Отчет по лабораторной работе №1

Методы нулевого и первого порядка

Аксенова Валерия, Коваленко Александр, Шустров Андрей

Описание методов:

Всем методам по умолчанию установлены ограничения на максимальное количество итераций (*1000*) и точность определения сходимости (*1e-6*)

1. *Градиентный спуск со стратегией выбора шага:* использован базовый алгоритм без оптимизаций, который принимает в виде параметра функцию вычисления размера шага. Реализованы 4 подхода:
   -Постоянный шаг
   -Фиксированное уменьшение размера шага
   -Экспоненциальное уменьшение размера шага
   -Изменение размера шага по косинусной кривой

2. *Градиентный спуск, реализованный на методе золотого сечения:* использован базовый алгоритм без оптимизаций, в котором с помощью метода золотого сечения находится оптимальный размер шага на каждой итерации.

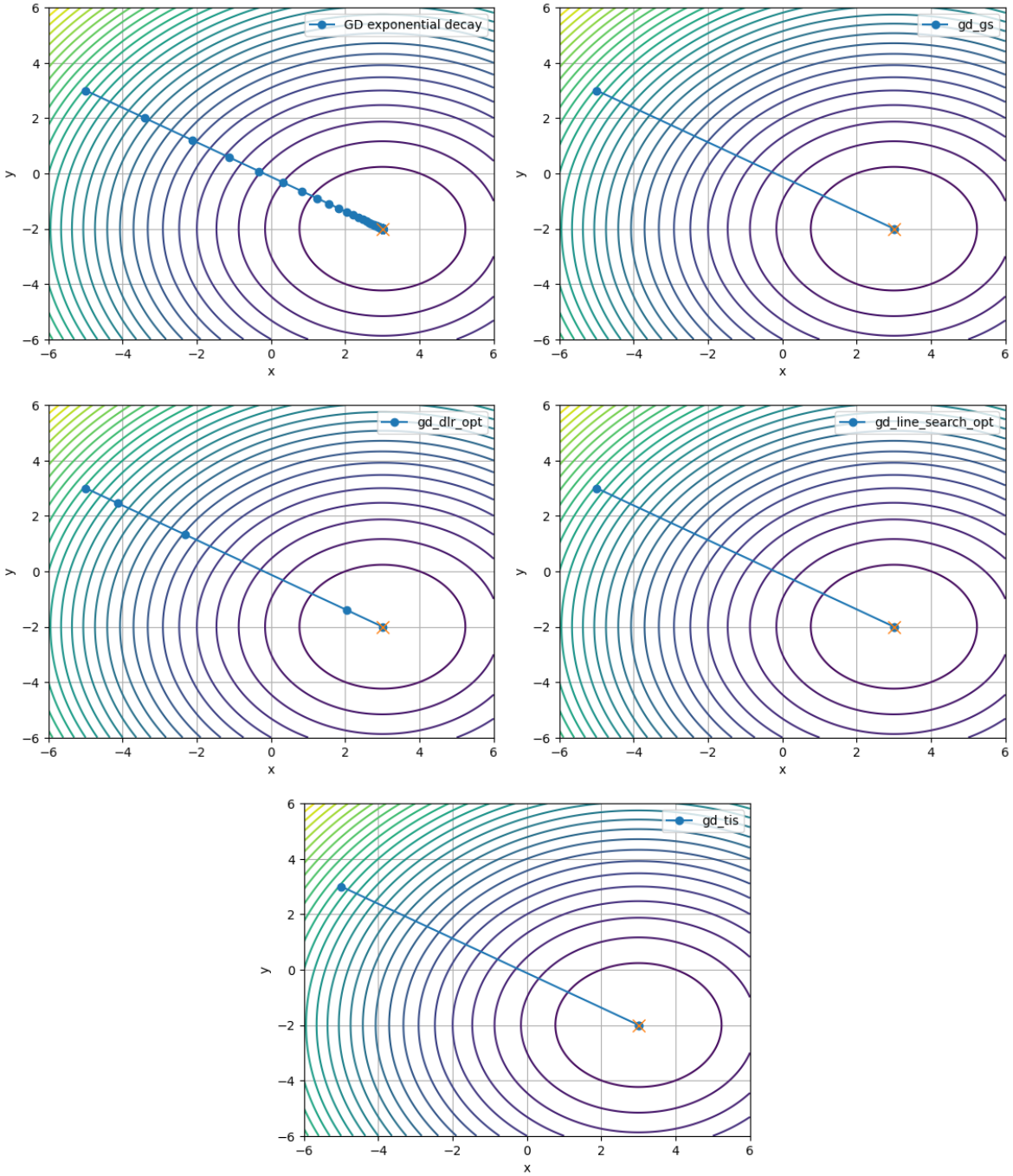
3. *Метод BFGS из SciPy Optimize:* в библиотеке SciPy Optimize нет возможности выбора стратегии выбора шага, как в PyTorch или TensorFlow. Как аналог была использована функция ***minimize*** с методом *BFGS, так как он динамически подбирает размер шага с помощью одномерного поиска.*

4. *Градиентный спуск, реализованный на методе золотого сечения из SciPy:* использован базовый алгоритм без оптимизаций, в котором как аналог была использована функция ***minimize_scalar*** с методом золотого сечения (*method='golden'*), с помощью которого находится оптимальный размер шага на каждой итерации.

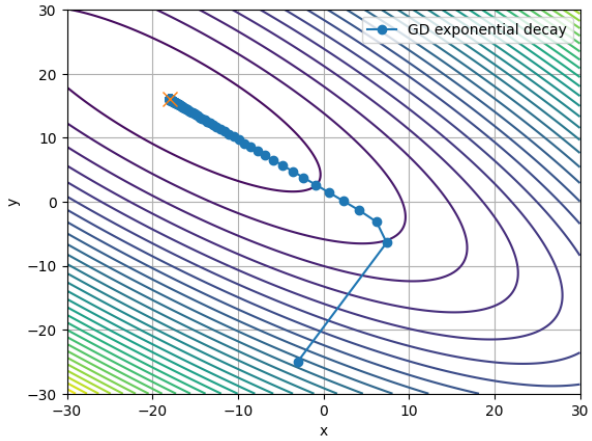
5. *Градиентный спуск, реализованный на методе интерполяции многочленом: использован* базовый алгоритм без оптимизаций, в котором с помощью метода интерполяции рядом Тейлора находится оптимальный размер шага на каждой итерации.

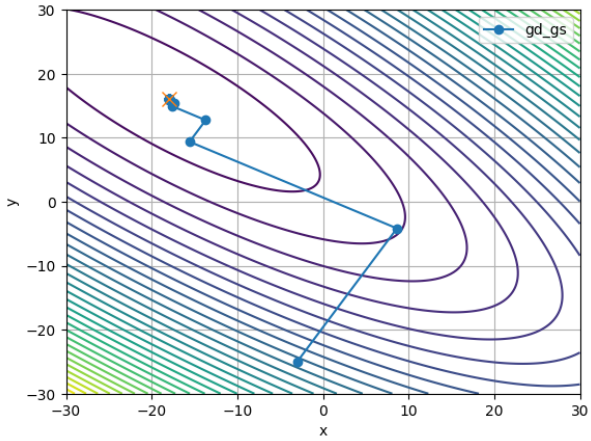
***Графики**:*

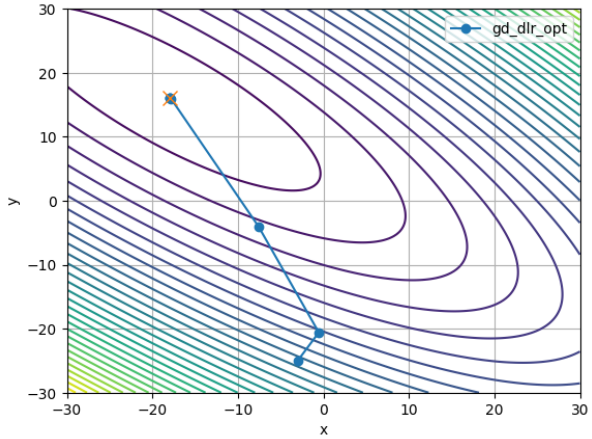
$$(x - 3)^2 + (y + 2)^2$$

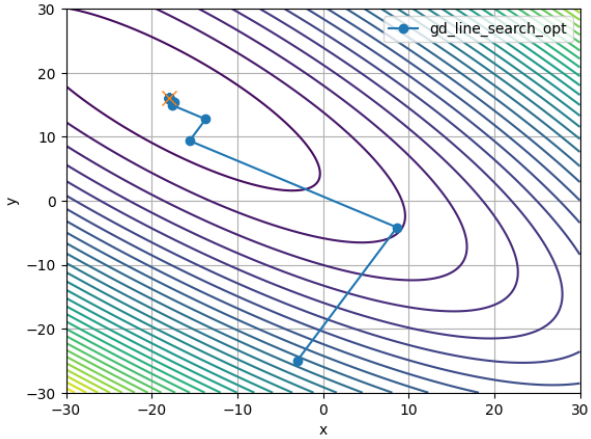


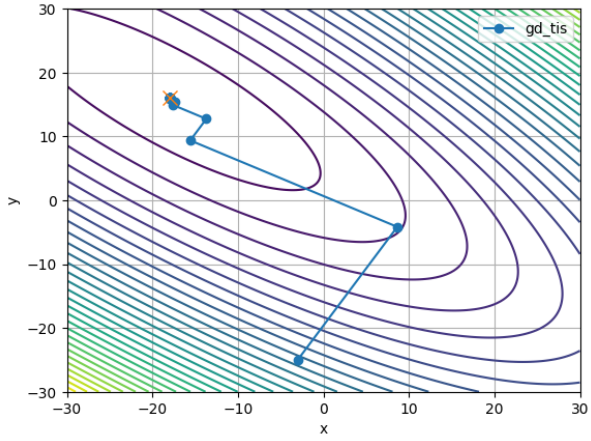
$$2(x+2)^2 + 4xy + 3(y-4)^2$$



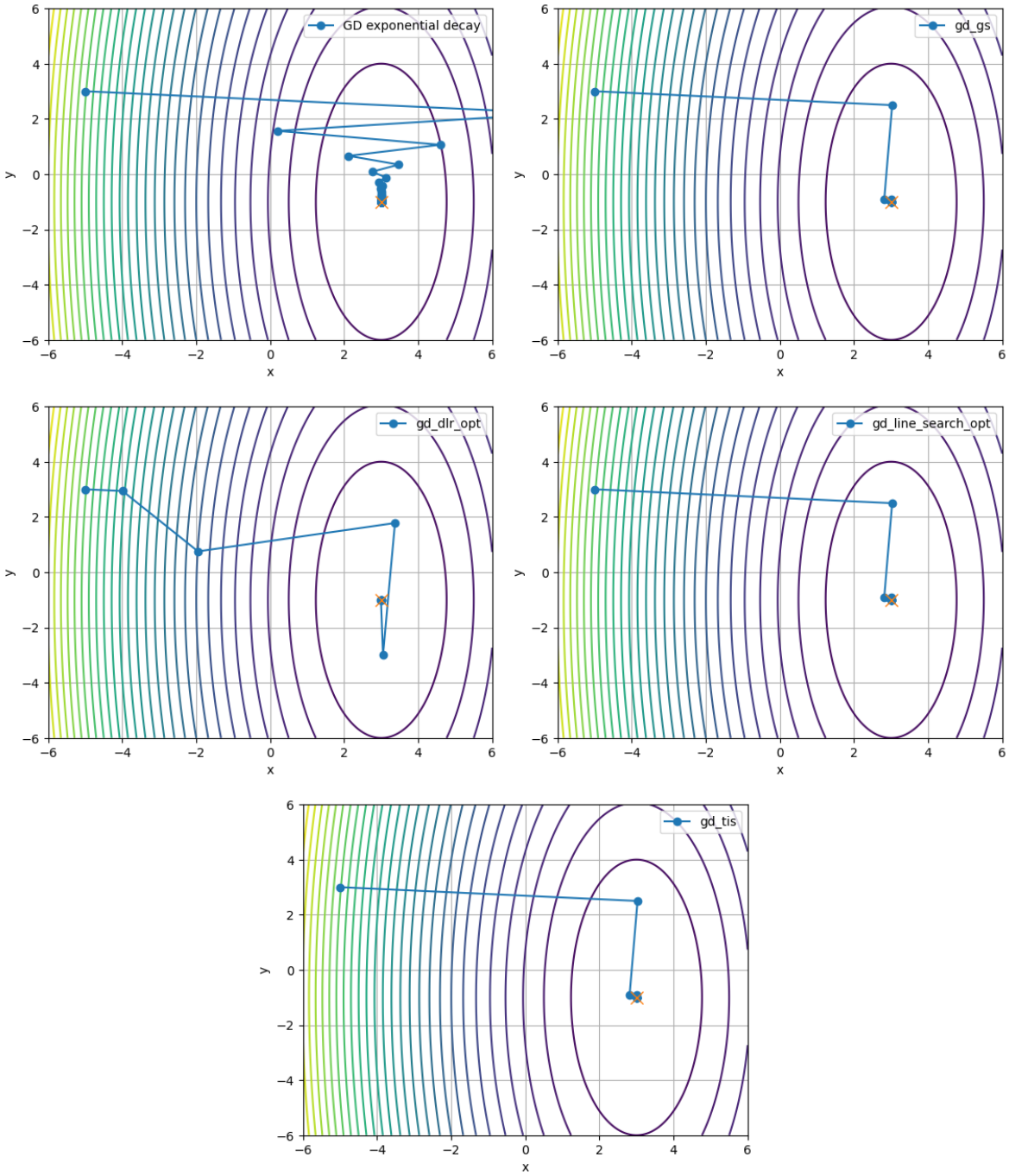




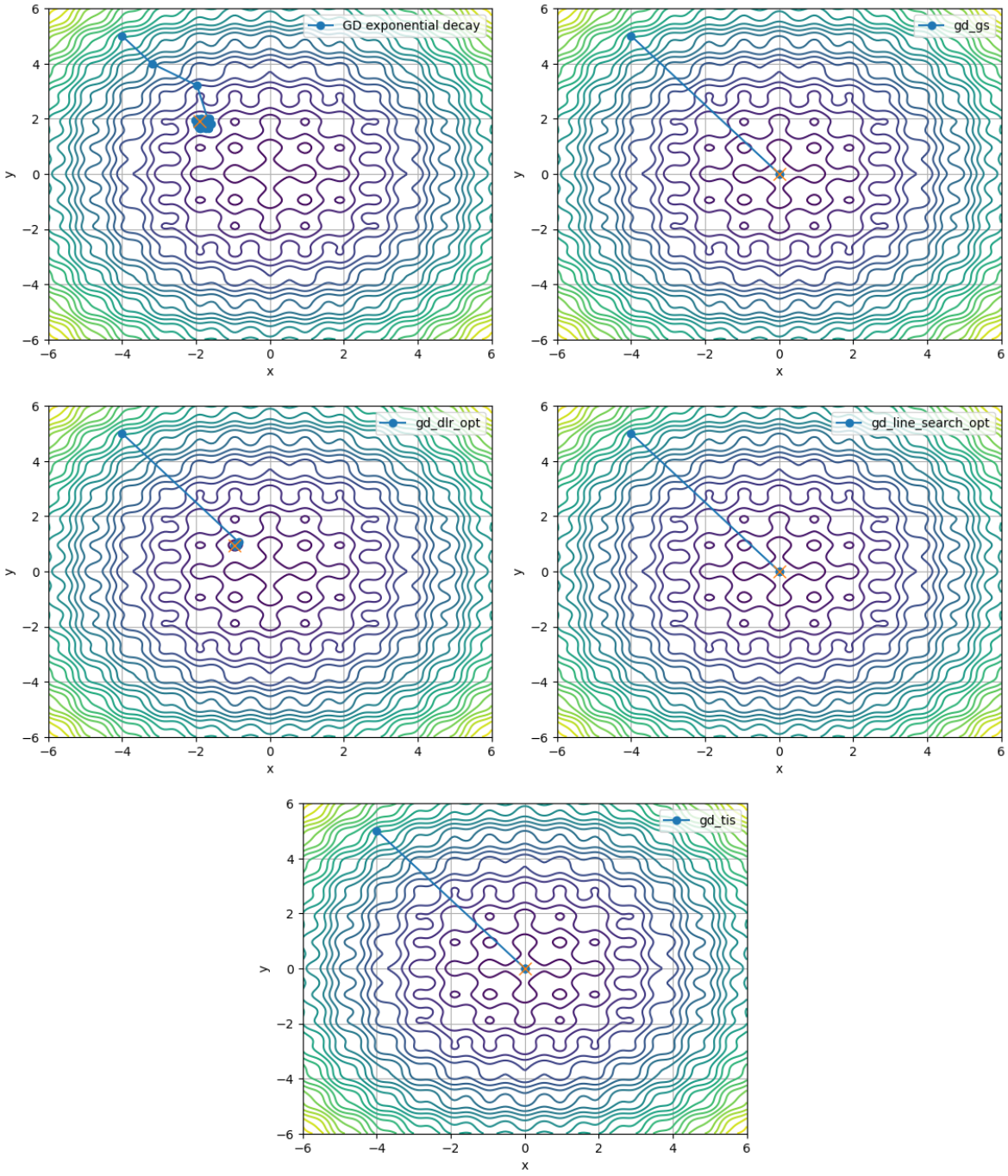




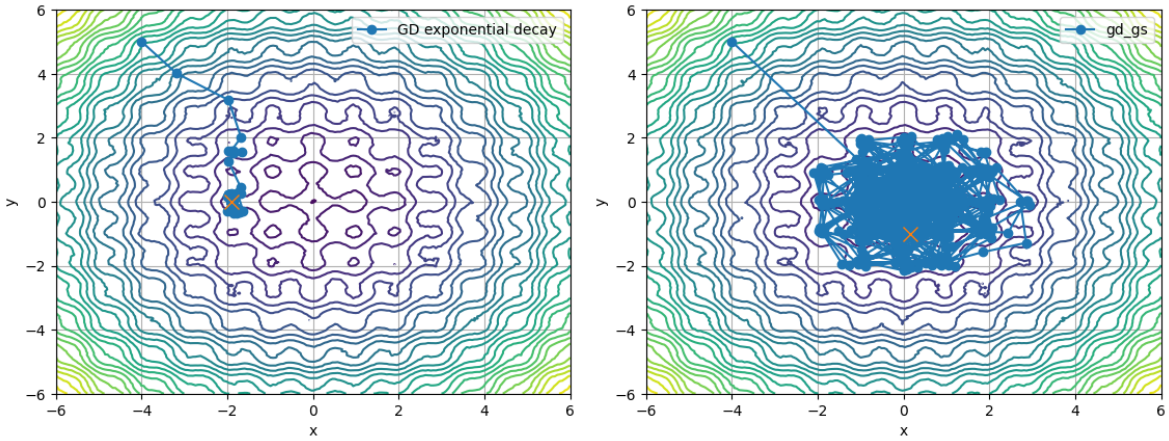
$$8(x-3)^2+(y+1)^2$$

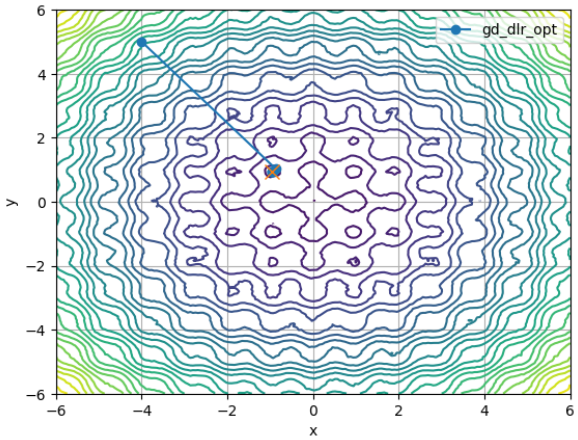

GD exponential decay
gd_gs
gd_dlr_opt
gd_line_search_opt
gd_tis
x
y

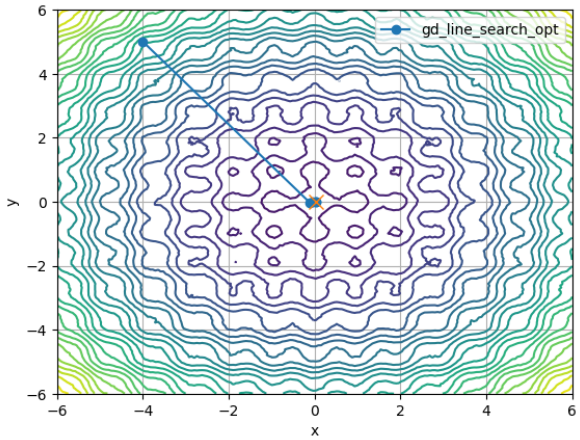
$$2A + x^2 - A\cos 2\pi x + y^2 - A\cos 2\pi y$$

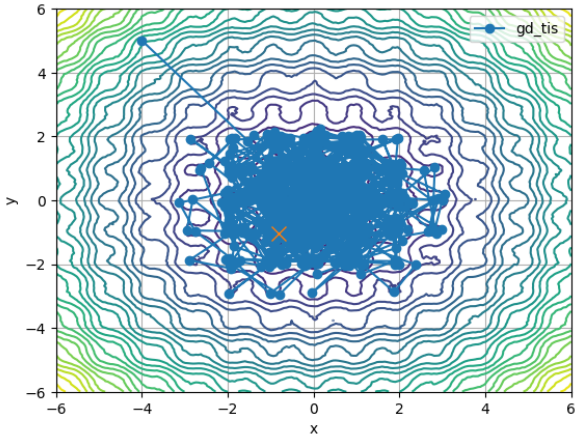


$$2A + x^2 - A\cos 2\pi x + y^2 - A\cos 2\pi y + \sigma$$









Результаты:

$$(\boldsymbol{x} - \mathbf{3})^{\mathbf{2}} + (\boldsymbol{y} + \mathbf{2})^{\mathbf{2}}$$

Рассмотрим симметричную параболу для демонстрации базовой сходимости градиентного спуска. Градиент должен быть направлен прямо к точке минимума. Все методы запускались из начальной точки *(-5, 3).*

Метод	*Кол-во итераций*	*Кол-во вычислений*	*Ошибка*
1.1) const decay	77	77	0.000000
1.2) step decay	1000	1000	0.127724
1.3) exp decay	153	153	0.000000
1.4) cos annealing	166	166	0.000000
2) golden	3	72	0.000000
3) bfgs scipy	4	10	0.000000
4) golden scipy	3	149	0.000000
5) taylor	3	138	0.000000

Все методы показали хорошую эффективность, кроме **1.2**, в котором размер шага слишком быстро уменьшался и алгоритм не успевал дойти до минимума, что и происходило во всех последующих исследованиях. Стоит отметить, что стратегии выбора шага нуждаются в калибровке гиперпараметров для хорошей эффективности, иначе они чаще проигрывают методам, где размер шага определяется одномерным поиском, что не всегда эффективно.

$$\mathbf{2}(\boldsymbol{x} + \mathbf{2})^{\mathbf{2}} + \mathbf{4}\boldsymbol{xy} + \mathbf{3}(\boldsymbol{y} - \mathbf{4})^{\mathbf{2}}$$

Рассмотрим повернутую эллиптическую функцию. Оси симметрии не совпадают с осями координат. Все методы запускались из начальной точки *(-3, -25).*

Метод	*Кол-во итераций*	*Кол-во вычислений*	*Ошибка*
1.1) const decay	190	190	0.000001
1.2) step decay	1000	1000	6.077620
1.3) exp decay	1000	1000	0.004507
1.4) cos annealing	370	370	0.000001
2) golden	20	701	0.000001
3) bfgs scipy	6	16	0.000000
4) golden scipy	22	1601	0.000000
5) taylor	21	1516	0.000001

В результатах исследования этой функции интересно обратить внимание на результаты **2** и **4**. Наша реализация градиентного спуска на основе поиска методом золотого сечения, сейчас и далее, выполняет в 2 раза меньше вычислений функции. Вероятно, реализация из SciPy честно выполняет перерасчет для повышения точности, вместо повторного использования заранее вычисленных значений.

Также кажется важным крайне эффективный результат алгоритма **3**. Это происходит из-за того, что BFGS основывается на идее апроксимации гессиана, который является константным для квадратичных функций, что позволяет эффективно предсказывать поведение градиента.

$$\mathbf{8}(\boldsymbol{x} - \mathbf{3})^{\mathbf{2}} + (\boldsymbol{y} + \mathbf{1})^{\mathbf{2}}$$

Рассмотрим эллиптическую функцию с различной масштабностью. Функция плохо обусловлена, что может вызвать зигзагообразные скачки в пути градиентного спуска. Все методы запускались из начальной точки *(-5, 3).*

Метод	*Кол-во итераций*	*Кол-во вычислений*	*Ошибка*
1.1) const decay	73	73	0.000000
1.2) step decay	1000	1000	0.054155
1.3) exp decay	136	136	0.000000
1.4) cos annealing	161	161	0.000000
2) golden	10	351	0.000000

3) bfgs scipy	8	18	0.000000
4) golden scipy	11	791	0.000000
5) taylor	11	742	0.000000

Для данной функции можно явно заметить на графиках зигзагообразное поведение пути градиентного спуска, что обуславливается слишком большим начальным размером шага.

$$\mathbf{2A + x^2 - A\cos 2\pi x + y^2 - A\cos 2\pi y}$$

В качестве мультимодальной функции была выбрана функция Растригина, используемая для тестирования алгоритмов оптимизации. Данная функция обладает параметром мультимодальности **A**, который был задан 1 в нашем исследовании. Все методы запускались из начальной точки (-4, 5)

Метод	*Кол-во итераций*	*Кол-во вычислений*	*Ошибка*
1.1) const decay	1000	1000	0.410774
1.2) step decay	25	25	1.344989
1.3) exp decay	88	88	2.682523
1.4) cos annealing	75	75	0.000000
2) golden	3	72	0.000000
3) bfgs scipy	7	26	1.344989
4) golden scipy	3	163	0.000000
5) taylor	3	208	0.000000

Хорошая точность некоторых методов является результатом удачного выбора начальной точки, которая позволяет проскакивать локальные минимумы в начале пути.

$$\mathbf{2A + x^2 - A\cos 2\pi x + y^2 - A\cos 2\pi y + \sigma}$$

Мультимодальная функция Растригина с параметром зашумленности $\boldsymbol{\sigma}$ позволяет меньше завесить от удачного выбора начальной точки благодаря внесенному шуму.

Метод	*Кол-во итераций*	*Кол-во вычислений*	*Ошибка*
1.1) const decay	1000	1000	0.288458
1.2) step decay	1000	1000	1.344989
1.3) exp decay	1000	1000	1.896952
1.4) cos annealing	1000	1000	0.224912
2) golden	1000	35 001	1.033094
3) bfgs scipy	5	42	1.351300
4) golden scipy	5	389	0.041216
5) taylor	1000	93 636	1.323324

Примечательным является результат метода **1.4**, который продолжает давать наилучшую эффективность при увеличении мультимодальности и зашумленности, а также удалении начальной точки от точки глобального минимума. Это происходит из-за изменения размера шага по косинусной кривой, что позволяет периодически “разогреваться” алгоритму и выходить из локальных минимумов.