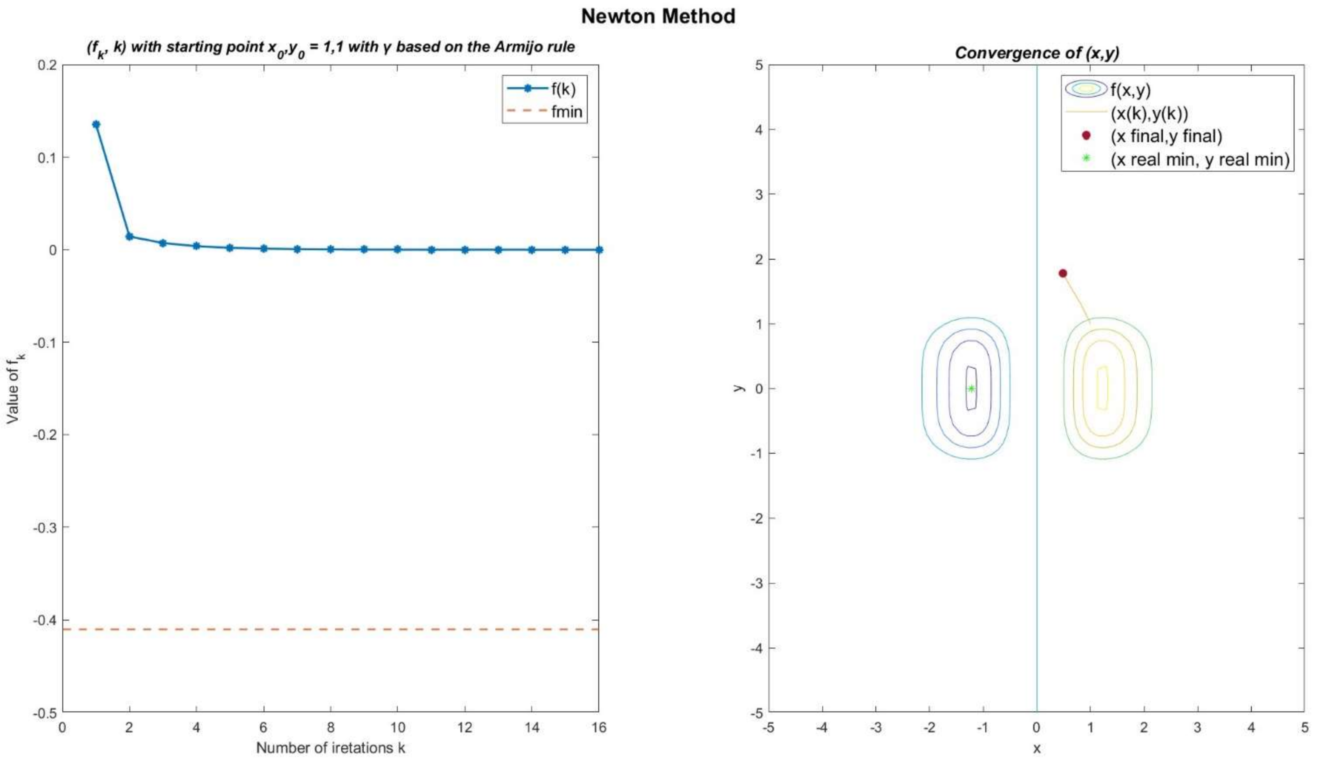
Τα γραφικά αποτελέσματα όπως αυτά προκύπτουν μέσω της υλοποίησης στο MATLAB είναι τα παρακάτω:

Με σημείο εκκίνησης το $(\mathbf{1}, \mathbf{1})$:

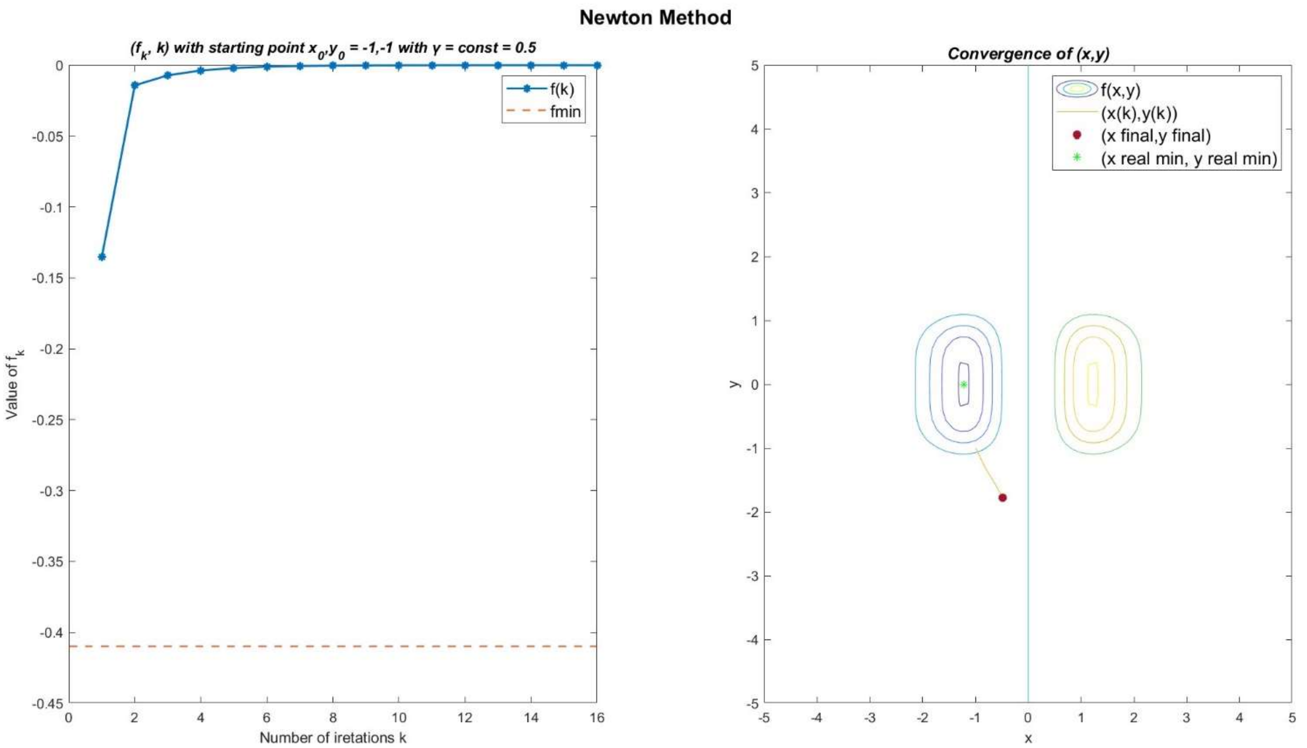


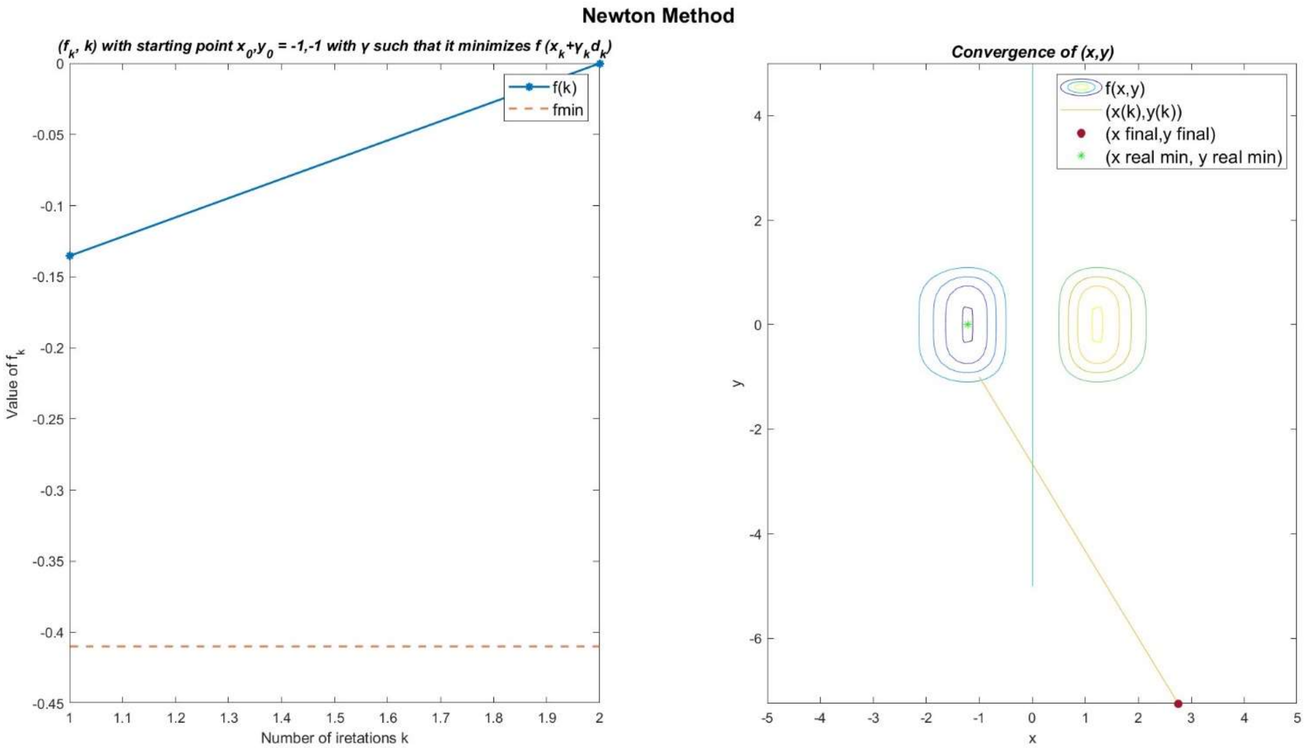


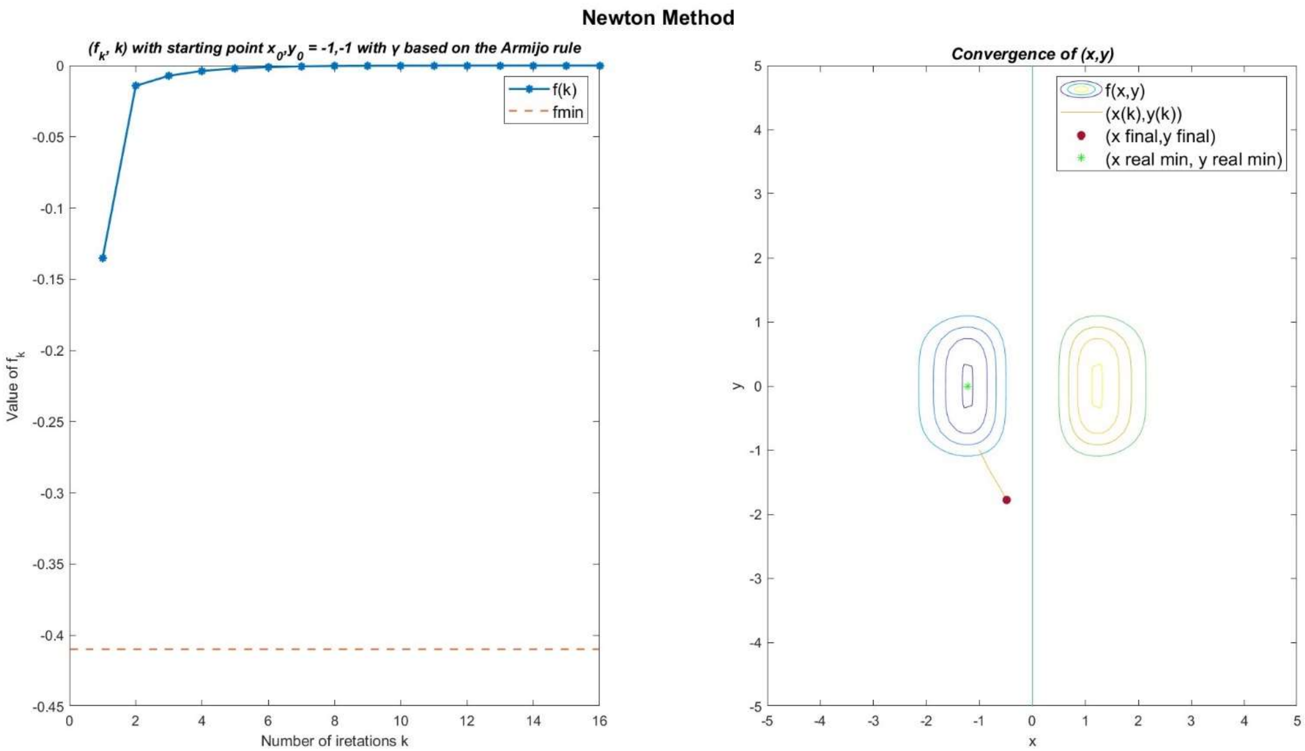
.



Με σημείο εκκίνησης το $(-\mathbf{1},-\mathbf{1})$:







<u>Σύγκριση με βάση τα σημεία εκκίνησης</u>

Όπως και στην προηγούμενη μέθοδο έτσι και σε αυτήν, τα γραφήματα με σημείο εκκίνησης το $(0,0)$ παραλείπονται αφού δεν παρουσιάζουν κάποιο ιδιαίτερο αποτέλεσμα. Στην περίπτωση που το σημείο εκκίνησης είναι το $(1,1)$, παρατηρείται ξανά ότι ο αλγόριθμος παγιδεύεται στο τοπικό ελάχιστο της συνάρτησης $(0,0)$. Η μελέτη όμως για $(x_0, y_0) = (-1,-1)$ παρουσιάζει μεγάλο ενδιαφέρον. Σε αντίθεση με την μέθοδο μέγιστης καθόδου ,ο αλγόριθμος συγκλίνει στο $(0,0)$ και όχι στο πραγματικό ελάχιστο. Η διαφοροποίηση αυτή έχει να κάνει με την κατεύθυνση αναζήτησης και συγκεκριμένα με το γεγονός ότι σε αυτή την περίπτωση ο πίνακας $[\nabla^2 f(x_k)]$ δεν είναι θετικά ορισμένος. Έτσι, ο αλγόριθμος ξεκινά την αναζήτηση του ολικού μεγίστου και παγιδεύεται στο $(0,0)$, το οποίο λειτουργεί ως το τοπικό μέγιστο αυτή την φορά.

<u>Σύγκριση με βάση την επιλογή του βήματος</u>

Για την καλύτερη μελέτη των αποτελεσμάτων, παρατίθεται παρακάτω ένας πίνακας που παρουσιάζει τις επαναλήψεις k για κάθε σημείο εκκίνησης και επιλεγόμενο γ_k:

Μέθοδος Newton			
Αριθμός επαναλήψεων k	*γ=0.5*	*γ(k) τέτοιο ώστε να ελαχιστοποιεί την f(x(k)+γ(k)d(k))*	*γ(k) σύμφωνα με τον κανόνα Armijo*
[1,1]	*15*	*1*	*15*
[-1,-1]	*15*	*1*	*15*
[0,0]	*0*	*0*	*0*

Η μέθοδος δεν οδηγεί στην ελαχιστοποίηση
Η μέθοδος παγιδεύεται σε τοπικό ελάχιστο

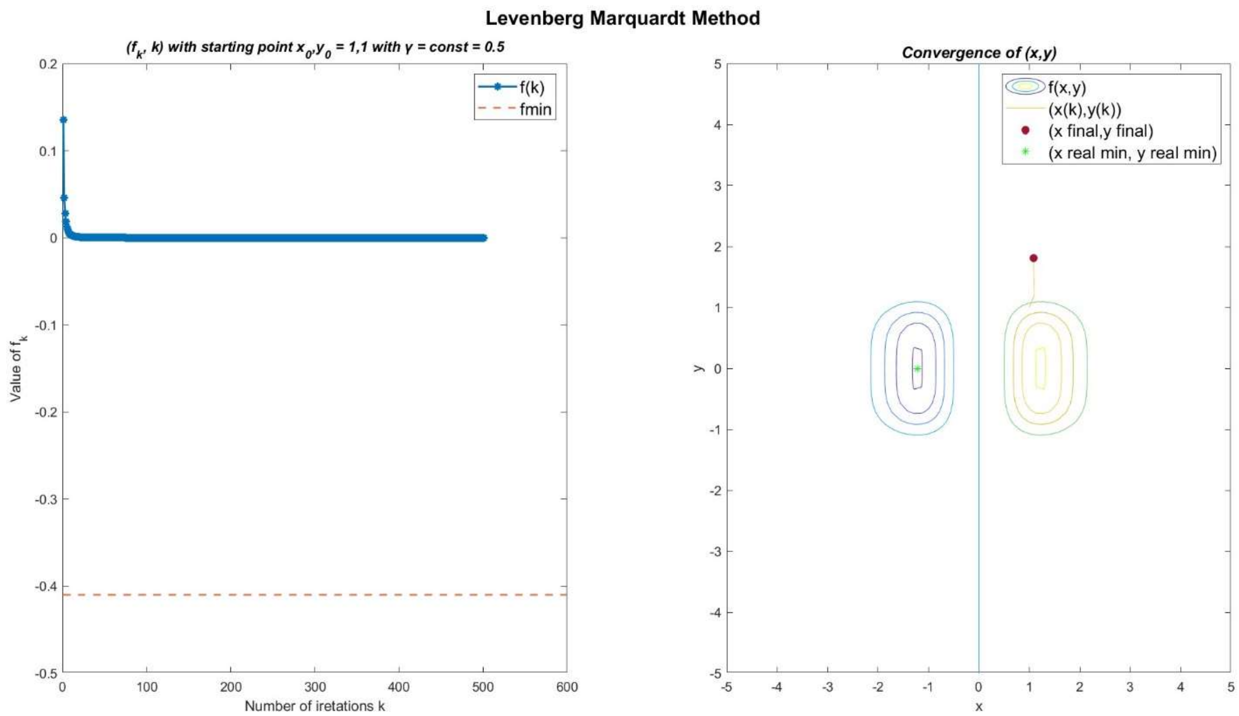
Όπως παρατηρείται, η επιλογή του γ_k *τέτοιο ώστε να ελαχιστοποιεί την* $f(x(k) + \gamma(k)d(k))$ χρειάζεται τον μικρότερο αριθμό επαναλήψεων k για την ολοκλήρωση της.

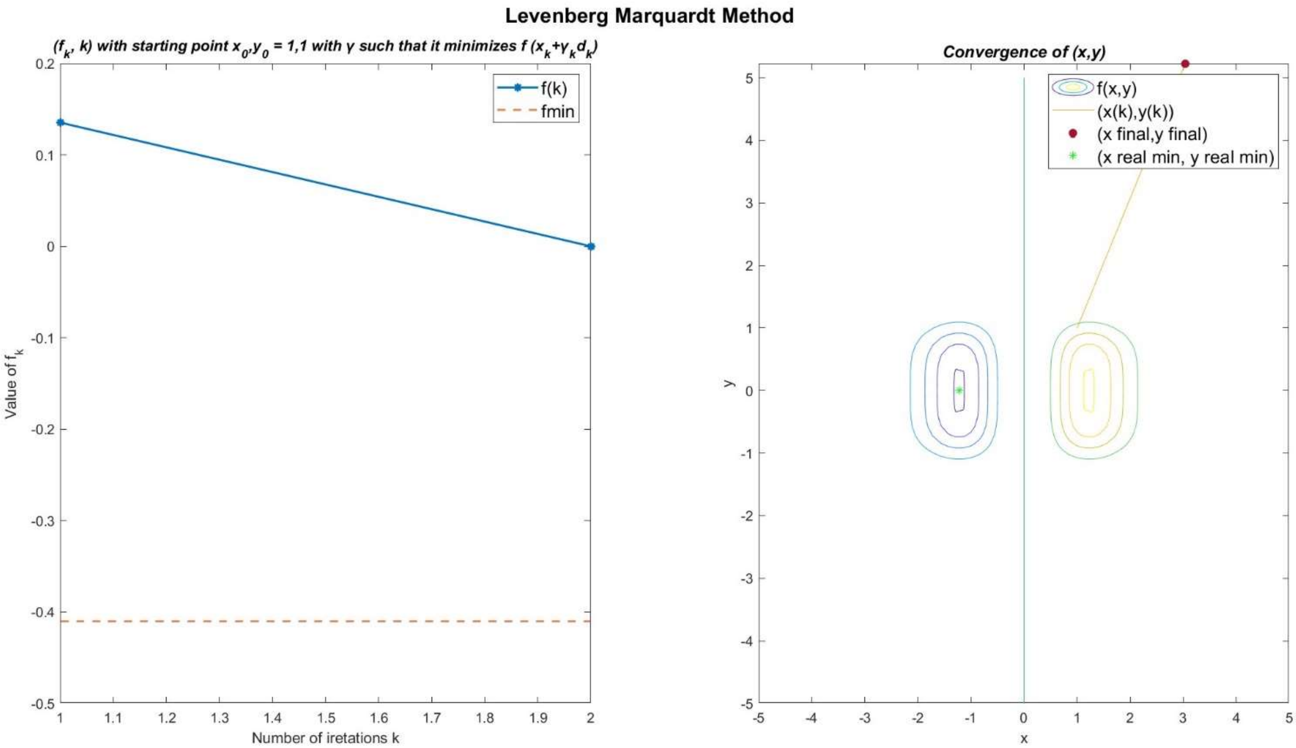
<u>Θέμα 3 Μέθοδος Levenberg Marquardt</u>

Η μέθοδος αυτή ουσιαστικά αποτελεί με τροποποίηση της μεθόδου Newton που παρουσιάστηκε στο προηγούμενο θέμα και καλύπτει ουσιαστικά τις περιπτώσεις που ο πίνακας $[\nabla^2 f(x_k)]$ δεν είναι θετικά ορισμένος.

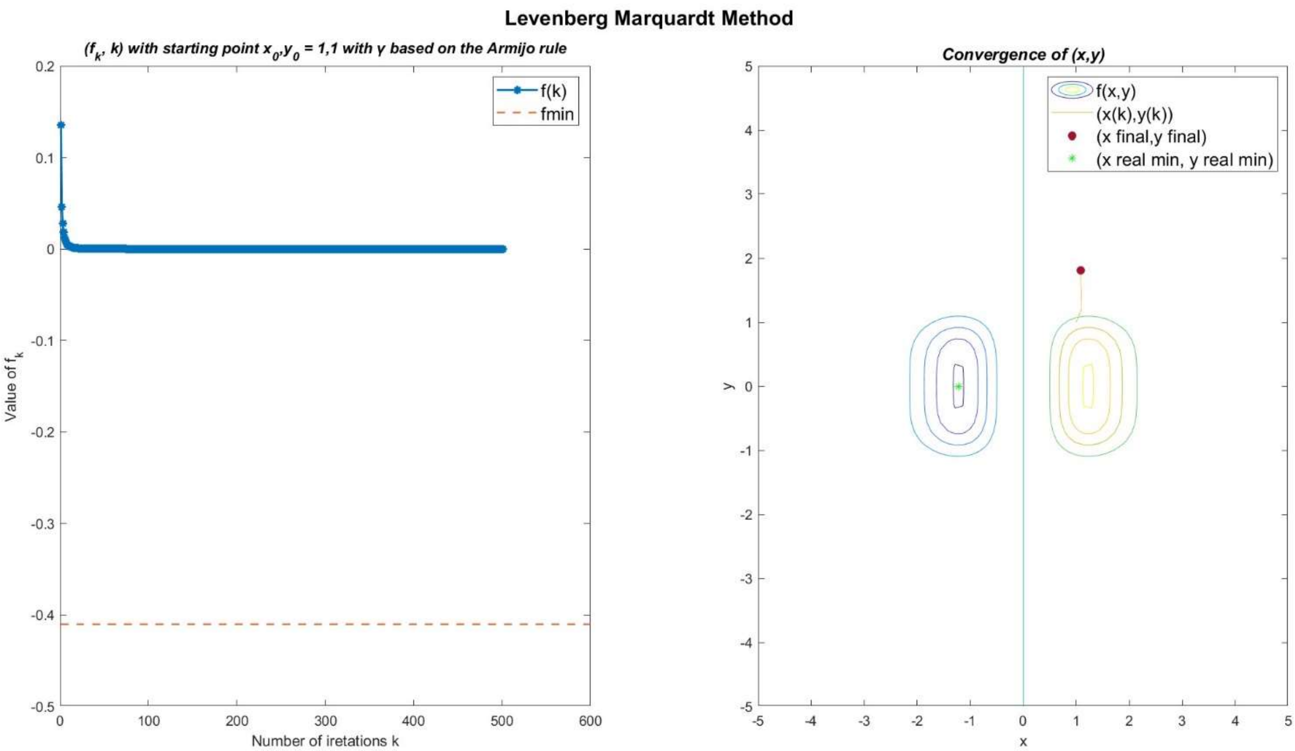
Τα γραφικά αποτελέσματα όπως αυτά προκύπτουν μέσω της υλοποίησης στο MATLAB είναι τα παρακάτω:

Με σημείο εκκίνησης το $(\mathbf{1}, \mathbf{1})$:



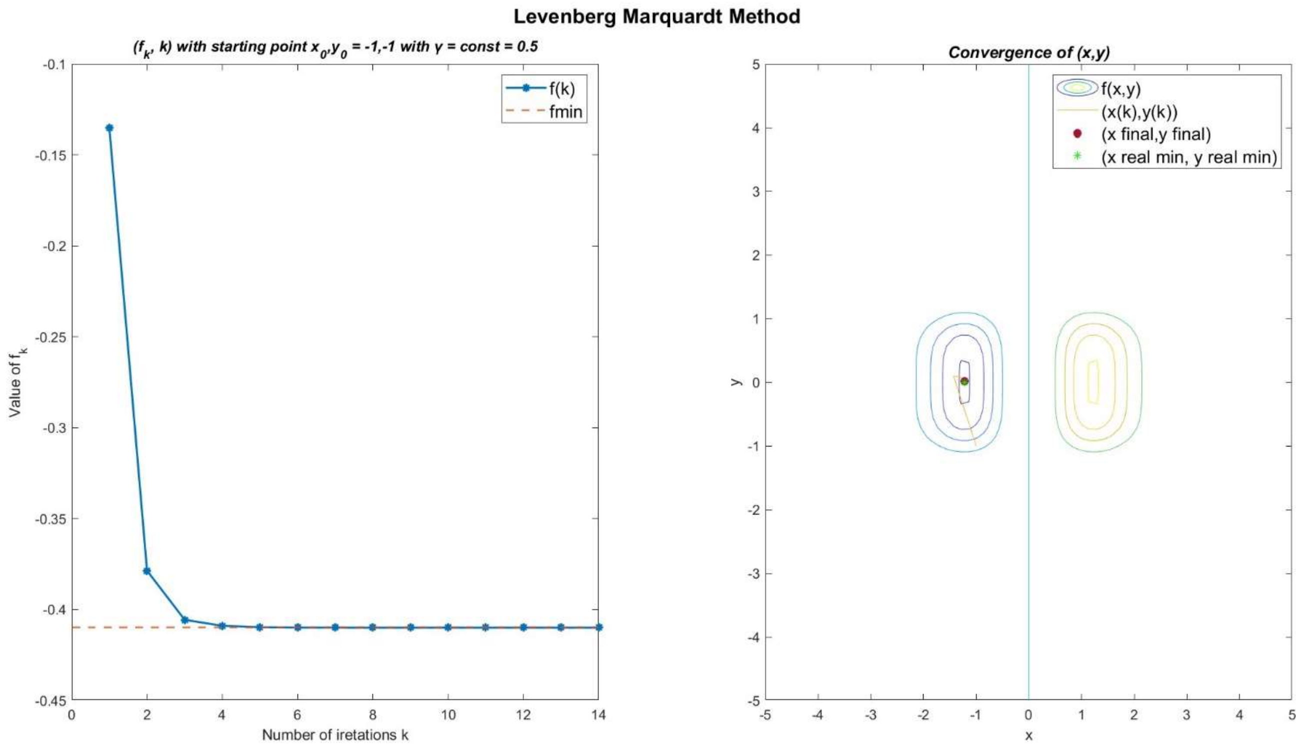


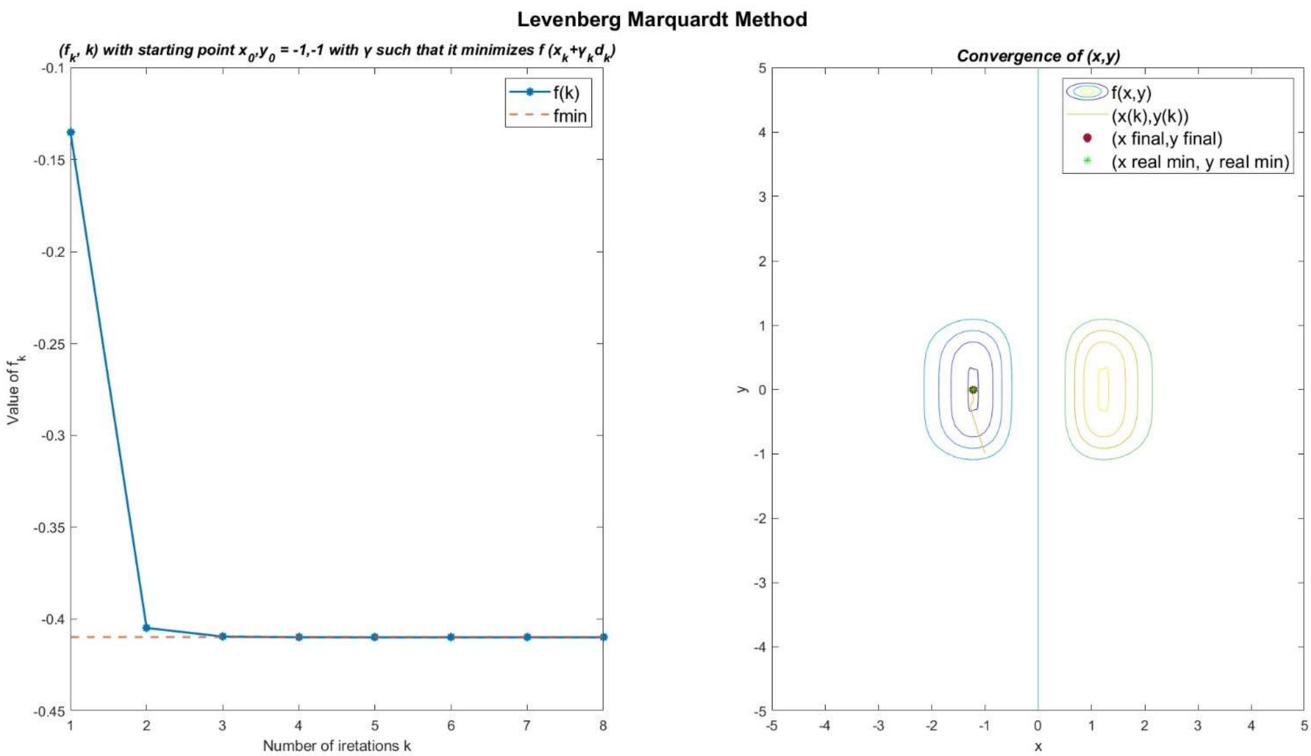
Levenberg Marquardt Method
(f_k, k) with starting point x_0,y_0 = 1,1 with γ such that it minimizes $f\,(x_k+\gamma_k d_k)$
f(k)
fmin
Value of f_k
Number of iretations k
Convergence of (x,y)
f(x,y)
(x(k),y(k))
(x final,y final)
(x real min, y real min)
x
y

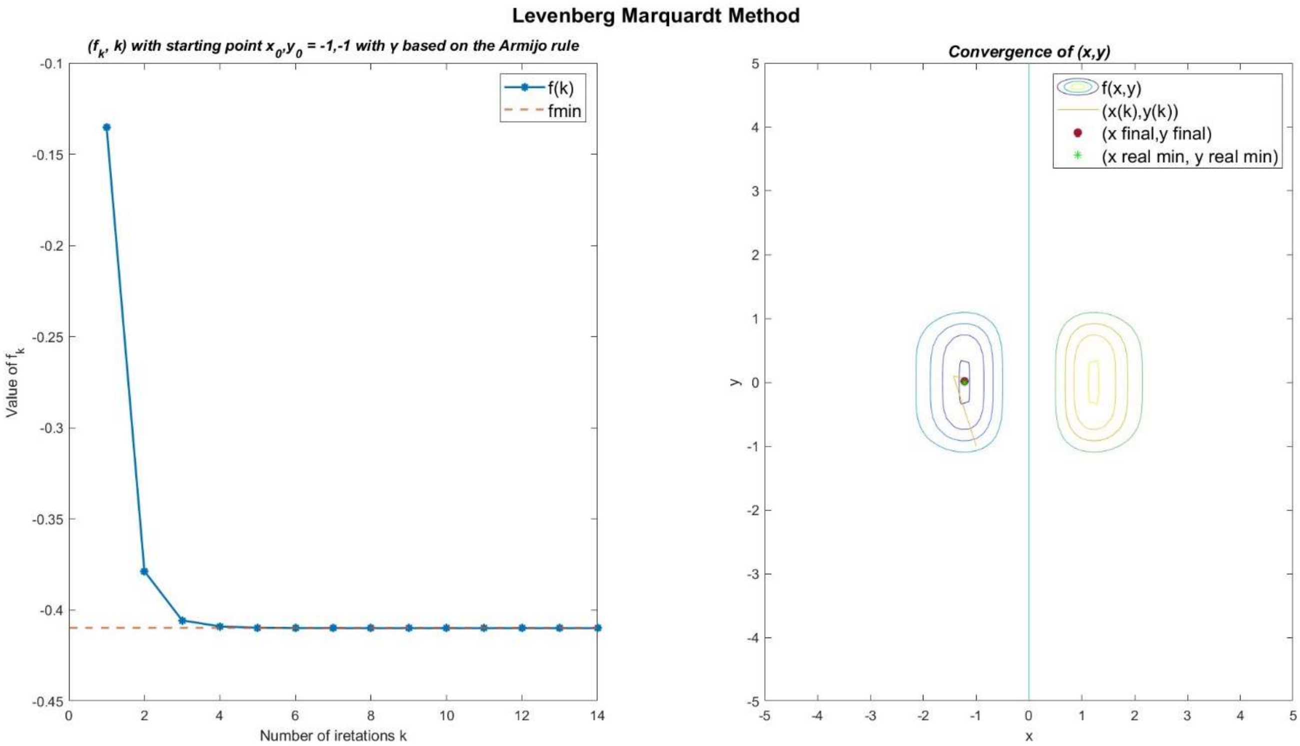


Levenberg Marquardt Method
(f_k, k) with starting point x_0,y_0 = 1,1 with γ based on the Armijo rule
f(k)
fmin
Value of f_k
Number of iretations k
Convergence of (x,y)
f(x,y)
(x(k),y(k))
(x final,y final)
(x real min, y real min)
x
y

Με σημείο εκκίνησης το $(-\mathbf{1}, -\mathbf{1})$:







Σύγκριση με βάση τα σημεία εκκίνησης

Όπως και στην προηγούμενη μέθοδο έτσι και σε αυτήν, τα γραφήματα με σημείο εκκίνησης το $(0{,}0)$ παραλείπονται αφού δεν παρουσιάζουν κάποιο ιδιαίτερο αποτέλεσμα. Τα υπόλοιπα αποτελέσματα, ως προς τα σημεία εκκίνησης, είναι πάνω κάτω τα ίδια με αυτά της Μεθόδου Μέγιστης Καθόδου, δηλαδή για $(1{,}1)$ ο αλγόριθμος εγκλωβίζεται στο τοπικό ελάχιστο ενώ για $(-1,-1)$ προσεγγίζουν σωστά το ολικό ελάχιστο της f.

Σύγκριση με βάση την επιλογή του βήματος

Για την καλύτερη μελέτη των αποτελεσμάτων, παρατίθεται παρακάτω ένας πίνακας που παρουσιάζει τις επαναλήψεις k για κάθε σημείο εκκίνησης και επιλεγόμενο γ_k:

Μέθοδος Levenberg Marquardt			
Αριθμός επαναλήψεων k	*γ=0.5*	*γ(k) τέτοιο ώστε να ελαχιστοποιεί την f(x(k)+γ(k)d(k))*	*γ(k) σύμφωνα με τον κανόνα Armijo*
[1,1]	*500*	*1*	*500*
[-1,-1]	*13*	*7*	*13*
[0,0]	*0*	*0*	*0*

Η μέθοδος παγιδεύεται σε τοπικό ελάχιστο
Η μέθοδος προσεγγίζει σωστά το ελάχιστο

Σημαντικό είναι να σχολιαστεί ότι έχει τεθεί ένας πρόσθετος έλεγχος τερματισμού ο οποίος τερματίζει τον αλγόριθμο στις περιπτώσεις όπου το k φτάνει στην τιμή 500. Άρα, στην περίπτωση του σημείου εκκίνησης $(1{,}1)$ για $\gamma_k = 0.5$ και γ_k σύμφωνα με τον κανόνα Armijo, ο αλγόριθμος ολοκληρώνεται λόγω του παραπάνω. Σχετικά με τον αριθμό επαναλήψεων k, βλέπουμε πάλι ότι το γ_k *τέτοιο ώστε να ελαχιστοποιεί την* $f(x(k)+\gamma(k)d(k))$ χρειάζεται τον μικρότερο αριθμό k για την υλοποίηση του.

Συμπεράσματα και Συγκρίσεις

Παρατηρώντας όλα τα παραπάνω δεδομένα και αποτελέσματα, οδηγούμαστε στα εξής συμπεράσματα:

Αναφορικά με τα σημεία εκκίνησης, **το $(-1,-1)$ είναι το μοναδικό που μας οδηγεί στην ελαχιστοποίηση** της αντικειμενικής συνάρτησης ενώ τα άλλα δύο οδηγούν σε εγκλωβισμό σε τοπικό ελάχιστο. Η **μέθοδος Newton βέβαια, απορρίπτεται** γενικότερα για την συγκεκριμένη διερεύνηση καθώς δεν οδηγεί σε σωστά συμπεράσματα λόγω του μη θετικά ορισμένου πίνακα $[\nabla^2 f(x_k)]$ σε μερικές περιπτώσεις. Τέλος, σχετικά με την επιλογή του **γ_k, η αποδοτικότερη επιλογή φαίνεται να είναι αυτή που οδηγεί στην ελαχιστοποίηση της $f(x(k)+\gamma(k)d(k))$**. Βέβαια, σημαντικό είναι να σημειωθεί ότι **για επιλογή μεγαλύτερου και σταθερού γ_k** και κοντά στην μονάδα, από την τιμή 0.5 που επιλέχθηκε, **πιθανόν να υπήρχε ταχύτερη σύγκλιση** και σε αυτήν την πρώτη περίπτωση.

Υλοποίηση στο MATLAB

Σχετικά με τα αρχεία MATLAB,τα οποία παρατίθενται μαζί με την ηλεκτρονική αναφορά, σημαντικό είναι να σχολιαστεί ότι κάθε μέθοδος υλοποιείται σε διαφορετικό αρχείο. Βέβαια, τα plots όπως και η επιλογή του γ_k, γίνεται κάθε φορά εσωτερικά αυτού. Η υλοποίηση του θέματος 1 βρίσκεται σε ξεχωριστό αρχείο ενώ τα θέματα 2,3,4 σε ένα κοινό. Συγκεκριμένα , ανάλογα ποιο θέμα θέλουμε να μελετήσουμε , μπορούμε να βάλουμε την ανάλογη τιμή στην μεταβλητή `option`. Τέλος, σχετικά με τον κώδικα Armijo, ως προεπιλεγμένες αρχικές συνθήκες χρησιμοποιήθηκαν τα εξής:

```
a=10^(-3), b=1/5, m(k)=0, s=0.5
```

Βιβλιογραφία

Για την υλοποίηση των αλγορίθμων όπως και για κάποια σχόλια για τον αριθμό των αντικειμενικών συναρτήσεων χρησιμοποιήθηκε το βιβλίο «Τεχνικές Βελτιστοποίησης» του κ.Ροβιθάκη, εκδόσεις ΤΖΙΟΛΑ.