Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования “Национальный исследовательский университет ИТМО“

Факультет информационных технологий и программирования

Направление “Прикладная математика и информатика“

Отчет к лабораторной работе №2

Методы многомерной оптимизации

Выполнили студенты группы M3237

Ярошевский Илья
Аникина Вероника
Крюков Александр

Санкт-Петербург 2021

1 Цели работы

1. Реализовать алгоритмы
   - Метод градиентного спуска
   - Метод наискорейшего спуска
   - Метод сопряженных градиентов
2. Проанализировать траектории методов для некоторых квадратичных функций
3. Исследовать количество итераций в зависимости от размерности пространства и числа обусловленности

2 Ход работы

Во всех тестах начальное приближение — вектор размерности пространства из единиц, точность $\varepsilon = 0.001$, ограничение на количество итераций — 10000
Исходный код: https://github.com/iliayar/MethOpt

2.1 Количество итераций

На графиках:

- Горизонталь — число обусловленности
- Вертикаль — количество итераций

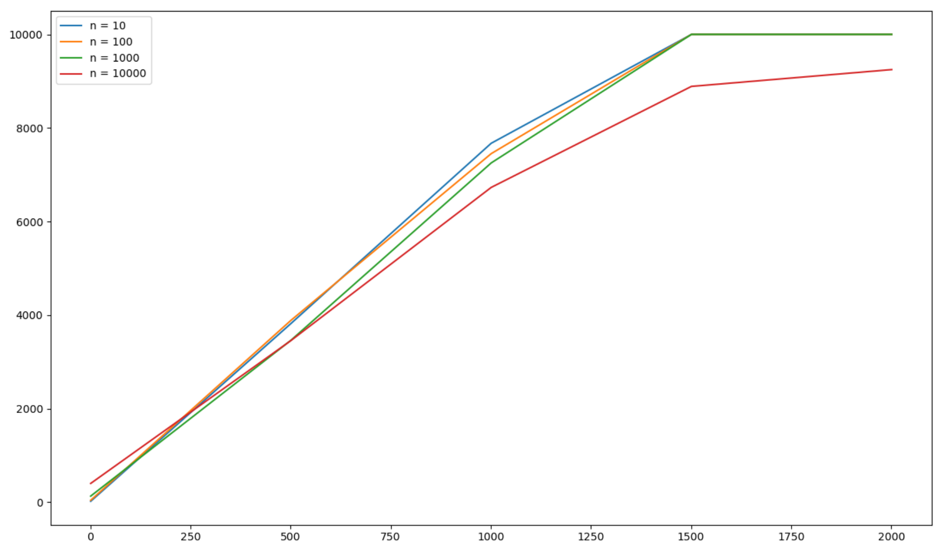
Для исследования количества итераций использовались случайно сгенерированные функции вида $f(x) = \frac{1}{2}Ax^2 + bx + c$ с параметрами:

- A — диагональная матрица с заданным числом обусловленности.
- b — вектор размерности пространства из единиц.
- $c = 0$

Для каждого числа обусловленности производились тесты на двух функциях. На графиках представлены средние значения количества итераций из этих двух тестов.

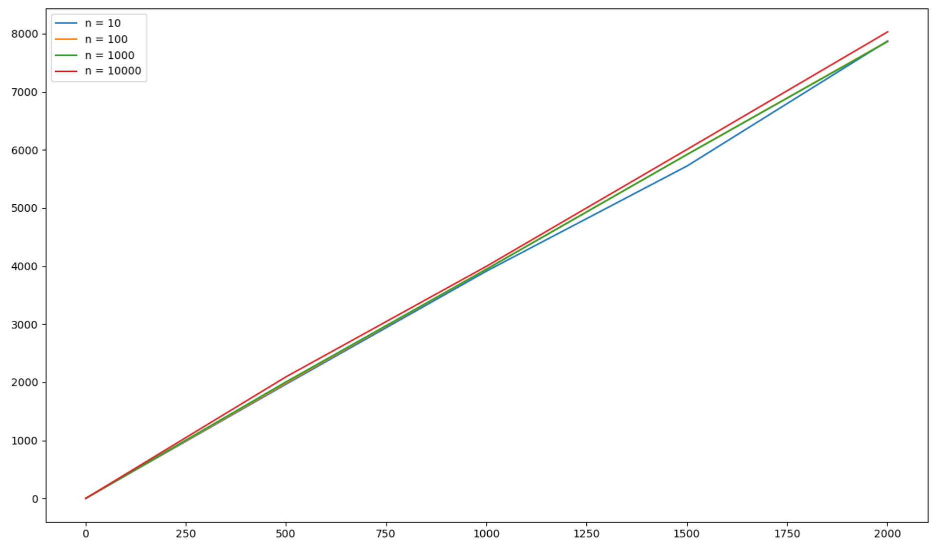
Генерация диагональных матриц с заданным число обусловленности k и минимальным значением l производилась путем вычисления необходимого максимального значения $L = \frac{k}{l}$, а все остальные элементы выбирались случайно в промежутке (l, L).

2.1.1 Метод градиентного спуска



Видно, что количество итераций не зависит от размерности пространства n, но линейно зависит от числа обусловленности k

2.1.2 Метод наискорейшего спуска



Так же как и в методе градиентного спуска можно видеть линейную зависимость количества итераций от числа обусловленности. Количество итераций так же не зависит от размерности пространства.

Исследование зависимости количества итераций методов одномерной оптимизации от числа обусловленности k матрицы A и размерности пространства n:

k	Дихотомии	Парабол	Золотого сечения	Брента	Метод Фибоначчи
1	62.0	12.0	46.0	28.0	50.0
101	62.0	12.0	46.0	45.59620962038987	50.0
201	62.0	12.0	46.0	48.28764921658471	50.0
301	62.0	12.0	46.0	49.76634216945256	50.0
401	62.0	12.0	46.0	50.20143294461716	50.0
501	62.0	12.0	46.0	51.98284088537922	50.0
601	62.0	12.0	46.0	52.832648532326026	50.0
701	62.0	12.0	46.0	52.90359065326178	50.0
801	62.0	12.0	46.0	53.742663849573695	50.0
901	62.0	12.0	46.0	54.71023523481371	50.0

Таблица 1: Зависимость количества итераций одномерной оптимизации от числа обусловленности

n	Дихотомии	Парабол	Золотого сечения	Брента	Метод Фибоначчи
1	18.6	3.6	13.8	8.4	15.0
101	18.6	3.6	13.8	11.194634715687346	15.0
201	18.6	3.6	13.8	11.109615384615385	15.0
301	18.6	3.6	13.8	11.166219512195124	15.0
401	18.6	3.6	13.8	11.10060975609756	15.0
501	18.6	3.6	13.8	11.143670150987225	15.0
601	18.6	3.6	13.8	11.078048780487805	15.0

Таблица 2: Зависимость количества итераций одномерной оптимизации от размерности пространства

Как видно, все методы, кроме метода Брента, не зависит ни от размерности пространства, ни от числа обусловленности. Метод Брента почти не зависит от размерности и линейно зависит от числа обусловленности

Исследование количества итераций метода наискорейшего спуска от выбора метода одномерной оптимизации, размерности пространства и числа обусловленности

k	Дихотомии	Парабол	Золотого сечения	Брента	Метод Фибоначчи
1	0.6	0.6	0.6	0.6	0.6
101	139.8	165.0	181.4	165.0	169.4
201	347.2	261.2	310.0	261.2	424.6
301	531.8	462.0	529.4	462.0	611.0
401	844.6	777.8	860.0	777.8	767.6
501	1018.0	918.4	938.8	918.4	1009.4
601	1208.4	1011.4	1093.2	1011.4	1290.4
701	1495.2	1017.2	1412.2	1017.2	1188.8
801	986.2	1429.4	1452.4	1429.4	932.6
901	1907.2	1687.4	1876.6	1687.4	1282.8

Таблица 3: Зависимость количества итераций многомерной оптимизации от числа обусловленности для каждого метода одномерной оптимизации

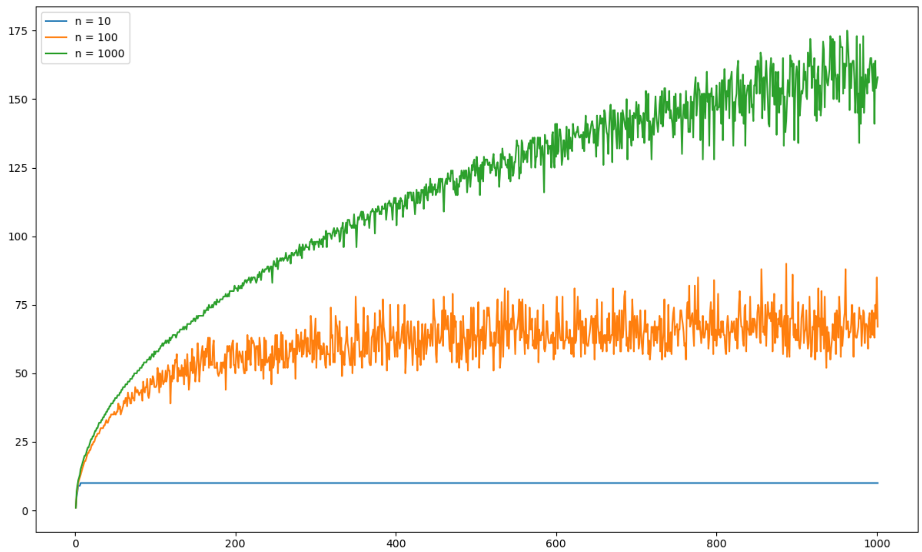
k	Дихотомии	Парабол	Золотого сечения	Брента	Метод Фибоначчи
1	1.2	0.6	1.2	0.6	1.2
101	23.2	23.2	23.2	23.2	23.2
201	23.4	23.4	23.4	23.4	23.4
301	24.2	24.0	24.2	24.0	24.0
401	24.4	24.4	24.4	24.4	24.4

Таблица 4: Зависимость количества итераций многомерной оптимизации от размерности пространства для каждого метода одномерной оптимизации

Как видно количество итераций в зависимости от размерности пространства для каждого метода одномерной оптимизации одинаково. Зависимость же от числа обусловленности для каждого метода имеет довольно сильный разброс, но в целом нельзя сказать что выбор какого-то метода одномерной оптимизации ведет к меньшему числу многомерных итераций

Можно сказать что метод парабол оказывается лучше других почти по всем параметрам

2.1.3 Метод сопряженный градиентов



Видно что количество итераций нелинейно зависит от числа обусловленности и увеличивается с ростом размерности пространства. Так же можно отметить, что количество итераций всегда будет не больше размерности пространства. Зависимость числа итераций от числа обусловленности при фиксированной размерности пространства можно описать как $O(\sqrt{k})$.

2.2 Траектории

$$f_1(x) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}100 & -1 \\ -1 & 1\end{pmatrix} x^2 + \begin{pmatrix}-10 & 0\end{pmatrix} x$$

Все методы находят минимум функции $f_1^* = -0.50505$ в точке $x^* = (0.101011\ 0.1011)$

$$f_2(x) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}3 & -1 \\ -1 & 2\end{pmatrix} x^2 + \begin{pmatrix}-5 & 2\end{pmatrix} x$$

Все методы находят минимум функции $f_2^* = -4.2$ в точке $x^* = (1.6\ -0.2)$

$$f_3(x) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & -1 \\ -1 & 2\end{pmatrix} x^2 + \begin{pmatrix}-10 & 2\end{pmatrix} x$$

Все методы находят минимум функции $f_3^* = -82$ в точке $x^* = (18\ 8)$

2.2.1 Метод градиентного спуска

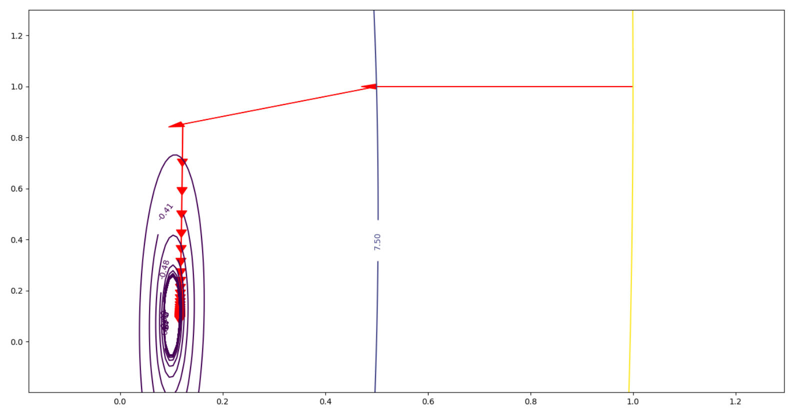


Рис. 1: Траектория метода на функции f_1

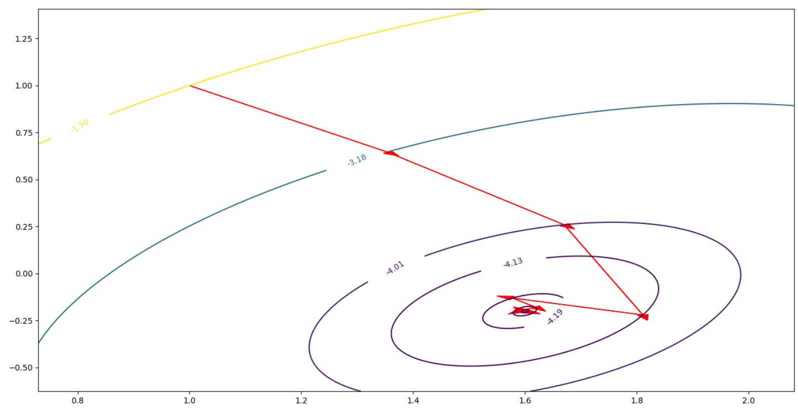


Рис. 2: Траектория метода на функции f_2

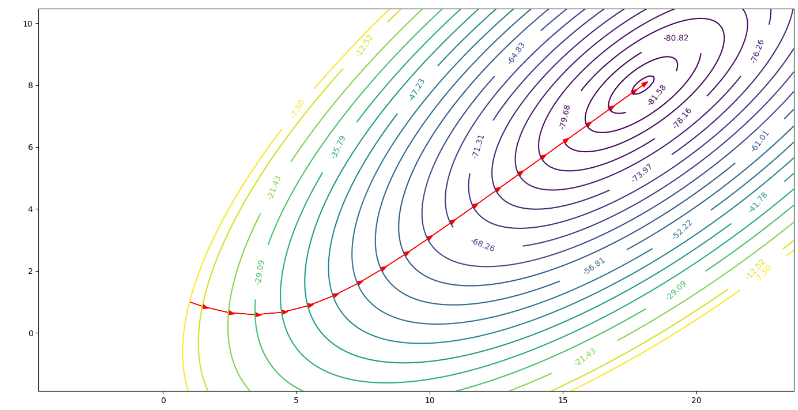


Рис. 3: Траектория метода на функции f_3

При запуске на f_1 методу потребовалось гораздо больше шагов (≈ 800) для нахождения минимума в отличии от функций f_2 (≈ 10 шагов) и f_1 (≈ 40 шагов), так как число обусловленности матрицы A функции f_1 достаточно велико $\mu = 100$.

2.2.2 Метод наискорейшего спуска

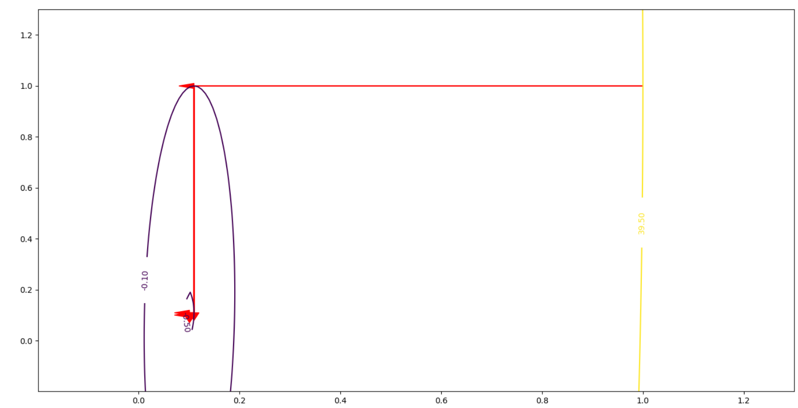


Рис. 4: Траектория метода на функции f_1

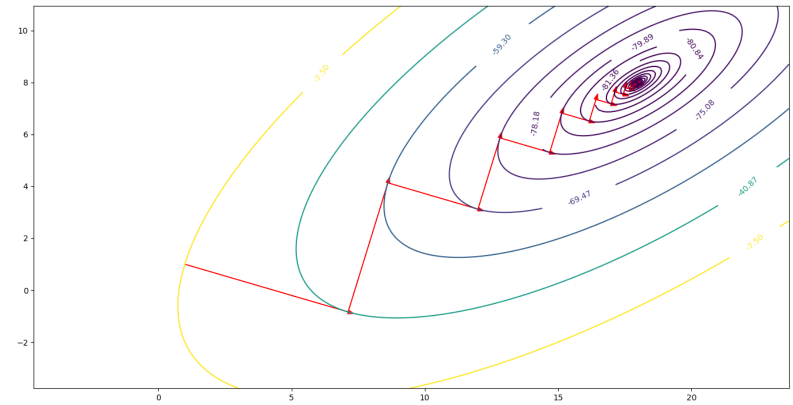


Рис. 5: Траектория метода на функции f_3

Не смотря на высокое число обусловленности функции f_1, метод потребовалось 5 шагов для нахождения минимума. Но в то же время на функции f_3 потребовалось всего 2 шага.

2.2.3 Метод сопряженных градиентов

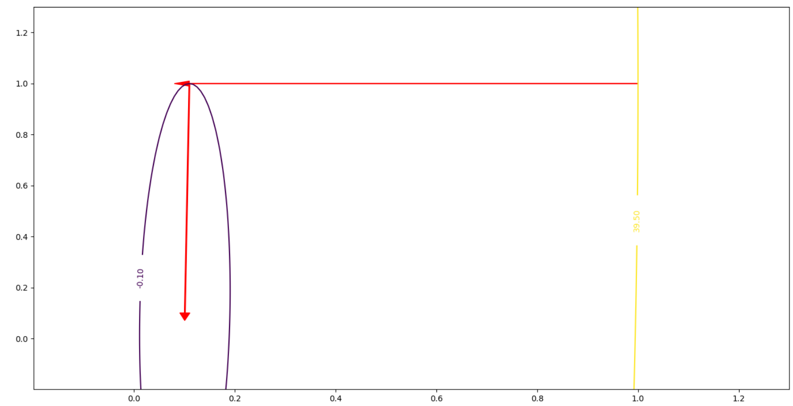


Рис. 6: Траектория метода на функции f_1

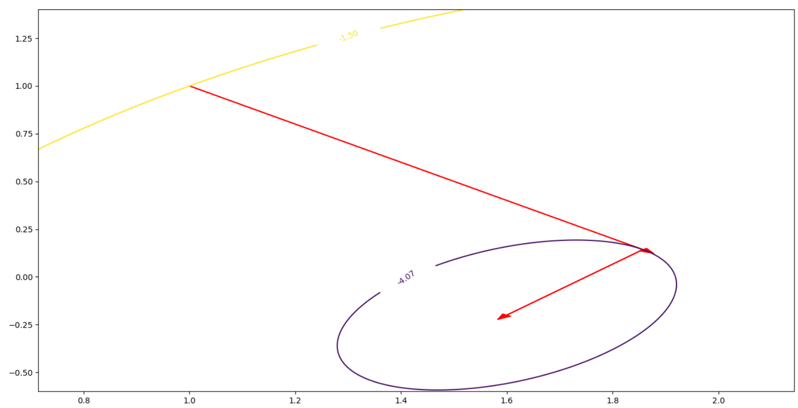


Рис. 7: Траектория метода на функции f_2

$$f_0(x) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{pmatrix} x^2 \quad x^0 = (1, 1)$$

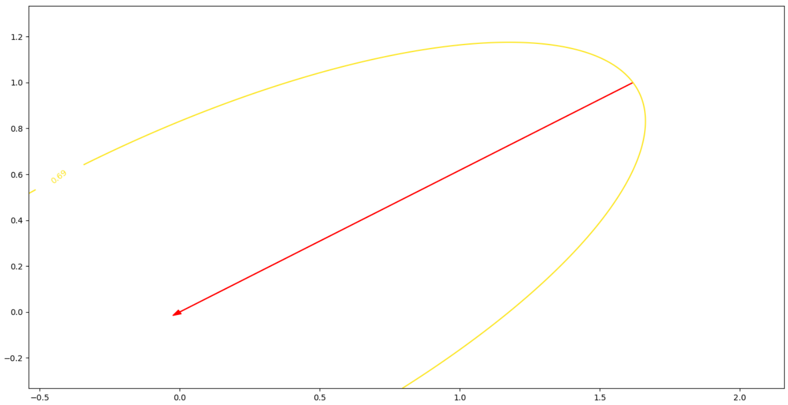


Рис. 8: Траектория метода на функции f_0 с начальным приближением x_0

Данный метод находит точку минимума на заданных функциях за два или три шага. В случае 3, когда начальное приближение равно собственному вектору матрицы A и $b = (0, 0)$, метод находит точку минимума за один шаг. Это свойство также будет верно и для метода сопряженных градиентов.

3 Выводы

Больше всего итераций совершает метод градиентного спуска. Он линейно зависит от числа обусловленности, но коэффициент этой зависимости больше чем у метода наискорейшего спуска. Лучше всего себя показывает метод сопряженных градиентов. Он совершает меньше всего итераций до сходимости, а также имеет не линейную зависимость от числа обусловленности, то есть в отличие от других методов, которые при фиксированной размерности пространства совершают $O(k)$ итераций, метод сопряженных градиентов совершает всего $O(\sqrt{k})$. Но главная особенность — он имеет верхнюю границу числа итераций равную размерности пространства.