Национальный исследовательский университет ИТМО

Факультет информационных технологий и программирования

Прикладная математика и информатика

Отчет по лабораторной работе 1

по дисциплине «**Методы оптимизации в машинном обучении**»

Авторы:	Багаутдинов Искандер Ильгизович M3237 Пан Артём Олегович M3237
Преподаватель:	Андреев Юрий Александрович

Санкт-Петербург 2024

Цель работы:

Реализовать и исследовать эффективность метода градиентного спуска с постоянным шагом, метода одномерного поиска и градиентный спуск на его основе и метода Нелдера-Мида реализованного в библиотеке scipy.optimize

Задачи работы:

- Выбрать функции, на которых эффективность методов будет явно различаться
- Исследовать работу методов в зависимости от начальной точки
- Проиллюстрировать примеры

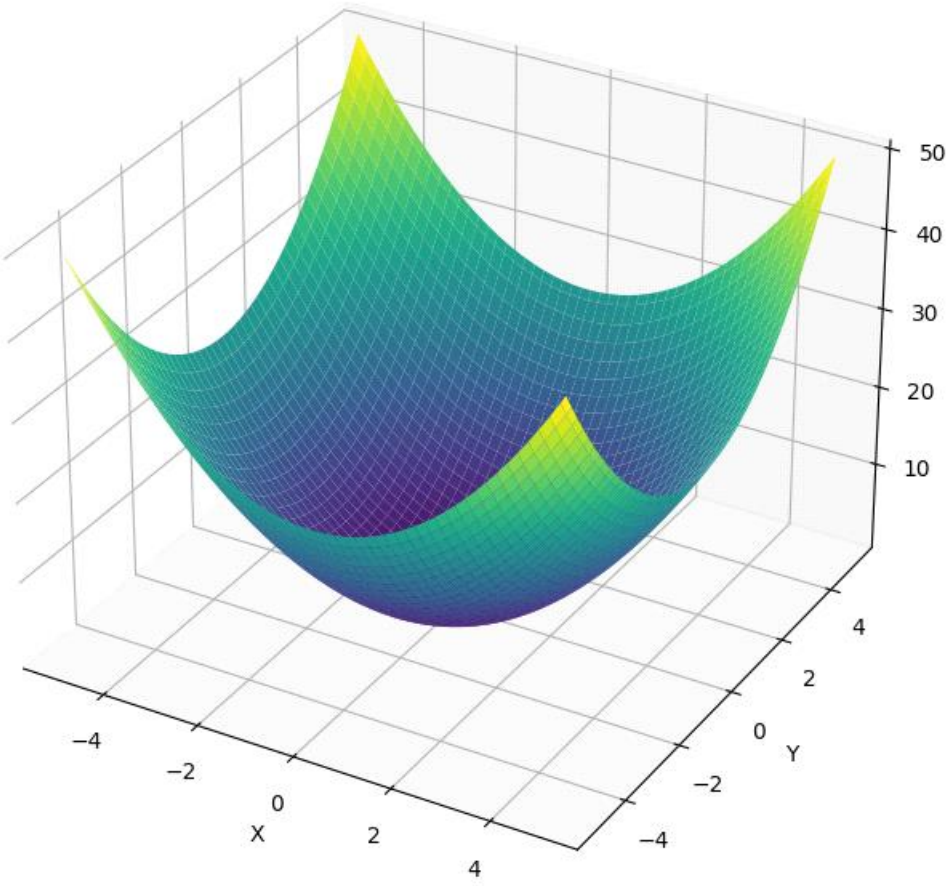
Задание 1: Выбор функций

Из квадратичных функций выберем x**2 + y**2, она выпукла (не имеет локального минимума, любой локальный минимум будет глобальным) и гладка, что позволяет неэффективному методу оптимизации все равно найти ее минимум, а также x**2 + 1000*y**2, являющуюся плохой обусловленной (число обусловленности = 1000).

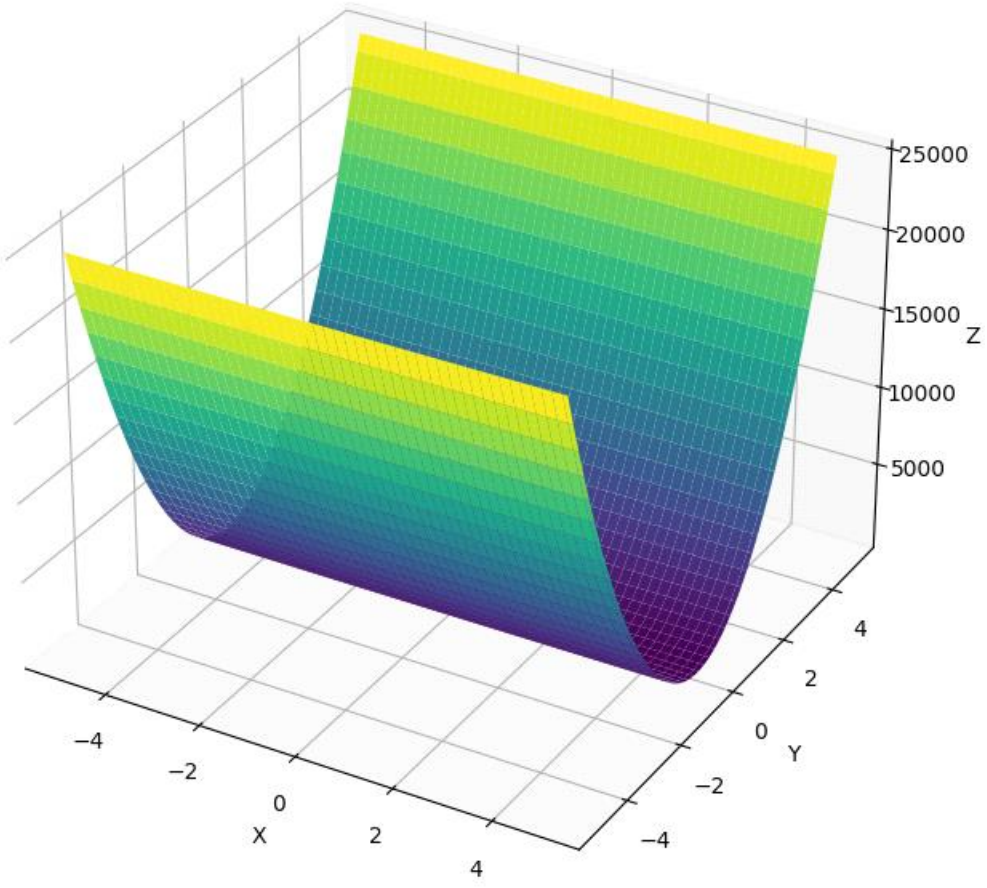
Для исследования эффективности на унимодальных функциях мной были выбраны функция Розенброка- функция вида (1-x)**2 + 100*(y-x**2)**2 и функция Химмельблау- (x**2 + y – 11) **2 + (x + y**2 – 7)**2. Две данные функции имеют нетривиальную поверхность и достаточное количество точек в которых неэффективные методы могут застрять/не найти точку минимума. Так же, второй функцией была выбрана

Визуализация функций:

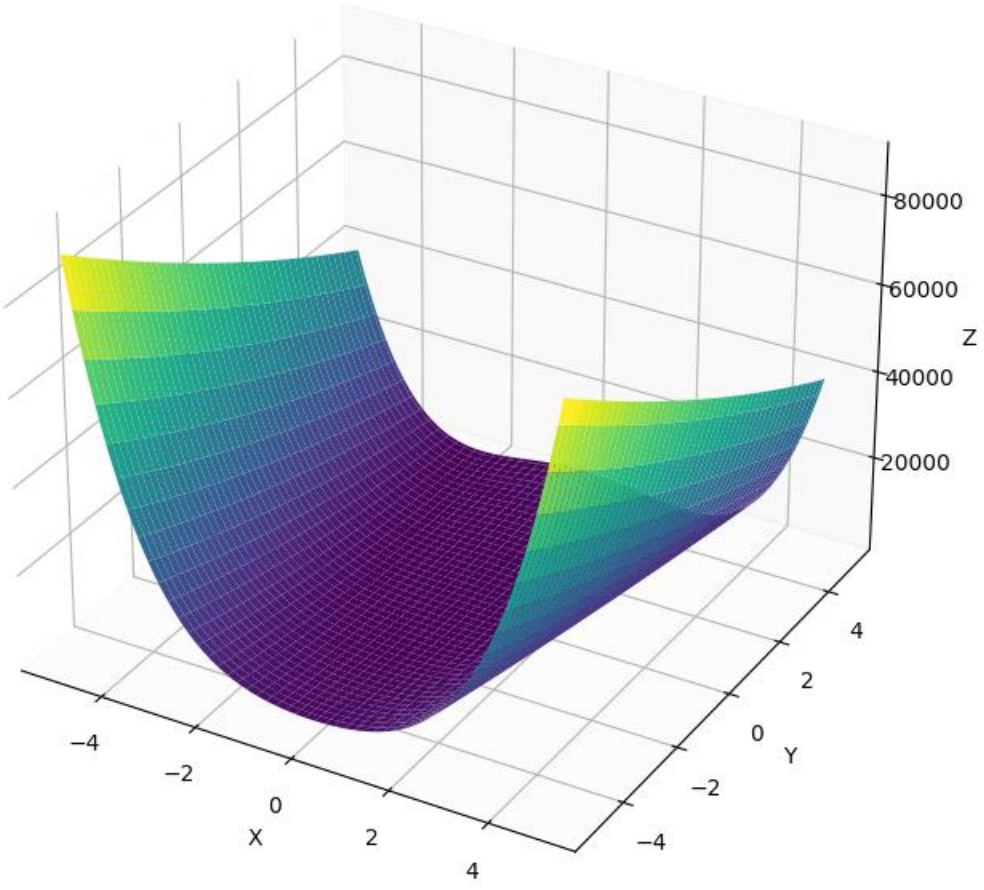
Сферическая функция

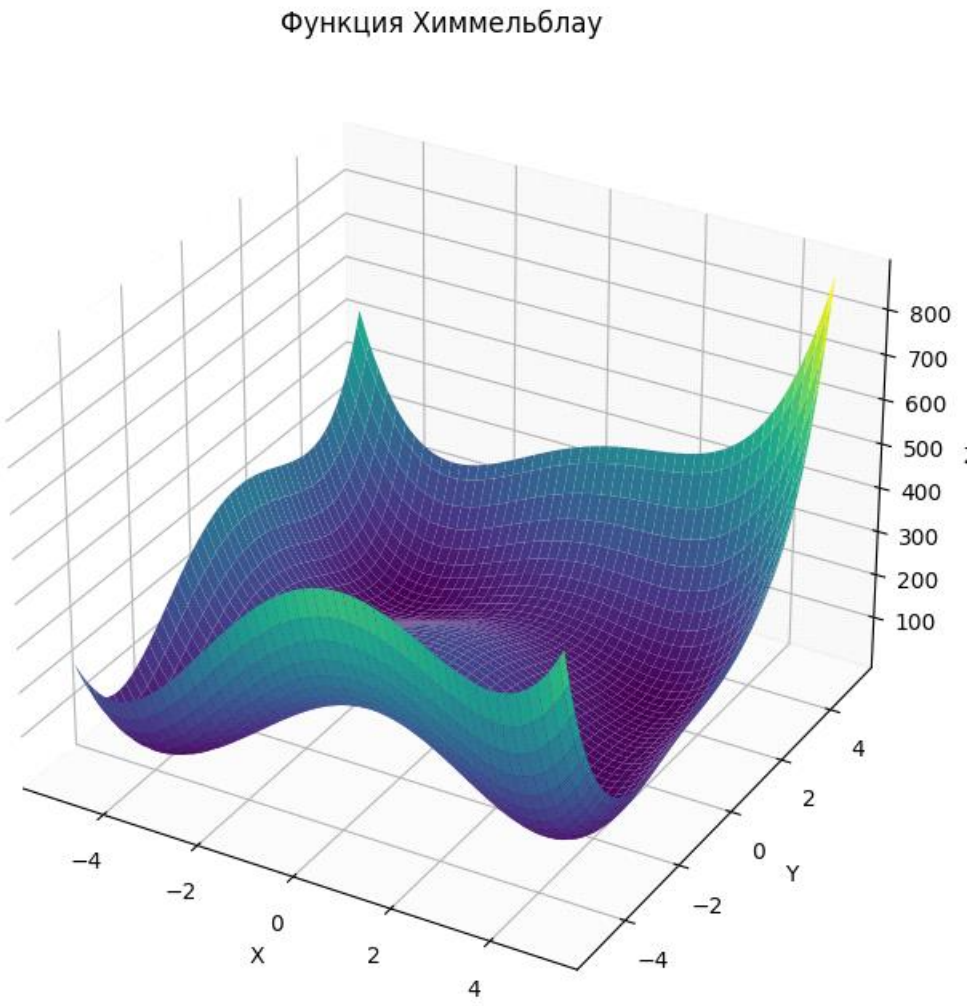


Плохо обусловленная функция



Функция Розенброка

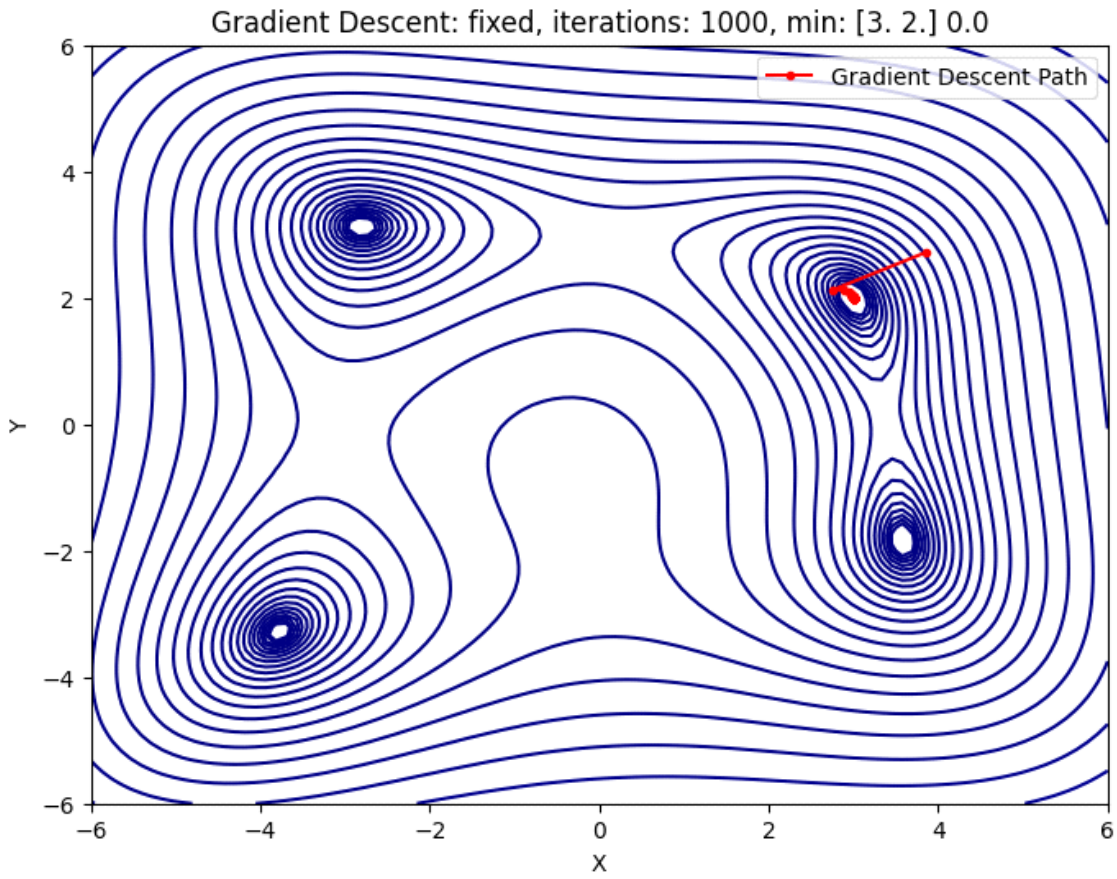




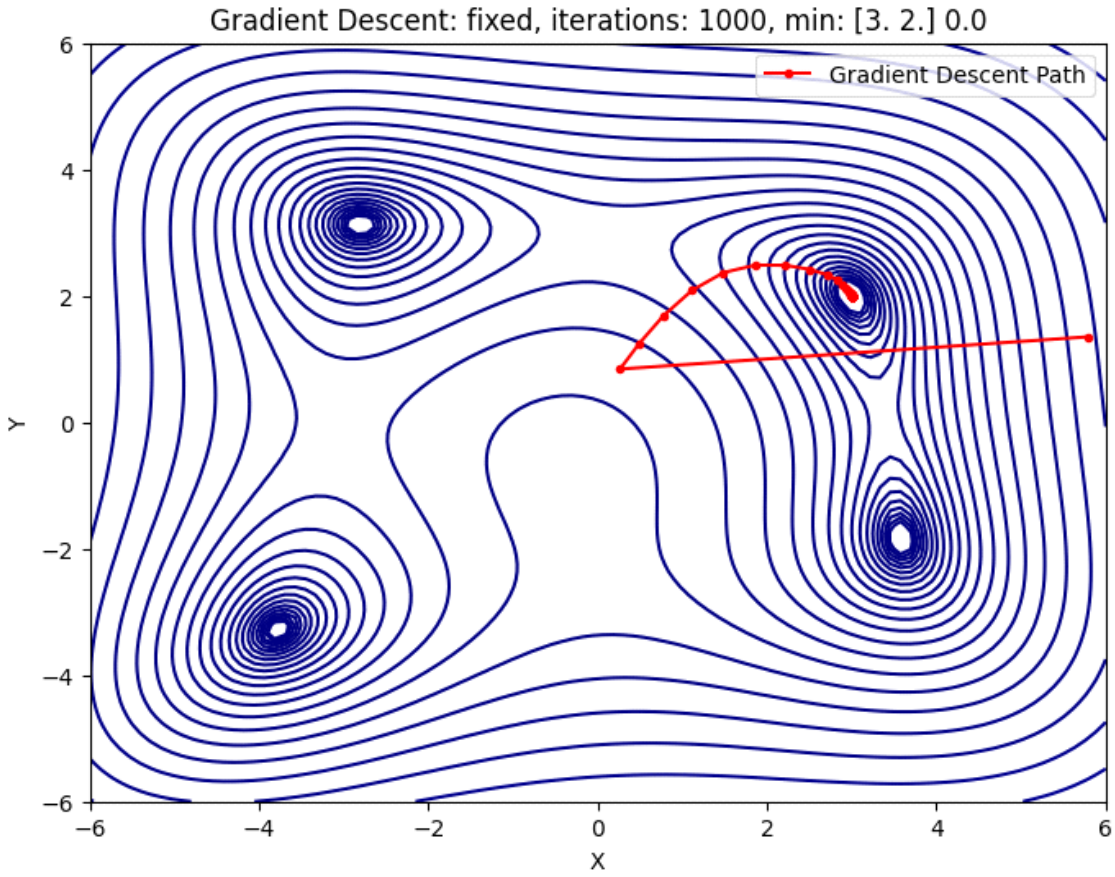
Пункт 1. Метод градиентного спуска с постоянным шагом.

С расчётом на дальнейшее обобщение постоянный шаг был реализован с помощью функции *fixed_search*, для сохранения общей сигнатуры она принимает, как и следующие методы какие-то параметры, но возвращает только фиксированный learning rate представленный в виде константы. Учитывая это обобщение, в функцию градиентного спуска grad_step передается сама функция, функция, определяющая метод вычисления lr, количество итераций спуска, начальное значение и tolerance для прерывания работы алгоритма в случае незначительности изменения значения из-за маленького значения градиента, что позволяет нам понять сколько итераций хватило для прихода к минимуму. Дальше просто в цикле считается learning rate, градиент и меняем значения текущего x.

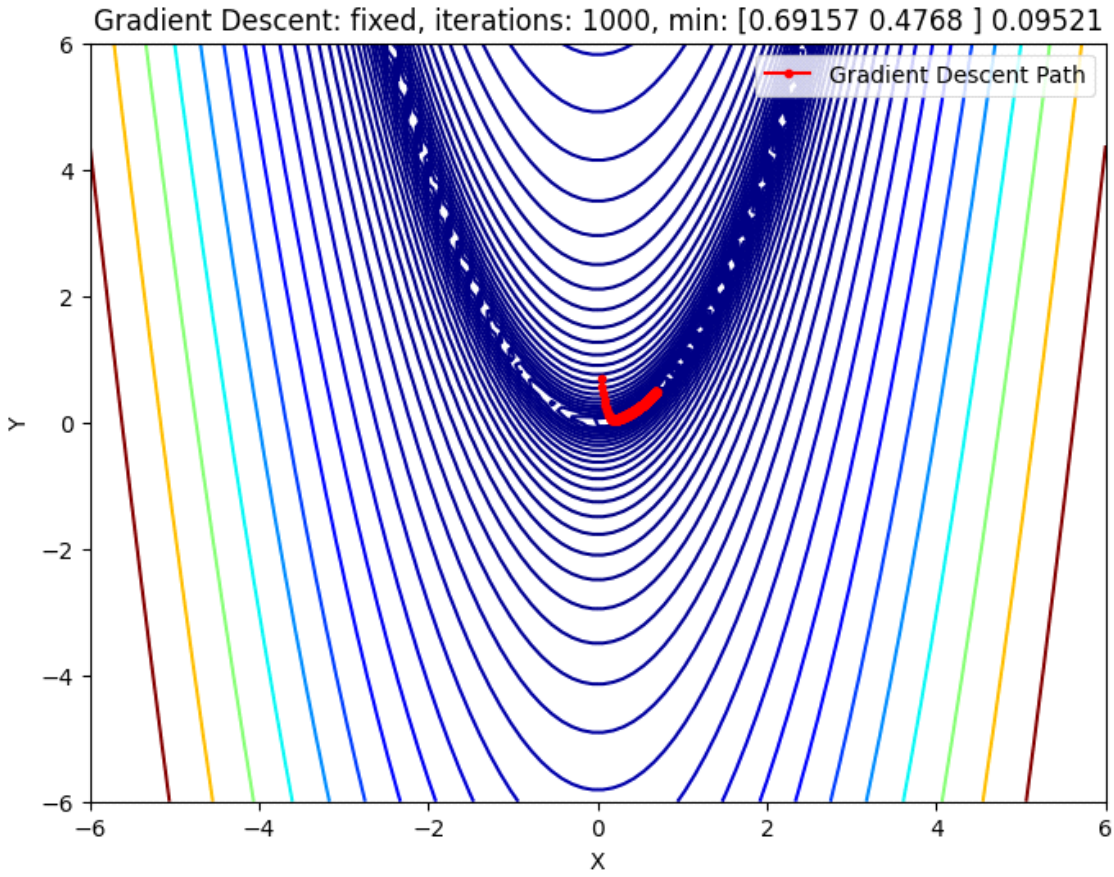
Применение данного метода поиска:



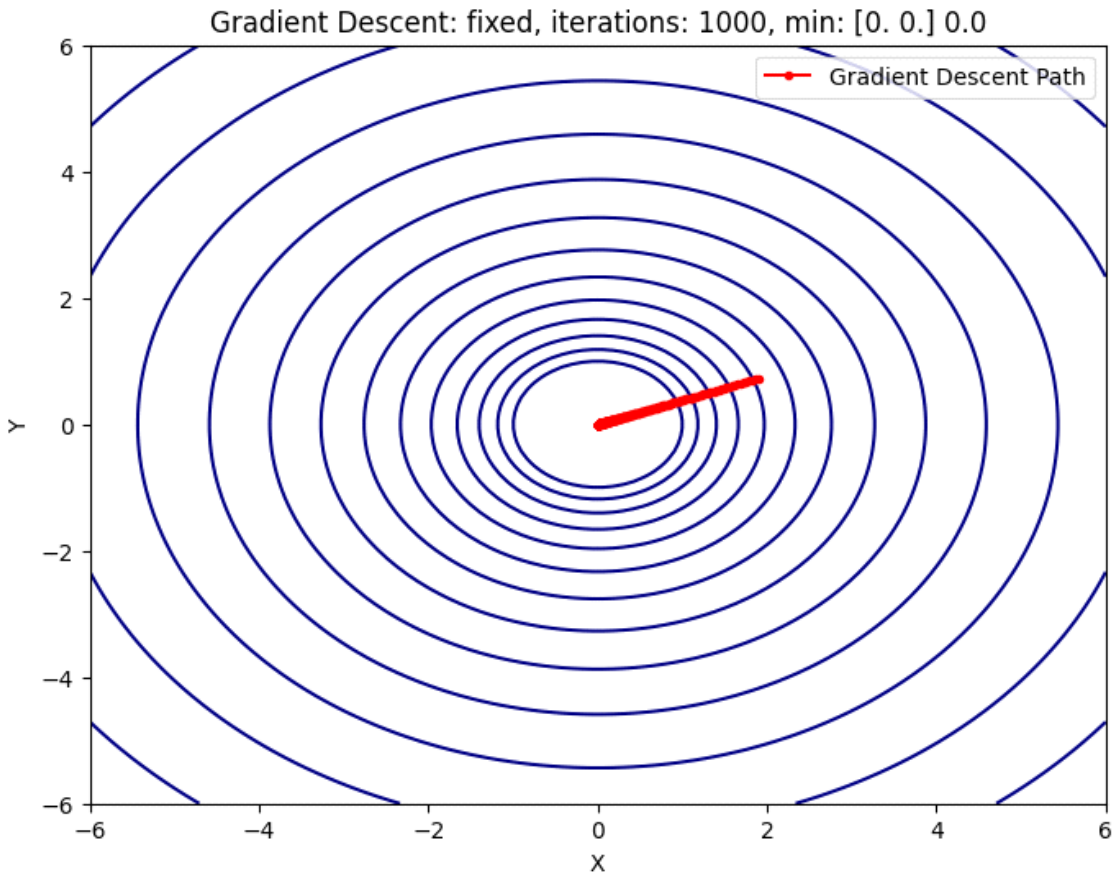
Функция Химмельблау, начальная точка [3.86030667 2.72365164], сошелся к минимуму за выделенное число итераций, предварительно не прервался



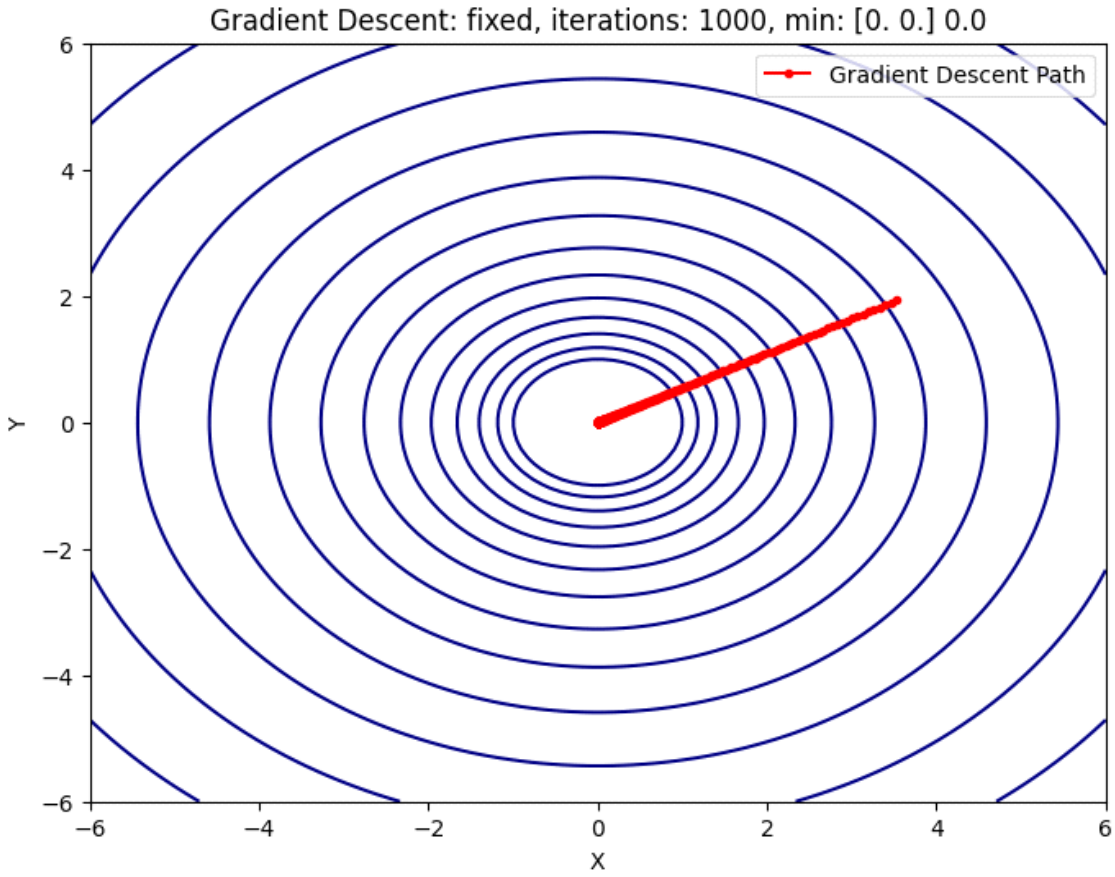
Функция Химмельблау, начальная точка [5.78442868 1.35173453], сошелся к минимуму за выделенное число итераций, предварительно не прервался



Функция Розенброка, начальная точка [0.0372064, 0.69903833], не сошелся к минимуму за выделенное число итераций, предварительно не прервался. Смог посчитаться только при очень маленьком значении learning rate(0.001)



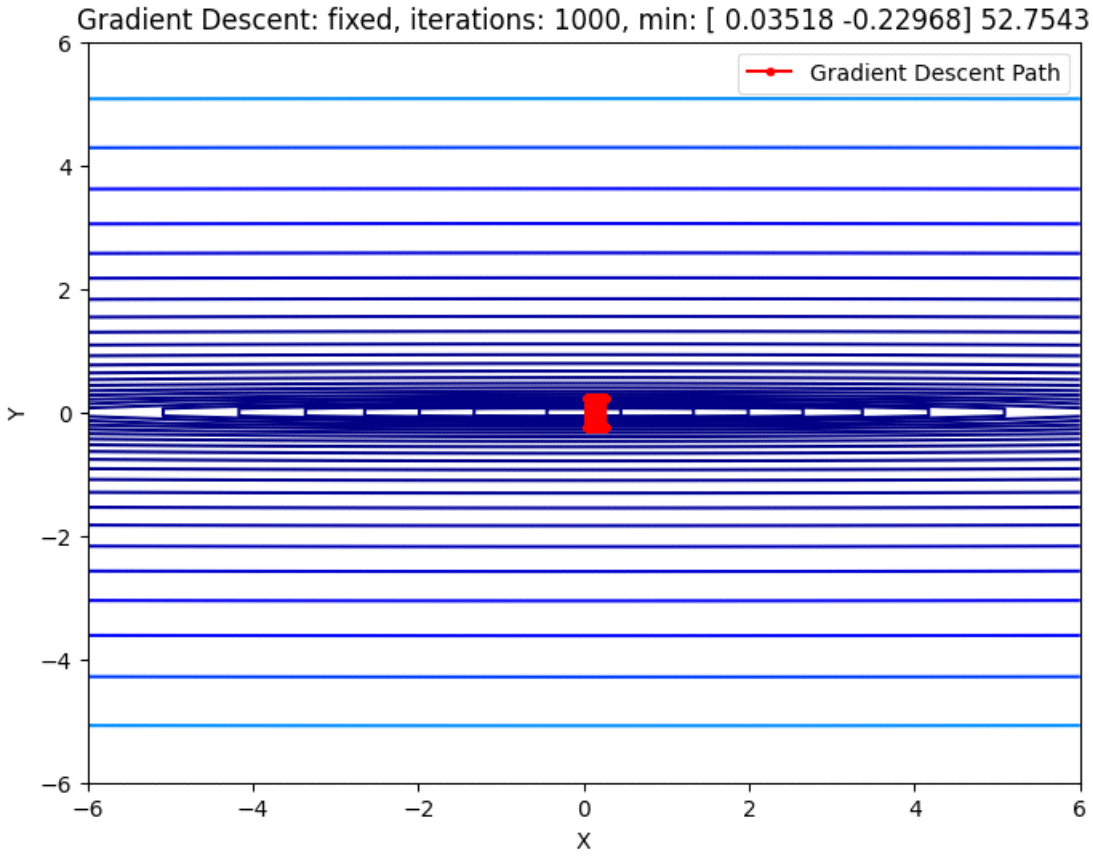
Функция сферы, начальная точка [1.90214151 0.7253265], сошелся к минимуму за выделенное число итераций, предварительно не прервался



Функция сферы, начальная точка [3.53647661 1.93623233], сошелся к минимуму за выделенное число итераций, предварительно не прервался

Заметим, что алгоритм может при различных параметрах находить минимум функции не перепрыгивая его, однако показывает свою неэффективность на простых функциях очень медленно приближаясь к минимуму. Это можно заметить на последней функции.

Плохо обусловленная функция начальная точка [0.0372064, 0.69903833]:

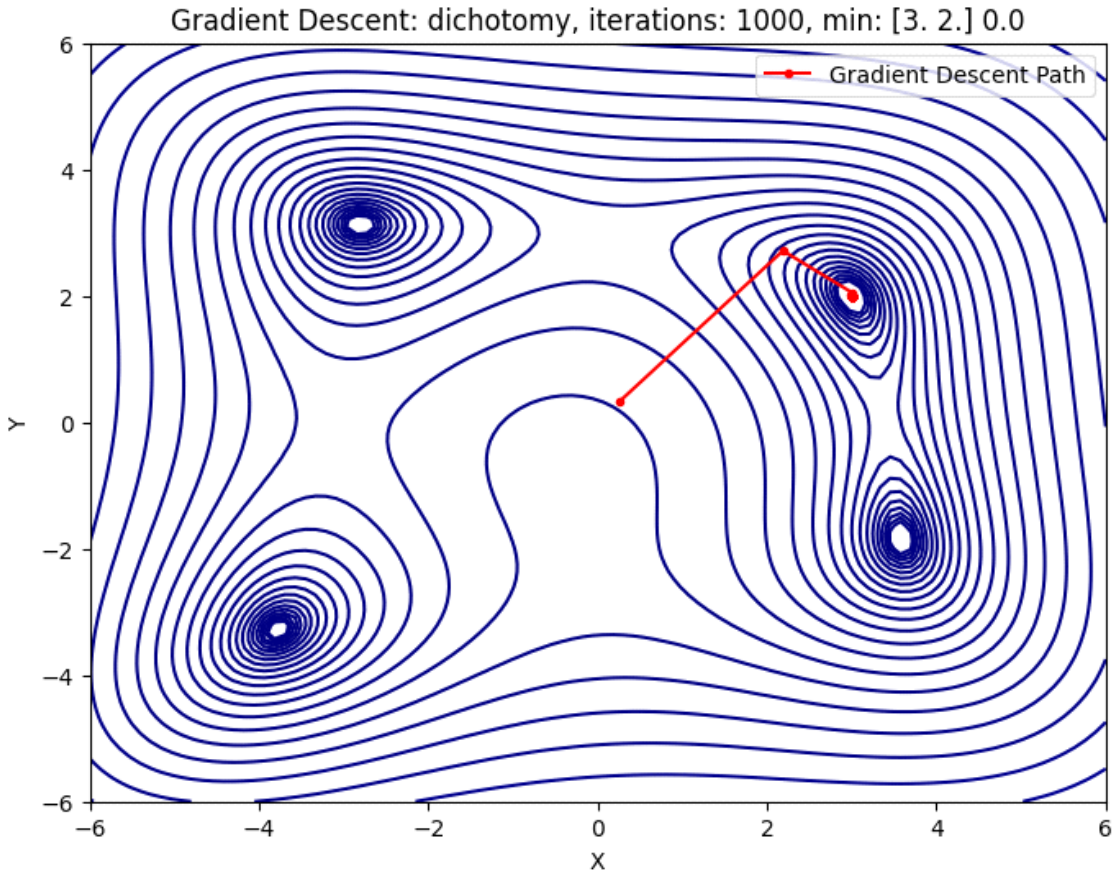


Так как частная производная по Y зачастую сильно больше частной производной по X, в начале метод перепрыгивает нужное значение по Y, образуя "квадрат" на графике.

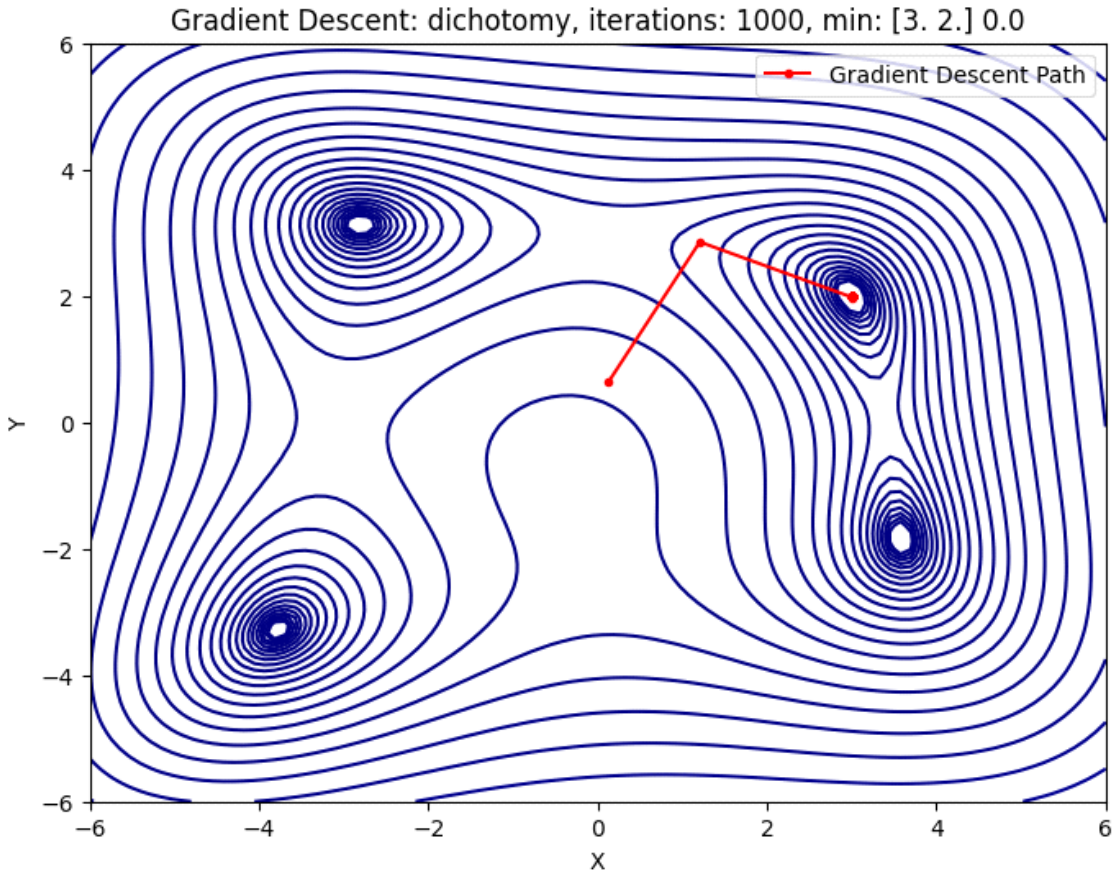
Пункт 2. Метод одномерного поиска и градиентный спуск на его основе.

После обобщения основной части кода реализующий градиентный спуск достаточно рассмотреть функцию вычисляющую learning rate. Рассмотрим метод дихотомии. Он ищет корень на отрезке, где в начальной и конечной точках функция принимает значения разных знаков. При условии непрерывности исходной функции, [a_{k+1}, b_{k+1}] = {[a_k, (a_k+b_k)/2] при f((a_k+b_k)/2 > 0, [a_k+b_k)/2, b_k] при f((a_k+b_k)/2 <= 0}. Так мы находим подходящий отрезок по условиям данного метода и находим на нем локальный минимум.

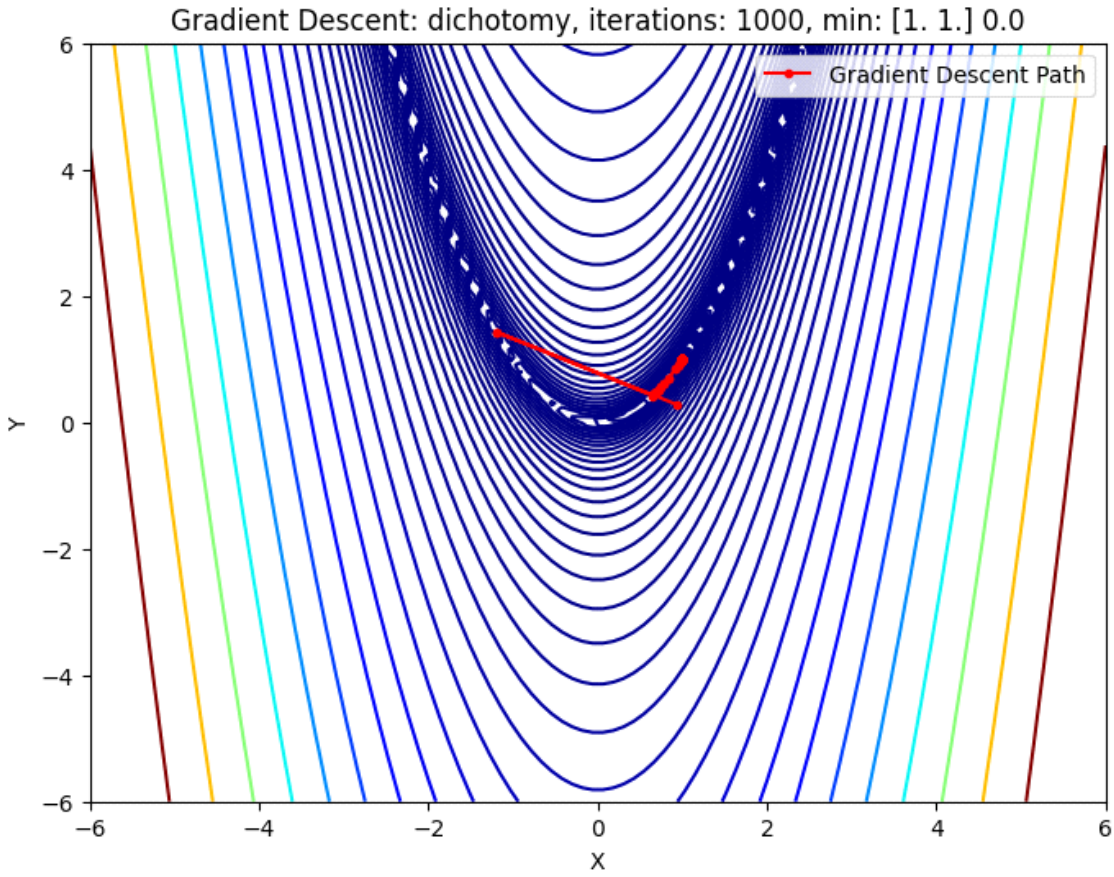
Применение данного метода поиска:



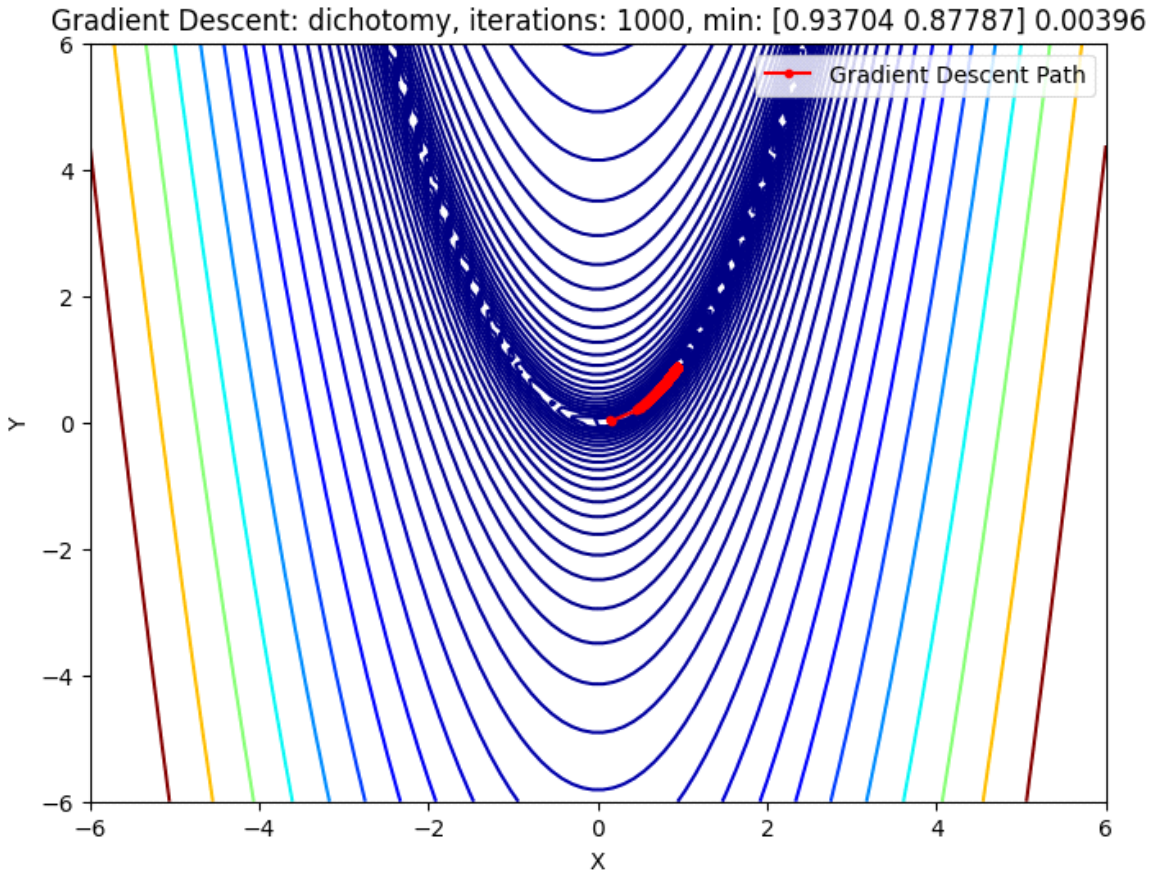
Функция Химмельблау, начальная точка [0.26324866 0.33777349], сошелся к минимуму за выделенное число итераций, предварительно не прервался



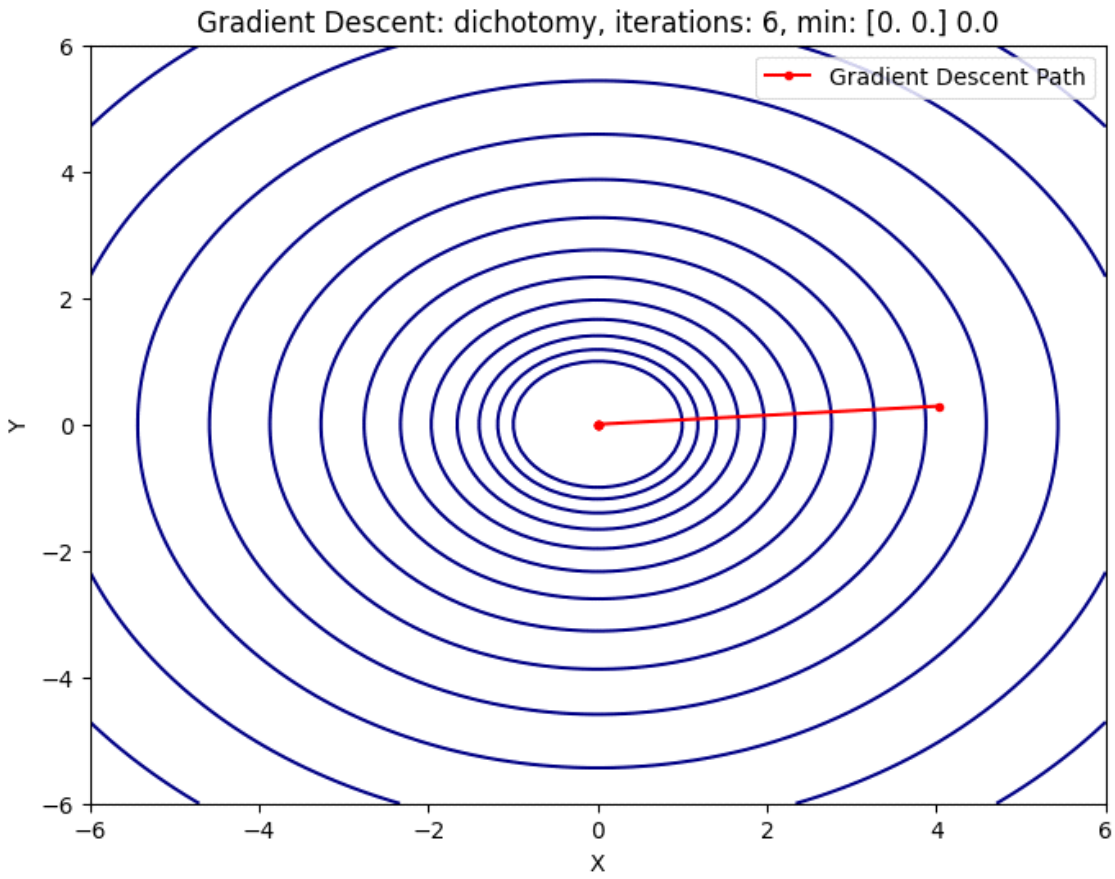
Функция Химмельблау, начальная точка [0.1228098 0.6310801], сошелся к минимуму за выделенное число итераций, предварительно не прервался



Функция Розенброка, начальная точка [0.92657944 0.28404483], сошелся к минимуму за выделенное число итераций, предварительно не прервался



Функция Розенброка, начальная точка [0.14510266 0.0513785], к минимуму не сошелся



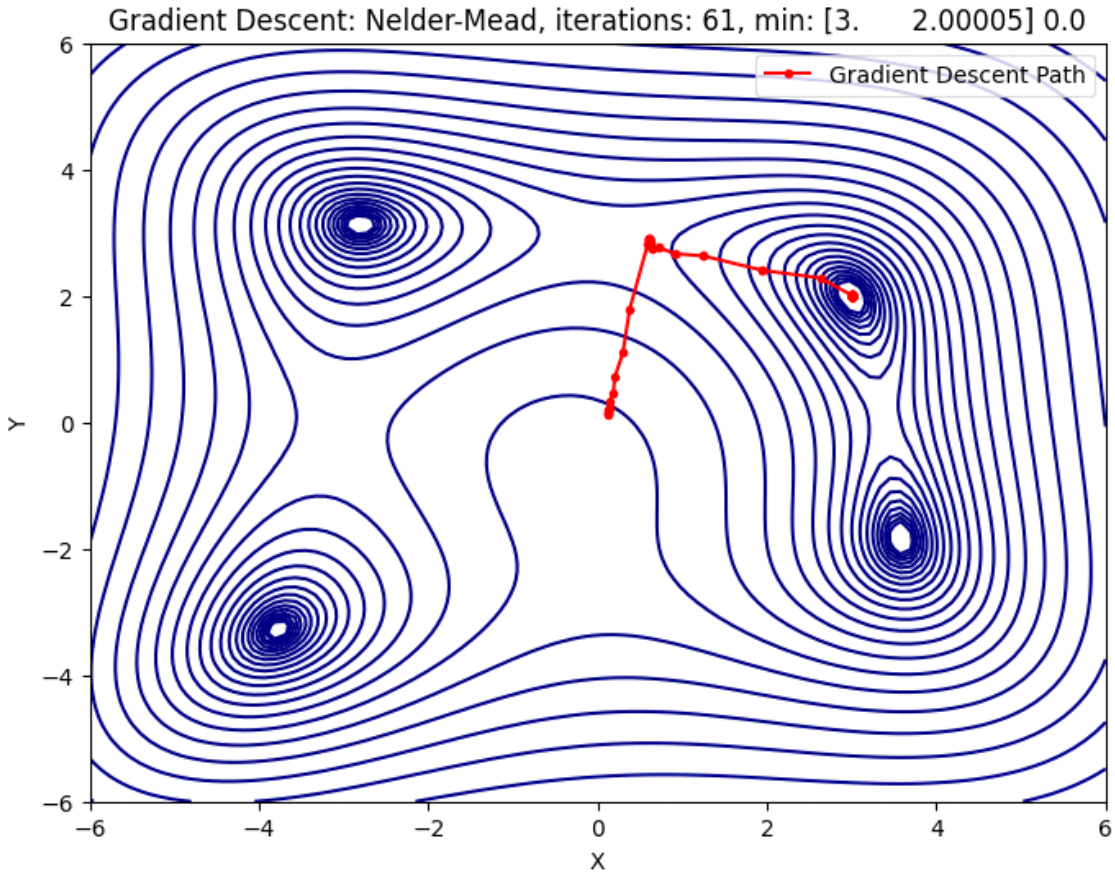
Функция сферы, начальная точка [4.02796054 0.28822934], сошелся к минимуму, прервался.

Заметим, что данный метод одномерного поиска так же не справляется с функцией Розенброка как и спуск с фиксированным шагом, однако показывает большое преимущество на простых функциях, где из-за способности менять шаг алгоритм завершился всего через 7 итераций.

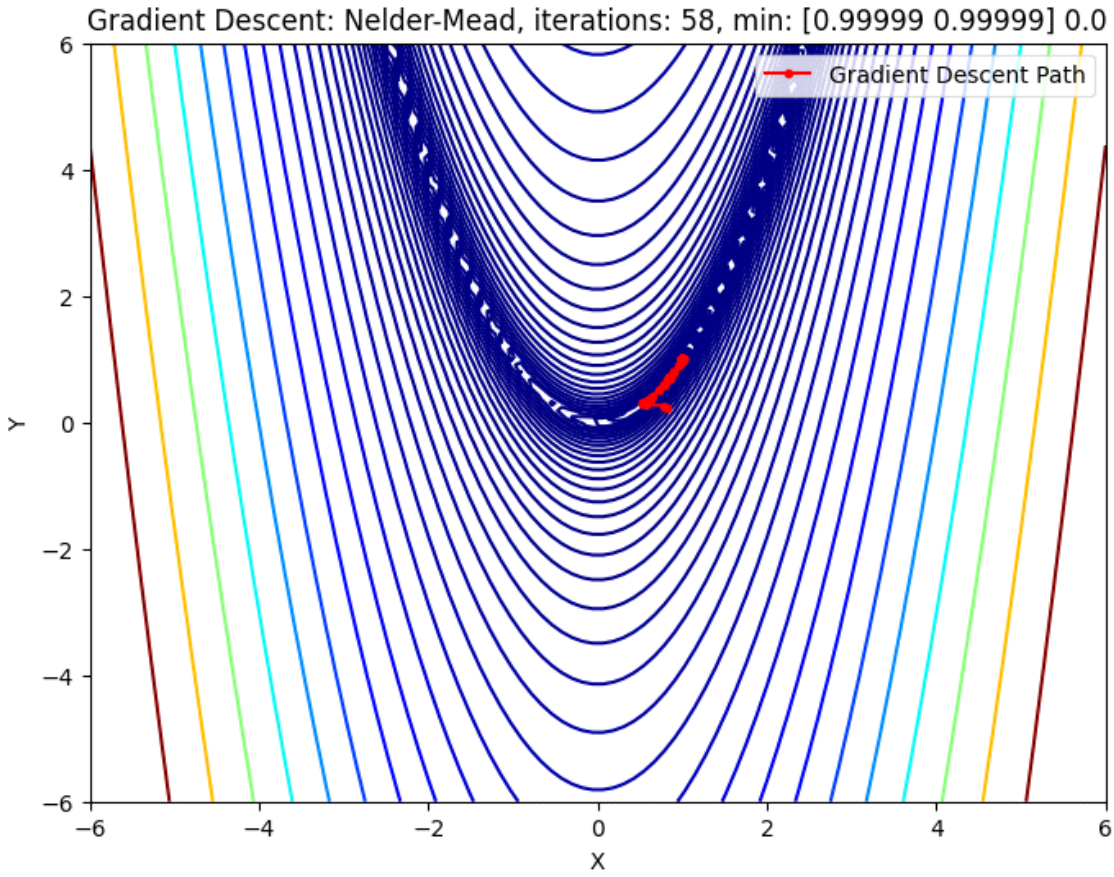
Пункт 3. Метод Нелдера-Мида

Метод оптимизации, не основанный на производной, а на разбиениях на треугольники, использую его реализацию из модуля scipy.

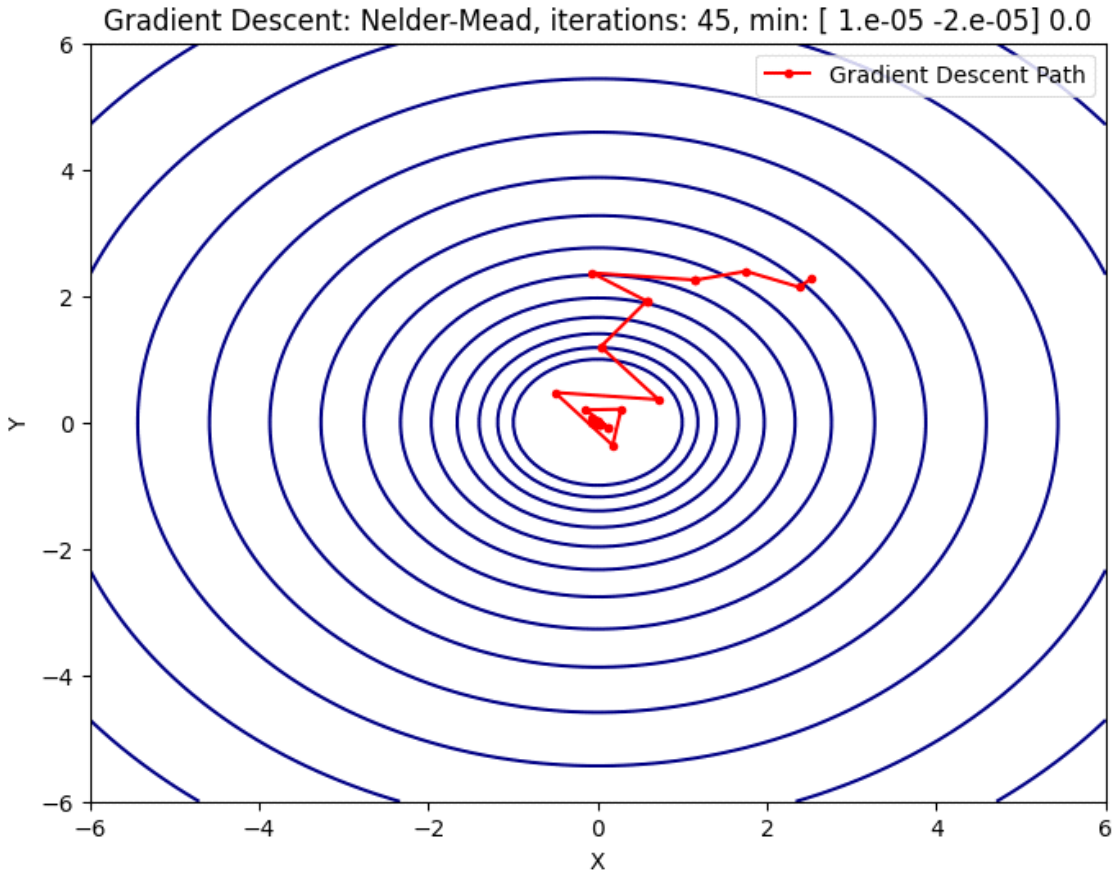
Сравним на функциях:



Функция Химмельблау, начальная точка [0.11243966 0.12395764], сошелся к минимуму, прервался.



Функция Розенброка, начальная точка [0.91649243 0.2197488], сошелся к минимуму, прервался.



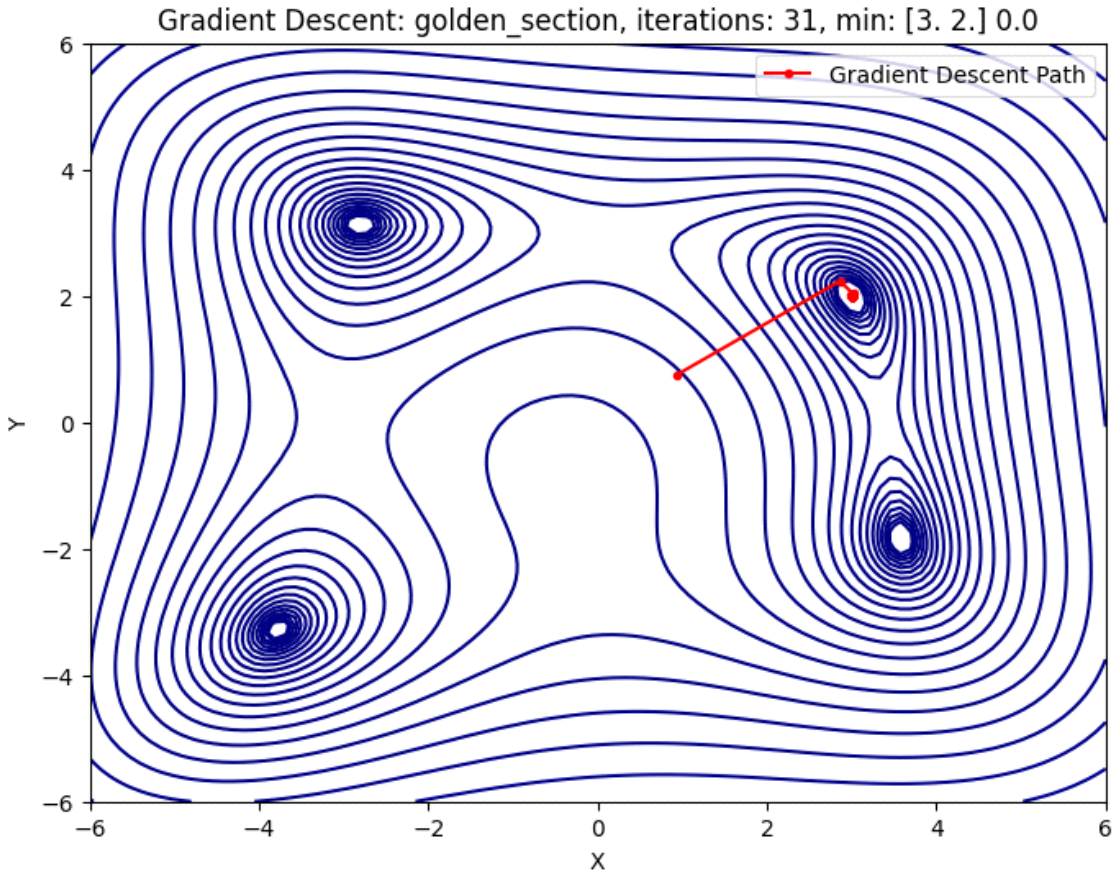
Функция сферы, начальная точка [2.79926617 2.11253293], сошелся к минимуму, прервался.

Заметим, что данный метод показывает превосходную точность, одновременно показывая достаточность малого количества итераций.

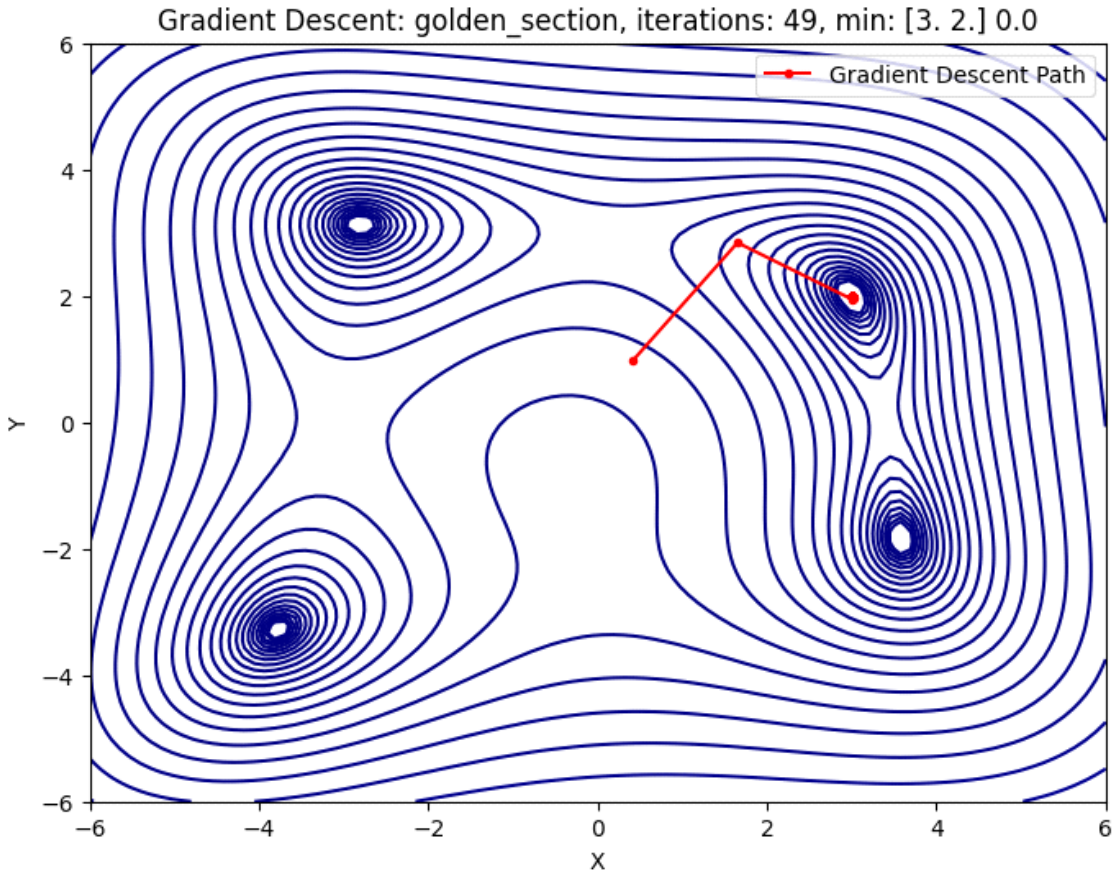
Дополнительное задание 1. Сравнение еще одного одномерного метода поиска

Рассмотрим метод поиска с помощью золотого сечения. Этот метод так же итеративно сужает границы отрезка пока его точность нас не устроит. Делается разбиения с помощью прибавления и вычитания (r-l)/(phi+1)(отрезки разбиваются симметрично), дальше рассматривается два случая в зависимости от того какое значение функции будет больше, благодаря чему на каждой итерации отрезок сужается, когда он сузился достаточно возвращается его середина.

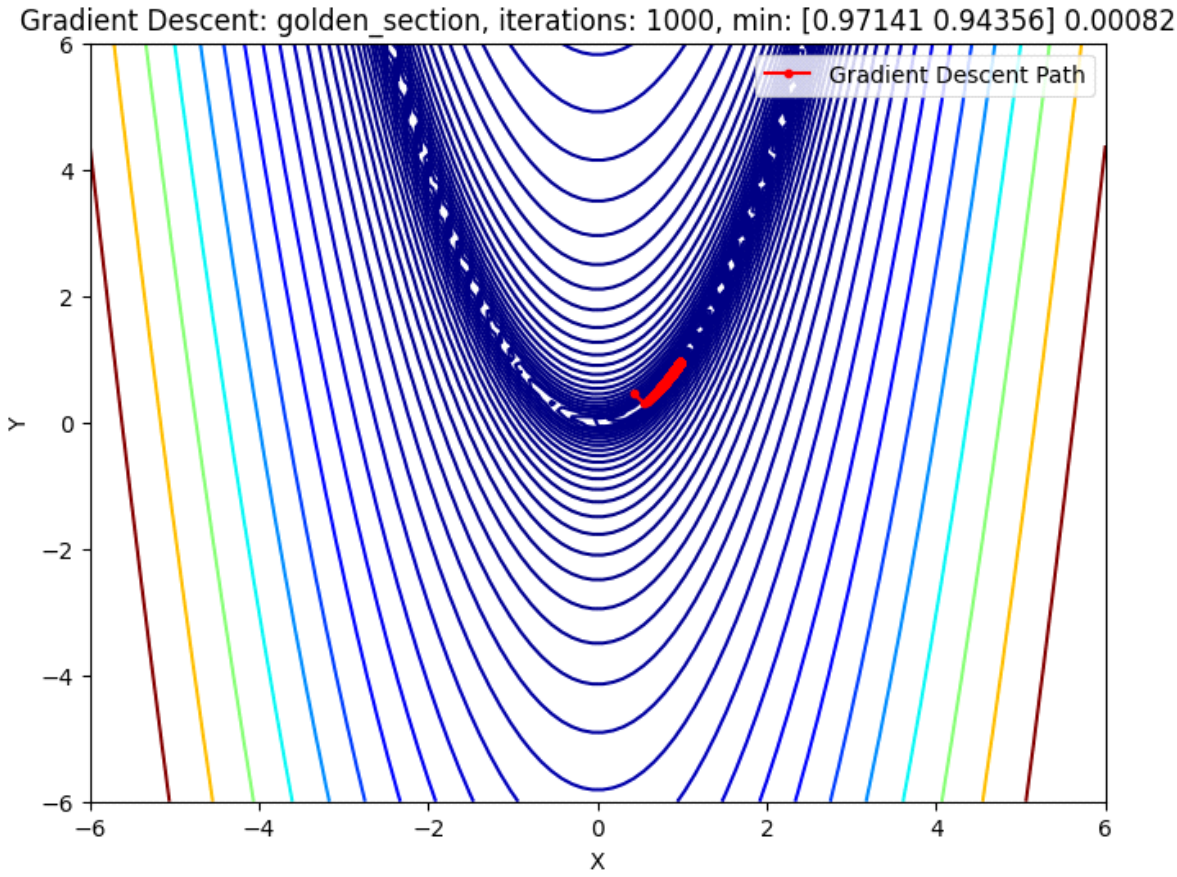
Сравним на функциях:



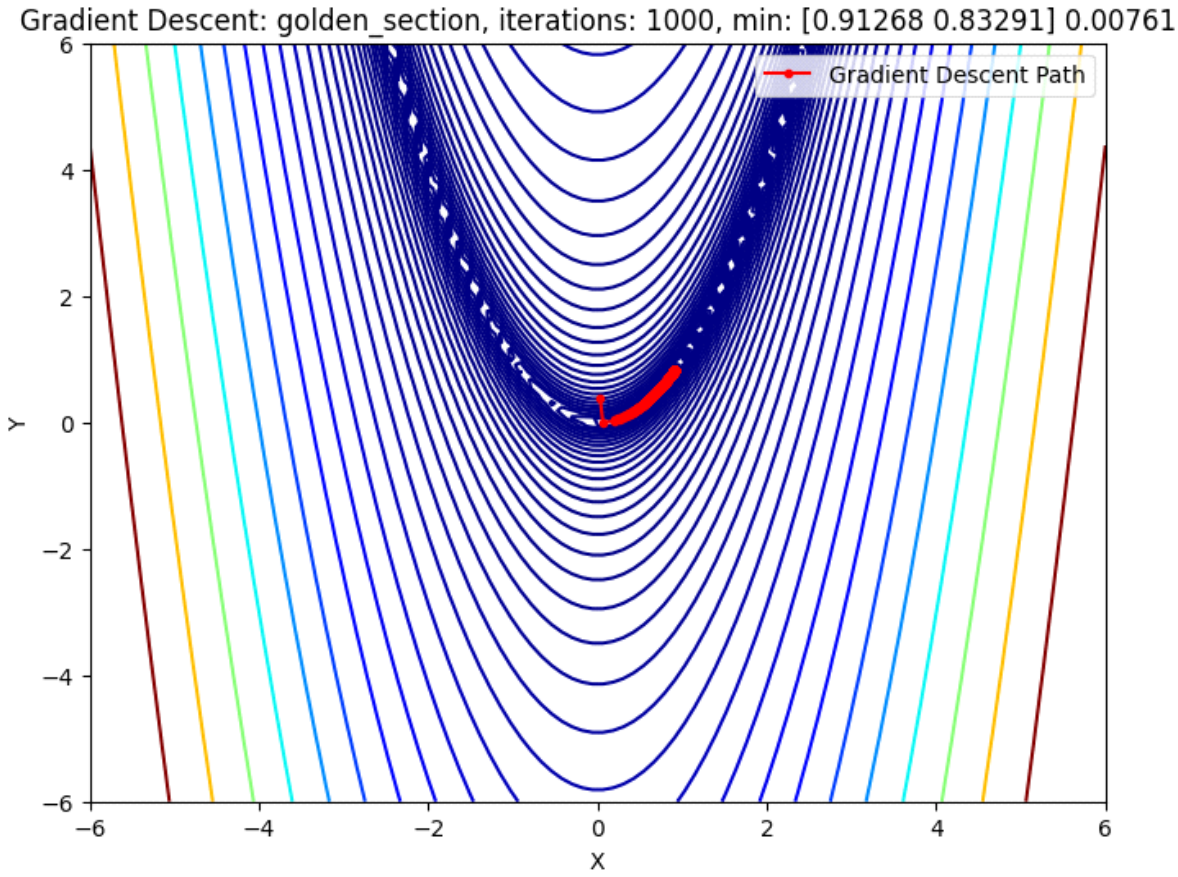
Функция Химмельблау, начальная точка [0.92417768 0.74481266], сошелся к минимуму за выделенное число итераций, предварительно не прервался



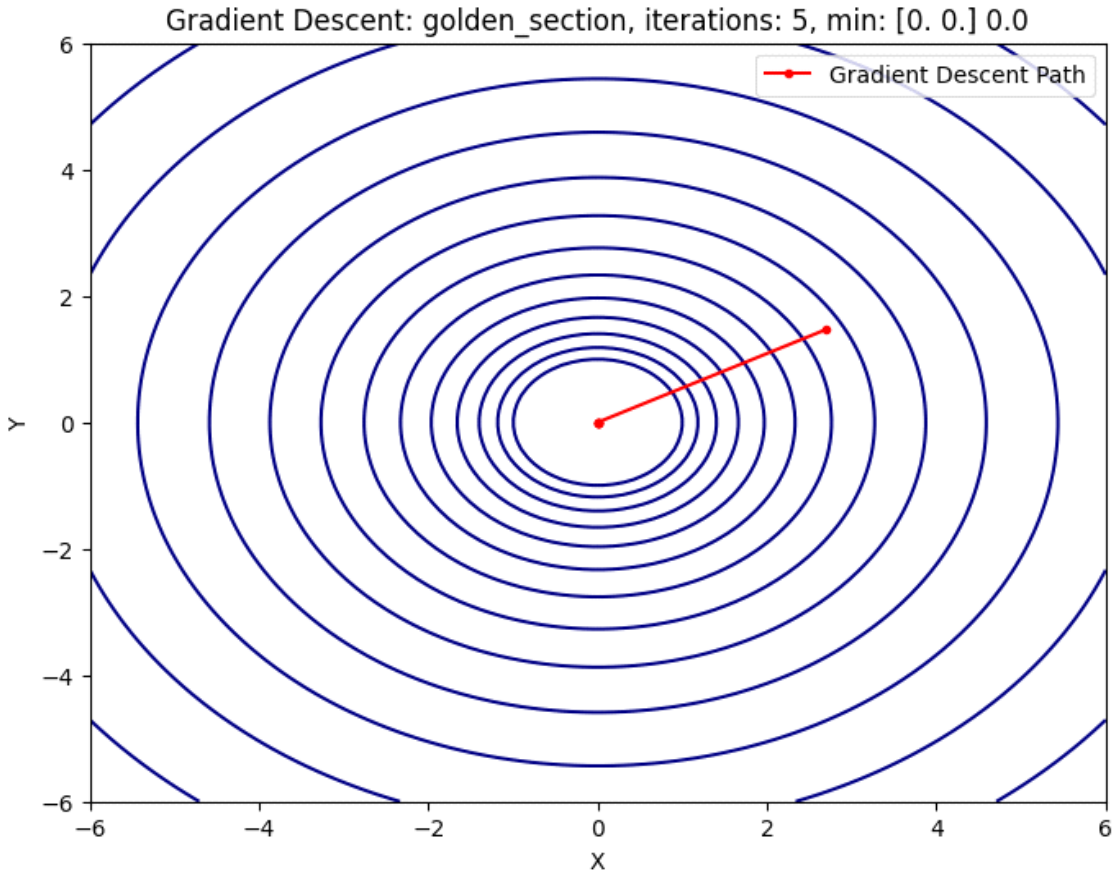
Функция Химмельблау, начальная точка [0.41808488 0.98353343], сошелся к минимуму за выделенное число итераций, предварительно не прервался



Функция Розенброка, начальная точка [0.4228748 0.45119854], не сошелся.



Функция Розенброка, начальная точка [0.02915941 0.3806357], не сошелся.



Функция сферы, начальная точка [2.69403073 1.46730378], сошелся к минимуму, прервался.

Заметим, что количество итераций для простой функции так же значительно сократилось односительно спуска с фиксированным learning rate, однако для функции Розенброка данный метод, так же как и дихотомия не сходится даже при достаточно большом количестве итераций.

Таблица для функции сферы

Начальная точка	Точность	Постоянный шаг. Результат	Дихотомия. Результат	Метод Нелдера-Мида. Результат	Метод золотого сечения. Результ	Количество итераций. Постоянный шаг	Количество итераций. Дихотомия	Количество итераций. Метод Нелдера-Мида	Количество итераций. Метод золотого сечения

					ьтат				
[0.2599 2047, 0.22968 035]	1e-3	7.52902	5905.85 689	1.096 2	10.97 379	1000	1000	1000	1000
[0.0329 4912, 0.11885 609]	1e-8	0.49641	23358.6 6839	0.184 32	1.950 36	1000	1000	1000	1000
[0.1930 7619, 0.06130 238]	1e-18	1.08751	149.628 52	0.557 66	5.874 05	1000	1000	1000	1000

Таблица для функции сферы с шумом

Начальная точка	Точность	Постоянный шаг. Результат	Дихотомия. Результат	Метод Нелдера-Мида. Результат	Метод золотого сечения. Результат	Количество итераций. Постоянный шаг	Количество итераций. Дихотомия	Количество итераций. Метод Нелдера-Мида	Количество итераций. Метод золотого сечения
[0.2599 2047, 0.22968 035]	1e-3	0.12	0.0	0.0	0.0	0	1	37	1
[0.0329 4912, 0.11885 609]	1e-8	0.0028	0	0	0	1000	2	35	2
[0.1930	1e-18	0.0008	0	0	0	1000	3	36	3

7619, 0.06130 238]									

Таблица для функции Розенброка

Начальная точка	Точность	Постоянный шаг. Результат	Дихотомия. Результат	Метод Нелдера-Мида. Результат	Метод золотого сечения. Результат	Количество итераций. Постоянный шаг	Количество итераций. Дихотомия	Количество итераций. Метод Нелдера-Мида	Количество итераций. Метод золотого сечения
[0.2599 2047, 0.22968 035]	1e-3	0.39	0.05	0	0.05	50	176	65	178
[0.0507 1181, 0.89095 865]	1e-8	0.1033	0.0085	0	0.085	1000	1000	80	1000
[0.1930 7619, 0.06130 238]	1e-18	0.09	0.008	0	0.001	1000	1000	72	1000

Таблица для функции Химельблау

Начальная точка	Точность	Постоянный шаг. Результат	Дихотомия. Результат	Метод Нелдера-Мида. Результат	Метод золотого сечения. Результат	Количество итераций. Постоянный шаг	Количество итераций. Дихотомия	Количество итераций. Метод Нелдера-Мида	Количество итераций. Метод золотого сечения
[0.25992047, 0.22968035]	1e-3	0.01	0.00002	0.0	0.00002	103	7	55	7
[0.03294912, 0.11885609]	1e-8	0	0	0	0	593	22	69	22
[0.19307619, 0.06130238]	1e-18	0	0	0	0	1000	1000	64	39

Таблица для плохо обусловленной функции

Начальная точка	Точность	Постоянный шаг. Результат	Дихотомия. Результат	Метод Нелдера-Мида. Результат	Метод золотого сечения. Результат	Количество итераций. Постоянный шаг	Количество итераций. Дихотомия	Количество итераций. Метод Нелдера-Мида	Количество итераций. Метод золотого сечения
[0.25992047, 0.22968	1e-3	52.7543	0.06677	0.0	0.00121	1000	2	52	10

035]									
[0.0329 4912, 0.11885 609]	1e-8	14.1267 9	1e-5	0	0	1000	1000	58	554
[0.1930 7619, 0.06130 238]	1e-18	3.75866	0	0	0	1000	1000	45	26

Вывод:

Методы золотого сечения и дихотомии делают значительно меньше итераций чем метод фиксированного спуска так как их шаги длиннее. Точность так же сильно влияет на количество итераций, результат при меньшей точности не сильно отличается чем от при большей, но при этом количество итераций становится кратно меньше.

Лучше всего себя показал метод Нелдера-Мида. Его ломаная напоминает ломанную при стохастическом градиентном спуске, потому что двигается все время в разные стороны. У этого метода значительно меньше итераций, при этом точность лучше, потому что почти всегда алгоритм сходился.

На простых функциях метод с фиксированным шагом сильно уступает из-за большого количества итераций, однако для сложных количество итераций примерно совпадает.