Лабораторная работа №1	*2024*
Методы Ньютона	**Артемьев Иван Вадимович**
	Никитин Михаил Алексеевич
	Павлов Евгений Андреевич

Цель работы: Реализация метода Ньютона и его модификаций для поиска минимумов функций на языке программирования Python и исследование полученных результатов

Инструментарий: Python 3.12 - библиотеки: NumPy, SciPy, MatPlotLib

Постановка задачи:

Реализуйте и исследуйте на эффективность следующие методы:

1. Метод Ньютона с постоянным шагом (learning rate);
2. Метод Ньютона с одномерным поиском
3. Метод Newton-CG из Python библиотеки scipy.optimize.
4. Квазиньютоновский метод BFGS из Python библиотеки scipy.optimize
5. Квазиньютоновский метод BFGS реализованный самостоятельно

Содержание исследования:

Для исследования выберите функцию типа Розенброка, а также одну-две не полиномиальные функции (функции можно взять из лаб.1). На выбранных функциях сравните методы:

1. Сравните свою реализацию метода Ньютона с методом Newton-CG из библиотеки scipy.optimize (по точности и скорости).

2. Сравните эффективность методов нулевого порядка и градиентного спуска из лаб 1., метода Ньютона, квазиньютоновских методов.

3. Сравните эффективность методов нулевого порядка с квазиньютоновскими методами, если в последних производная вычисляется разностным методом (в scipy.optimize есть параметр, задающий метод вычисления производной – через аналитические выражения или разностные схемы)

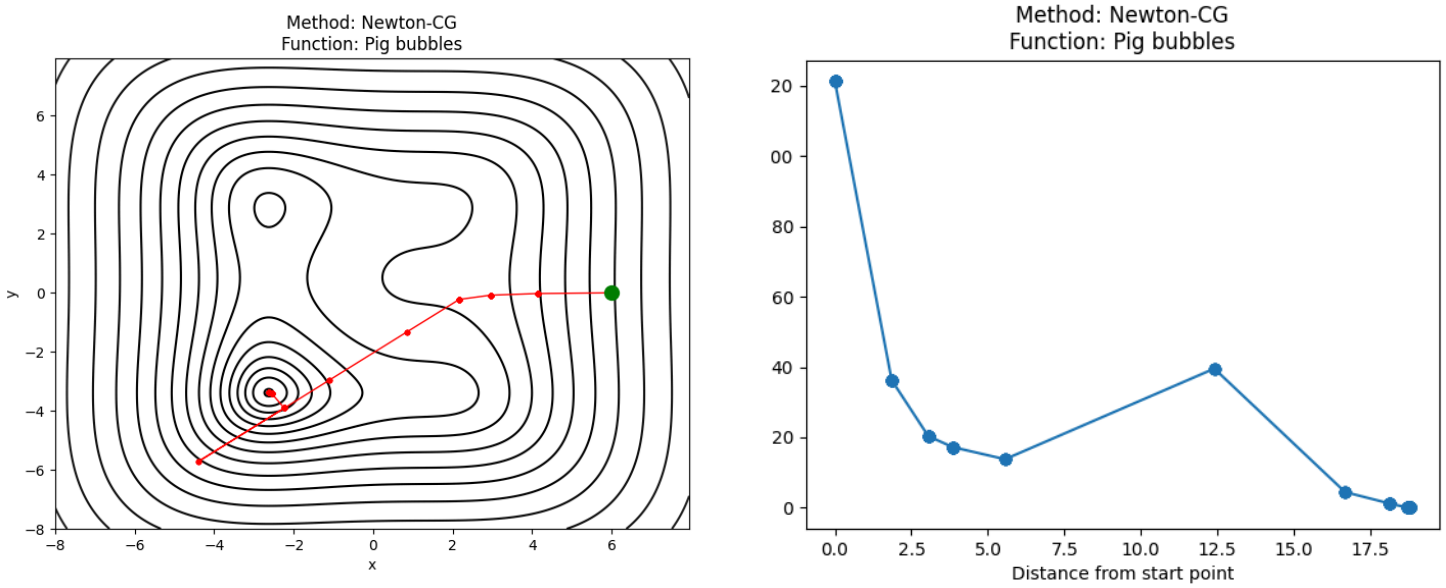
4. Иллюстрируйте примеры, как в лаб.1, чтобы не было скучно.

Описание используемых методов и их реализация:

$f(x,\ y)$: $\mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$

Задача оптимизации: $f(x,\ y) \to min$

1. *Метод Ньютона с постоянным шагом:*



Визуализация работы метода ньютона

Сперва сформулируем задачу по-другому. Точка минимума - это точка в которой градиент равен нулю. Значит для нахождения заветного минимума, необходимо решить уравнение $\nabla f(x) = 0$.

Для решения данного уравнения достаточно построить следующую последовательность точек вплоть до необходимого приближения.

$$x^{[j+1]} = x^{[j]} - \alpha \cdot H^{-1}(x^{[j]}) \cdot \nabla f(x^{[j]})$$

В данном случае $H^{-1}(x^{[j]}) \cdot \nabla f(x^{[j]})$ - указывает направление наискорейшего спуска, а коэффициент α, который также, как и в градиентном спуске, называется *learning rate.* В данном методе этот коэффициент остается постоянным и выбирается перед запуском - как гиперпараметр.

Условием остановки является $|\nabla f(x^{[j]})| < \varepsilon$.

2. *Метод Ньютона с изменяемым шагом(использование метода Дихотомии):*

Данный метод является модификацией описанного выше метод, которая заключается в исправлении проблемы с тем, что алгоритм может не сойтись при некоторых значениях α - *learning rate.* На каждом шаге алгоритма выбирается новое значение α с помощью метода дихотомии для функции $g(step) = f(x^{[j]} - step \cdot H^{-1}(x^{[j]}) \cdot \nabla f(x^{[j]}))$ (обратим внимание, что в данном случае $x^{[j]}$, $H^{-1}(x^{[j]})$ и $\nabla f(x^{[j]})$ - фиксированные числа, то есть g - функция одной переменной и к ней действительно применим данный метод):

A. Задаётся начальный интервал *(0, learning_rate)*;
B. Убедиться, что на концах функция g имеет разный знак;
C. Повторять

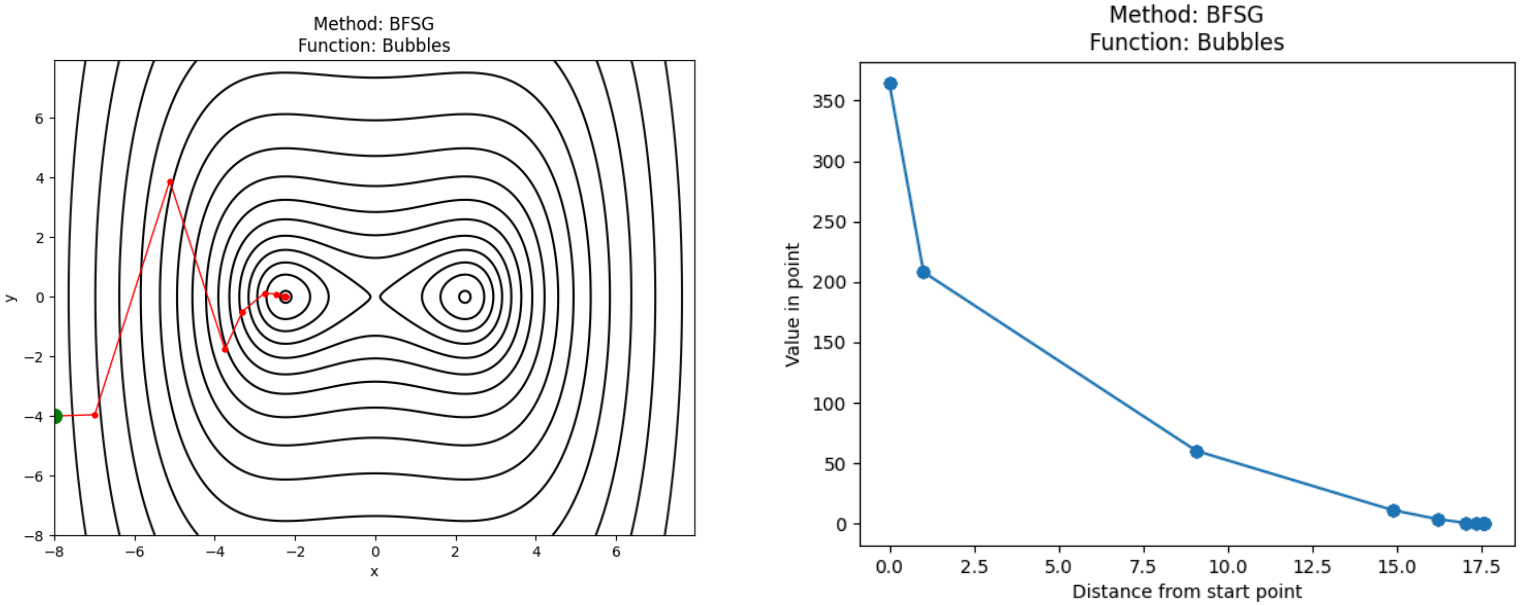
a. выбрать внутри интервала точку *mid*;
b. сравнить знак функции в точке mid со знаком функции в одном из концов;
    i. если совпадает, то переместить этот конец интервала в точку *mid*,
    ii. иначе переместить в точку mid другой конец интервала;

пока не будет достигнута нужная точность.

Благодаря данной модификации - метод градиентного спуска больше не будет расходиться, так как значение α будет уменьшаться.

Реализация метода дихотомии представлена в файле *d1_methods.py*

3. *Методы из библиотеки* scipy
    a) Метод Ньютона (Newton-CG) запускаем с параметрами jac (функция, вычисляющая якобиан), hess (функция, вычисляющая гессиан)
    b) Квазиньютоновский метод (BFGS) запускаем без параметра jac, для вычисления производной разностным методом



Визуализация работы метода BFSG

*4. Самостоятельная реализация метода (*BFGS) *доп. задание 1*:

Задаем начальную точку x_0 и точность(epsilon).

Определяем начальное приближение $H_0 = B_0^{-1}$, где B_0- обратный гессиан функции.

Находим точку, в направлении которой будем производить поиск, она определяется следующим образом: $p_k = - H_k \cdot (grad) f_k$

Находим коэффициент k используя линейный поиск (line search из библиотеки scipy), где k удовлетворяет условиям Вольфе:

$$f(x_k + k \cdot p_k) \leq f(x_k) + c_1 \cdot k \cdot \nabla f_k^T \cdot p_k$$

$$f(x_k + k \cdot p_k)^T \cdot p_k \geq c_2 \cdot \nabla f_k^T \cdot p_k$$

Вычисляем $x_{k+1} = x_k + k \cdot p_k$

Фактически мы находим такое k при котором значение функции $f(x_k + k \cdot p_k)$ минимально

Определяем вектора:

$$s_k = x_{k+1} - x_k$$

$$y_k = \nabla f_{k+1} - \nabla f_k$$

Обновляем гессиан функции, согласно следующей формуле:

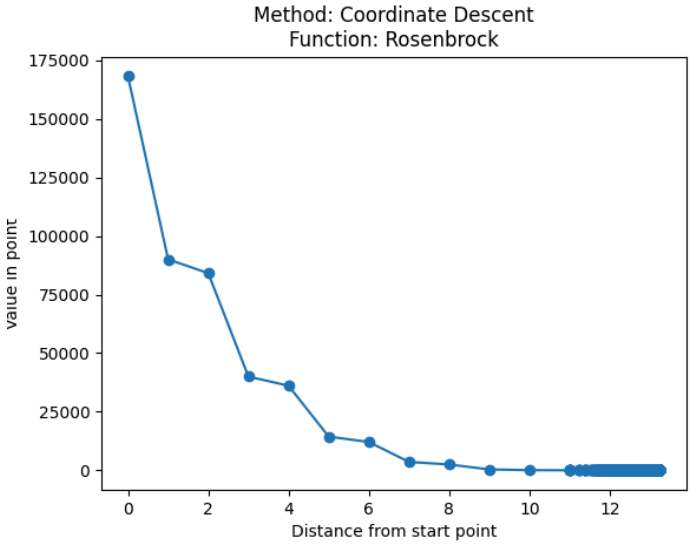
$$H_{k+1} = (I \cdot k \cdot s_k \cdot y_k^T) \cdot H_k \cdot (I - k \cdot y_k \cdot s_k^T) + s_k \cdot s_k^T$$

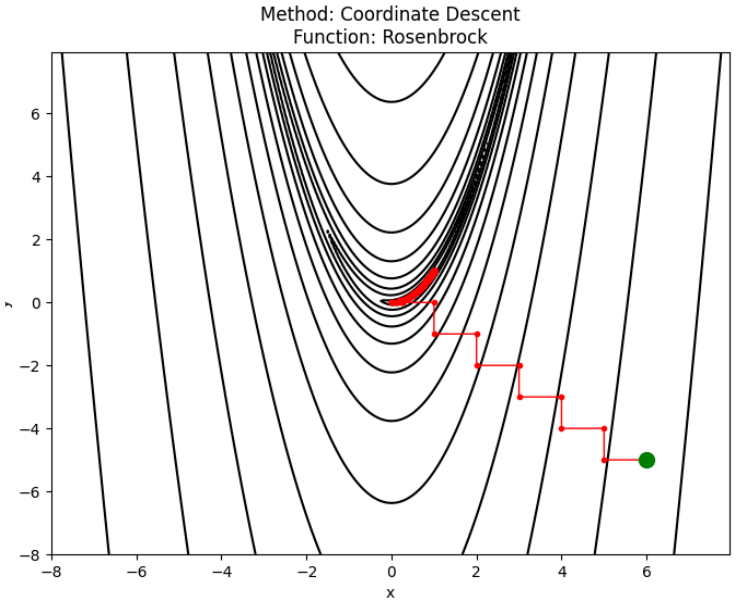
Где $k = \frac{1}{y_k^T \cdot s_k}$

Алгоритм продолжает выполняться до тех пор пока истинно неравенство: $|\nabla f_k| > epsilon$

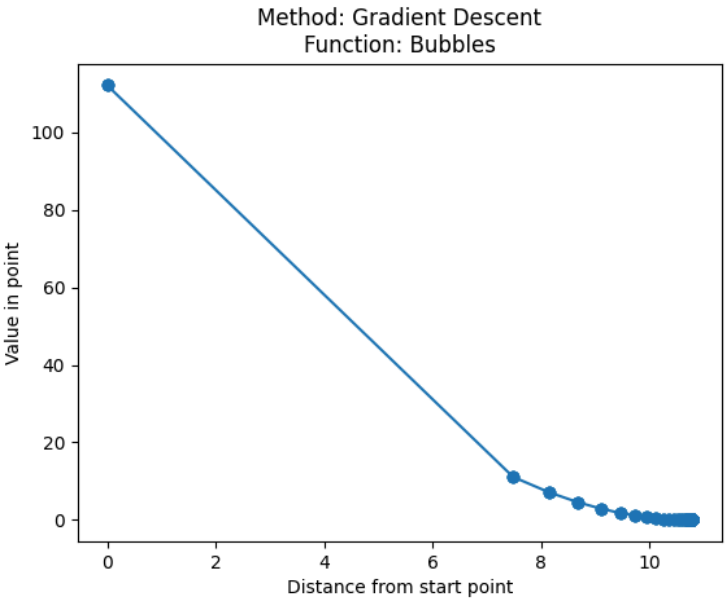
На следующих методах подробно останавливаться не будем, они были разобраны в прошлой лабораторной. Ниже представлены визуализации.

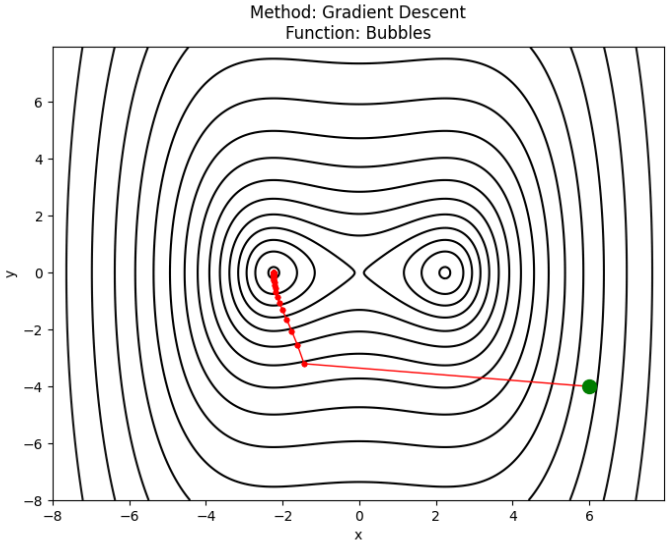
1. Координатный спуск



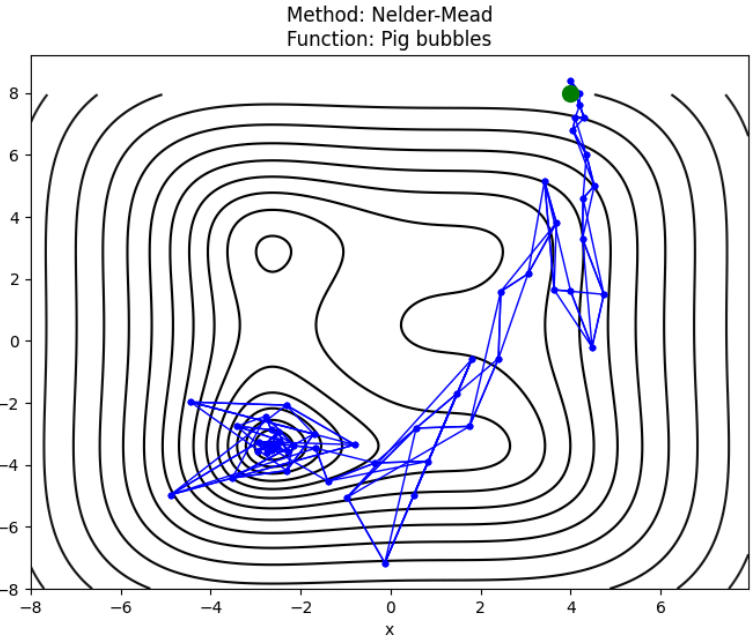


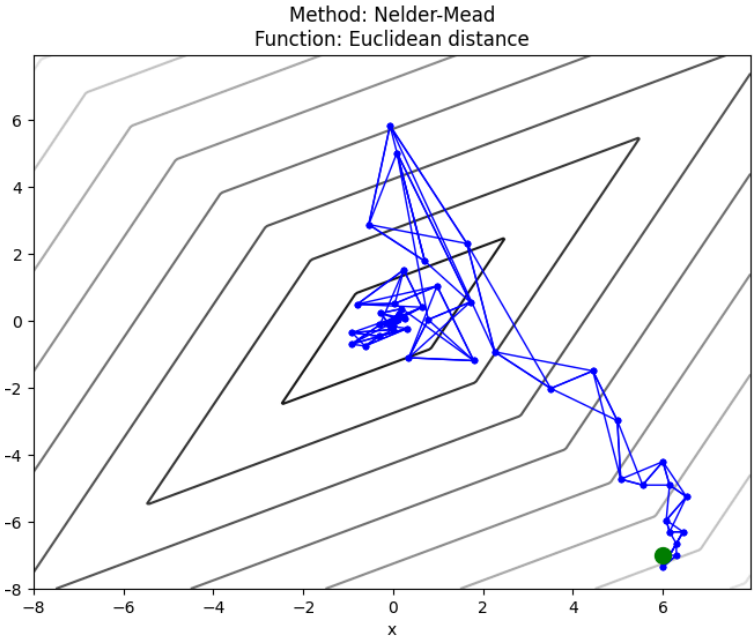
2. Градиентный спуск





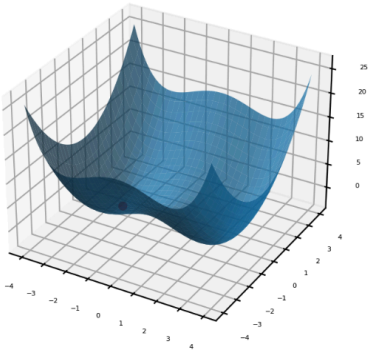
3. Метод Нелдера-Мида (очень красиво)





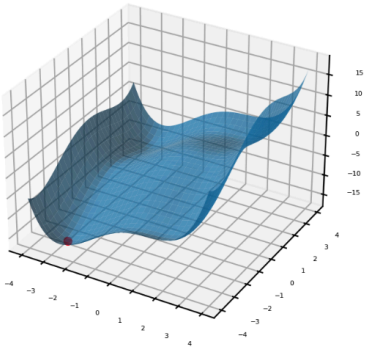
<u>См. след. стр.</u>

Результаты исследования:



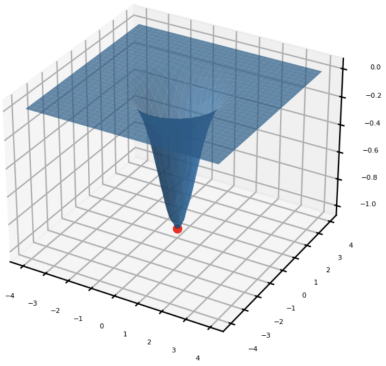
Мы провели исследование всех методов на 6 функциях:

1. $f_1(x, y) = y^2 - x^2 + \frac{x^4}{10}$



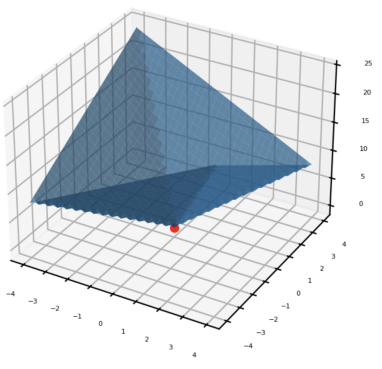
Данная функция весьма проста - в ней всего два локальных минимума.

2. $f_2(x, y) = -y^2 - x^2 + \frac{x^4}{10} + \frac{y^4}{20} + y + 2x$



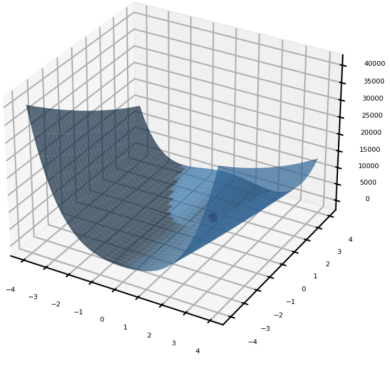
В данной функции - целых четыре локальных минимума, причем три из них - это достаточно маленькие “впадины”, а четвертая - самая глубокая - глобальный максимум.

3. $f_3(x, y) = -e^{-x^2-y^2}$



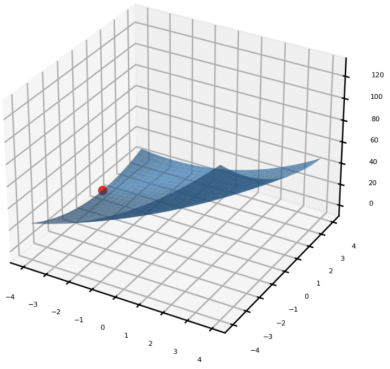
В данной функции всего один локальный - он же глобальный минимум. Однако интерес этой функции заключается в том, что на большинстве значений (x, y) - те, что находятся за окружностью с центром в (0, 0) и радиусом 10 - функция имеет очень маленький(по длине) градиент.

4. $f_4(x, y) = |x + y| + 3|y - x|$



У данной функции - всего один минимум, но ее особенность заключается в том, что она не гладкая.

5. $f_5(x, y) = (1 - x)^2 + 100(y - x^2)^2$



Функция Розенброка

6. $f_6(x, y) = x^2 - xy + y^2 + 9x - 6y + 20$

Простая полиномиальная функция

Сравнение нашей реализации метода Ньютона с библиотечной Newton-CG:

Если сравнивать результаты, которые показывают данные методы. То можно отметить следующие факты:

- Наша реализация работает по времени примерно столько же, как и библиотечная на функциях, на которых они хорошо работают.
- Наша реализация показывает меньшую точность на сложных функциях, где важна стартовая точка.
- Среднее число вызовов функции в нашей реализации в 4 раза больше, чем в библиотечной.
- Что интересно, наша реализация на функции Розенброка, показывает лучший результат, чем библиотечная.

Из представленных фактов, можно сделать вывод, что библиотечная реализация задумывается о выборе стартовой точки - в то время, как наша стартует с заданной. При этом время работы обоих методов примерно одинаковое - что хорошо. Но в нашей реализации необходимо большее количество раз считать саму функцию. Скорее всего в библиотечной реализации есть оптимизация на расчет Гессиана, чего у нас нет.

При этом сравнивая наши реализации метода Ньютона (без и с одномерной оптимизацией), можно отметить что по работоспособности они в целом показывают одинаковые результаты. Однако в варианте с оптимизацией необходимо большее количество вызовов функции, но меньшее количество

итераций. За счет чего данный метод выигрывает на сложных функциях, которые быстро считаются.

В целом мы приблизились к библиотечной реализации, и даже местами обогнали её.

Сравнение эффективности методов нулевого порядка, градиентного спуска с методом Ньютона, квазиньютоновским методом BFGS:

Исходя из полученных результатов, выделим основные факты:

Ньютон *vs* градиентный спуск:

- Количество успехов на всех функциях больше
- Время работы в среднем в 3 раза меньше
- На хорошо работающих функциях среднее число вызовов меньше
- Большее количество попаданий в локальные минимумы, а не глобальные

Как итог сходимость двух методов примерно одинаковая, при этом Ньютон выигрывает по производительности.

Ньютон *vs Нелдер-Мид*:

- Количество успехов на работающих функциях - не меньше
- Меньшее количество функций, на которых метод работает
- Время работы на работающих функциях в 6 раз меньше
- Большее количество попаданий в локальные минимумы

На хороших функциях(где адекватная вторая производная) Ньютон показывает лучший результат по производительности, но при этом Нелдер-Мид работает почти на всех функциях.

BFGS *vs градиентный спуск*:

- По всем параметрам, кроме времени работы, BFGS выигрывает у градиентного спуска

BFGS - показался нам лучше чем градиентный спуск, так как выигрывает по основным параметрам.

BFGS *vs Нелдер-Мид*:

- Количество вызовов функции меньше
- Время работы меньше у Нелдера-Мида
- На большинстве функций оба метода хорошо показывают результат
- На функциях, где важна точка старта или плохая производная результат работы хуже

На хороших функциях(где адекватная вторая производная) BFGS показывает лучший результат по вызовам функции, но при этом Нелдер-Мид работает почти на всех функциях.

Подытожив все факты и выводы из них, можно сказать, что новые методы имеет более высокую производительность, но они более привередливы к функциям, которые подаются им. Поэтому если функция имеет хороший Гессиан(ненулевой), то можно смело выбирать новые методы, но если нет, то лучше обратиться к классике.

Доп. задание 2:

1.

Функция: $f_2(x, y) = -y^2 - x^2 + \frac{x^4}{10} + \frac{y^4}{20} + y + 2x$

Начальная точка: (5, 0)

В данной точке при запуска метода Ньютона с дихотомией происходит ошибка из-за того, что определитель Гессиана равен нулю. Однако градиентный спуск справляется с данной задачей.

При этом для большинства других точек оба метода хорошо работают(видно по статистике в табличке ниже)

2.

Функция: $f_2(x, y) = -y^2 - x^2 + \frac{x^4}{10} + \frac{y^4}{20} + y + 2x$

Два метода: градиентный спуск с дихотомией и метод Ньютона с дихотомией

Начальная точка: (2, -8)

Результат метода Ньютона: -2.6273651453286857 -3.387619107967227

Результат градиентного спуска: -2.627365132299499 2.874075287440471

В данном случае градиентный спуск в попал локальный минимум, а метод Ньютона в глобальный. Это обусловлено тем, что данные методы, хоть и двигаются в направлении убывания функции, но они имеют разную длину шага, из-за чего в некоторых стартовых точках могут перескочить через какую-то “выпуклость” и попасть в другую и остаться в ней.

См. след. стр.

Анализ сходимости:

	f_1	f_2	f_3	f_4	f_5	f_6
Градиентный спуск	**90%**	**88%**	**7%**	**0%**	**0%**	**100%**
Градиентный спуск с дихотомией	**89%**	**87%**	**7%**	**0%**	**0%**	**100%**
Нелдер-Мид	**100%**	**100%**	**100%**	**91%**	**100%**	**99.7%**
Покоординатный спуск	**100%**	**100%**	**100%**	**10%**	**100%**	**100%**
Метод Ньютона	**100%**	**80%**	**0%**	**0%**	**100%**	**100%**
Метод Ньютона с дихотомией	**100%**	**80%**	**0%**	**0%**	**100%**	**100%**
Newton-CG	**100%**	**100%**	**28%**	**2%**	**84%**	**100%**
scipy BFGS	**100%**	**100%**	**16%**	**22%**	**100%**	**100%**
JBFGS	**82%**	**57%**	**0%**	**0%**	**25%**	**88%**

Количества вызовов:

	f_1	f_2	f_3	f_4	f_5	f_6
Градиентный спуск	**263.55**	**150.7**	**314.3**	**-**	**-**	**563.568**
Градиентный спуск с дихотомией	**429.46**	**268.8**	**526.6**	**-**	**-**	**870.552**
Нелдер-Мид	**93.431**	**95.06**	**88.37**	**98.55**	**178.4**	**98.798**
Покоординатный спуск	**182.53**	**196.1**	**147.1**	**133.9**	**44626**	**235.699**
Метод Ньютона	**330.76**	**780.4**	**61.29**	**-**	**906.6**	**310.032**
Метод Ньютона с дихотомией	**427.48**	**1152**	**65.58**	**-**	**1001**	**408.052**
Newton-CG	**149.37**	**191.7**	**102.3**	**474.8**	**1924**	**102.694**
scipy BFGS	**30.048**	**50.78**	**8.364**	**257.1**	**249.4**	**17.7**
JBFGS	**121.80**	**174.6**	**21.62**	**-**	**723.3**	**50.585**

Время работы:

	f_1	f_2	f_3	f_4	f_5	f_6
Градиентный спуск	**0.33**	**0.25**	**0.06**	**-**	**-**	**0.67**
Градиентный спуск с дихотомией	**0.56**	**0.43**	**0.1**	**-**	**-**	**1.17**
Нелдер-Мид	**1.37**	**0.74**	**0.69**	**0.74**	**1.21**	**0.84**
Покоординатный спуск	**0.04**	**0.06**	**0.08**	**0.13**	**10.93**	**0.06**
Метод Ньютона	**0.28**	**0.91**	**0.07**	**-**	**0.67**	**0.27**
Метод Ньютона с дихотомией	**0.37**	**1.28**	**0.08**	**-**	**0.82**	**0.4**
Newton-CG	**0.38**	**0.5**	**0.39**	**1.12**	**4.76**	**0.28**
scipy BFGS	**1.03**	**1.7**	**0.25**	**8.22**	**9.51**	**0.61**
JBFGS	**0.21**	**0.42**	**0.02**	**-**	**1.52**	**0.08**

Ссылка на репозиторий с кодом:

https://github.com/Sedromun/lab2-MetOpt