Национальный исследовательский университет ИТМО
Факультет информационных технологий и программирования
Прикладная математика и информатика

Методы оптимизации

Отчет по лабораторной работе №4

⟨Собрано 28 июня 2023 г.⟩

Работу выполнили:
Бактурин Савелий Филиппович M32331
Вереня Андрей Тарасович M32331
Сотников Максим Владимирович M32331

Преподаватель:
Казанков Владислав Константинович

Стохастический градиентный спуск vs. `torch.optim`

Настало время сравнить самописные реализации обычного и других модифицированных версий стохастического градиентного спуска с написанным серьезным дядьками из PyTorch. В качестве экспериментирования мы возьмем старую добрую функцию Розенброка, которая на плоскости $\mathbb{R}^2$ определяется следующим образом:

$$f(x,\ w_0,\ w_1) = (1 - x \cdot x_0)^2 + 100 \cdot (x \cdot w_1 - x^2)^2,$$

где w_0 и w_1 – некие конечные константы. Теперь установим некие параметры для будущих тестов, а именно для генерации набора данных (*dataset*):

$$\begin{aligned} \texttt{density} &= 8000 \text{ (плотность генерируемых точек)},\\ \texttt{dots\_count} &= 1000 \text{ (количество генерируемых точек)},\\ \texttt{radius} &= 0.001 \text{ (радиус от функции генерации точек)},\\ \texttt{dist} &= 0.01 \text{ (расстояние относительно прямой генерации точек)} \end{aligned}$$

Также зададим постоянными параметрами двух конечных констант для функции Розенброка:

$$w_0 = 2 \qquad w_1 = 3$$

Далее количество тестов на усреднение результатов – данный параметр говорит, сколько необходимо сделать независимых генераций и запусков алгоритмов с начальной точки нужно сделать, затем усреднить:

$$\texttt{test\_count} = 100$$

Наконец, зададим начальную точку. Поскольку наша задача состоит в исследовании работы алгоритмов в условиях генерируемых новых точек, умоляя тех или иных дополнительных эффектов от `numpy`-генерации, то мы будем брать в качестве начала одну и ту же точку:

$$\texttt{initial\_w} = \langle -1.0,\ 0.1 \rangle$$

Перед тем как мы обратимся непосредственно к самим результатам исследований скажем несколько слов по поводу реализуемых и используемых функций. По сути, `torch.optim` это такой конструктор, который необходимо собрать, чтобы получить подходящую под задачу модель. В частности реализация использует в качестве подсчета на dataset функцию `helper.train_torch_optim`:

$$\begin{aligned} \texttt{function}\ &\mathit{train\_torch\_optim}(f\ :\ \mathbb{R}^{k+1} \to \mathbb{R},\\ &X_{\text{train}} \subset \mathbb{R},\\ &Y_{\text{train}} \subset \mathbb{R},\\ &\varepsilon_{\text{minimum}} \in \mathbb{R},\\ &\langle x_0,\ y_0 \rangle \in \mathbb{R}^2,\\ &g_{\text{loss}}\ :\ \mathbb{R}^{k+1} \to \mathbb{R},\\ &\texttt{optimizer\_method}\ :\ /^*\mathit{implementation\ defined}^*/,\\ &\texttt{num\_epochs}\ (= 10000) \in \mathbb{N},\\ &\texttt{learning\_rate}\ (= 0.01) \in \mathbb{N},\\ &\texttt{momentum}\ (= \varnothing) \in \mathbb{R},\\ &\texttt{nesterov}\ (= \mathit{False}) \in \mathbb{V},\\ &\texttt{apply\_min}\ (= \mathit{True}) \in \mathbb{V}) \end{aligned}$$

По сути, она выстраивает модель оптимизатора, определенный в библиотеке PyTorch, от `optimizer_method`, который подается как дождь - с небес, и далее по количестве, ограниченных по умолчанию в 10000 шагов, начинает обновлять параметры модели (от исходной точки) от композиции обнуления градиенты, вычисления функции потерь, проверки на сходимость и, соответственно, шага. Наконец, определим еще одну, усредняющую функцию, для вывода результатов – `get_average_loss_history` – она вычисляет среднее значение функции потерь `helper.mse_loss`, определяемая как

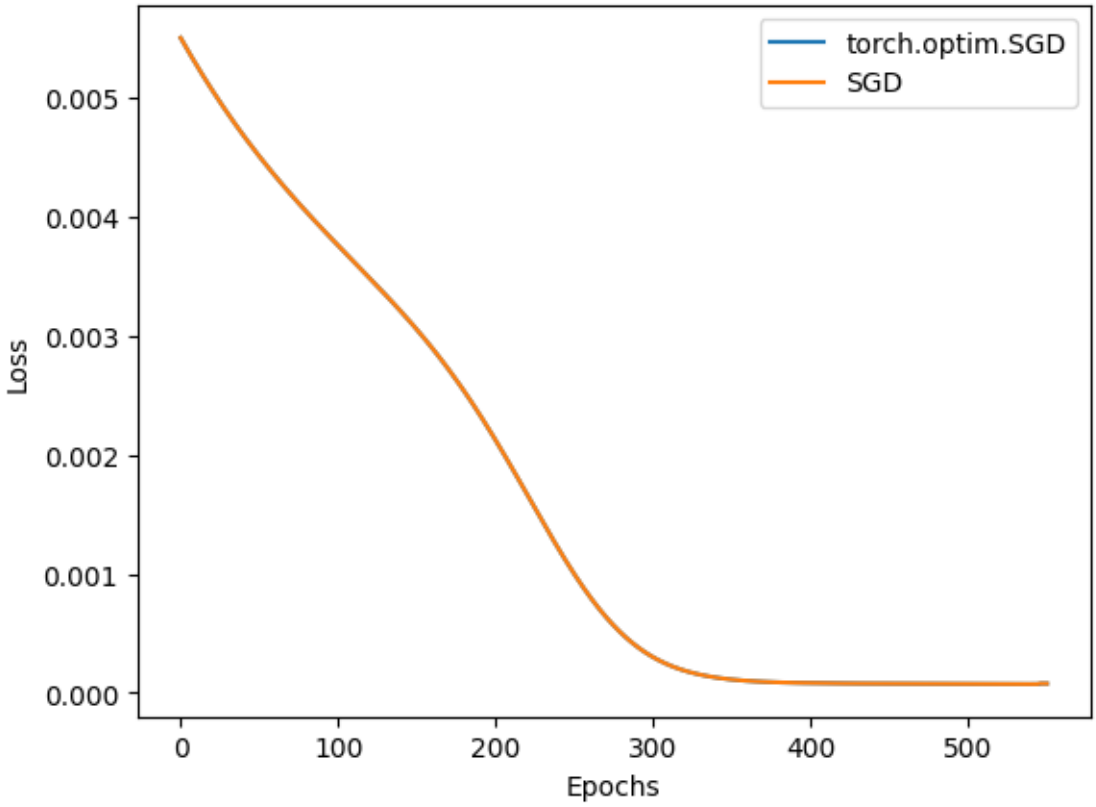
```
function mse_loss(X_dataset, Y_dataset, w, f):
    y' ← f(X_dataset, w);
    return torch.mean((Y_dataset − y')^2);

```

То есть, такая функция, которая вычисляет среднеквадратичную ошибку между предсказанными и реальными значениями на основе модели.

SGD vs. `torch.optim.SGD`

Перейдем к исследованиям. Первым на подходе мы посмотрим на стандартный стохастический градиентный спуск (с размером батча, равный единице). Запустим наших зверей и посмотрим на вывод в виде графика, по оси Y которой мы выставим значения функции потерь, по оси X - количество шагов до остановки алгоритма.



Implemented SGD vs. PyTorch's

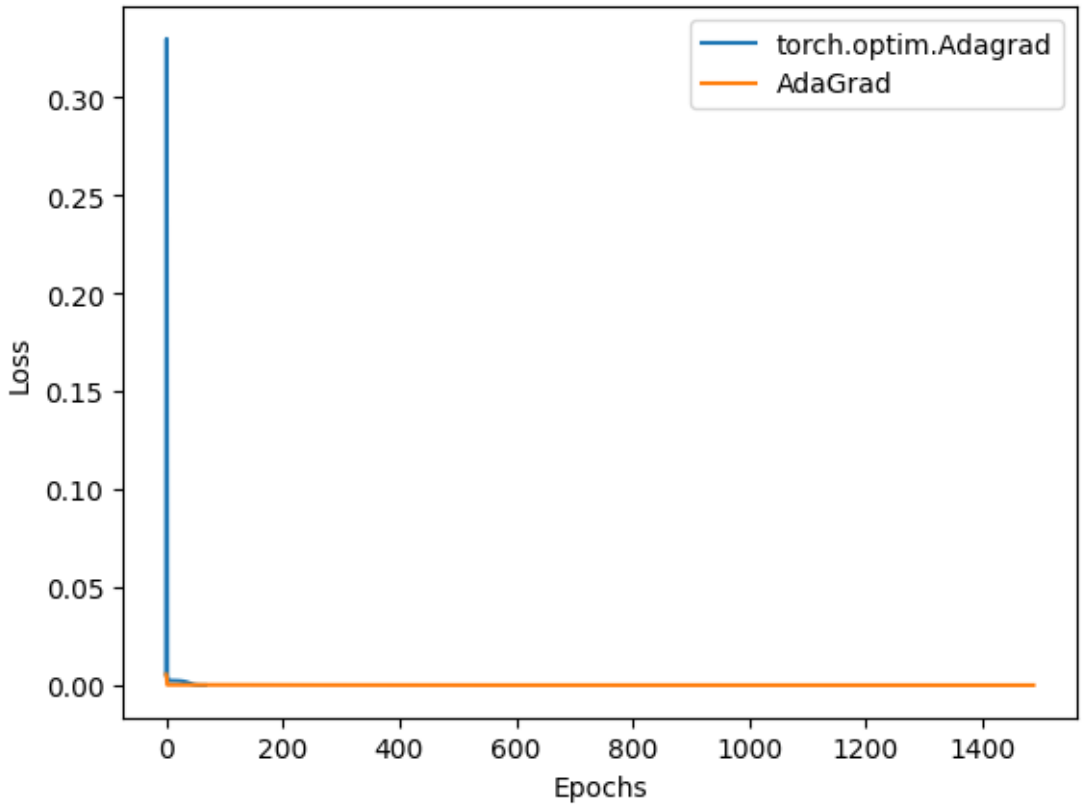
Графики почти полностью совпали. Полученные результаты соответствующие:

Испытуемый	Значение функции потерь	Среднее число шагов до схождения
Настоящие данные	0.00007481586253817499	-
`torch.optim.SGD`	0.00007753667274059714	551
Собственная реализация	0.00007756952443600056	551

Как мы видим, значения, особенно количество шагов до схождения алгоритма, почти полностью совпадают. Есть теория, что стохастический градиентный спуск был сделан правильно и, как сказал один из коллег по лабораторной работе, «по другому он не может быть сделан». По более формальной теории, поскольку dataset используется один и тот же, то есть вероятность, что точки были так удачно распределены даже спустя 100 тестов, что любая выбранная из батч размера нивелирует среднее значение.

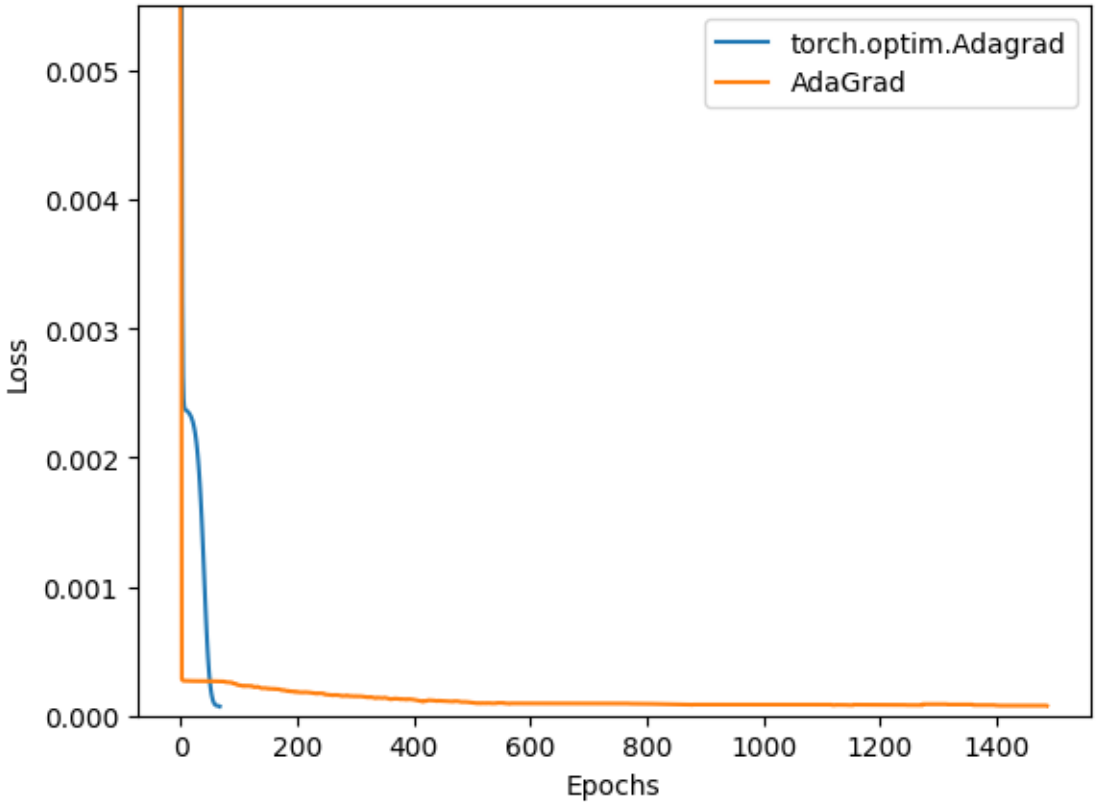
AdaGrad vs. `torch.optim.AdaGrad`

С AdaGrad'ом ситуации поинтереснее. Запустим наших зверей и посмотрим на вывод в виде графика, по оси Y которой мы выставим значения функции потерь, по оси X - количество шагов до остановки алгоритма.



Implemented AdaGrad vs. PyTorch's

Также, для наглядности, немного приблизимся к почти незаметной горке, ограничивая по оси Y.



Implemented AdaGrad vs. PyTorch's (zoom)

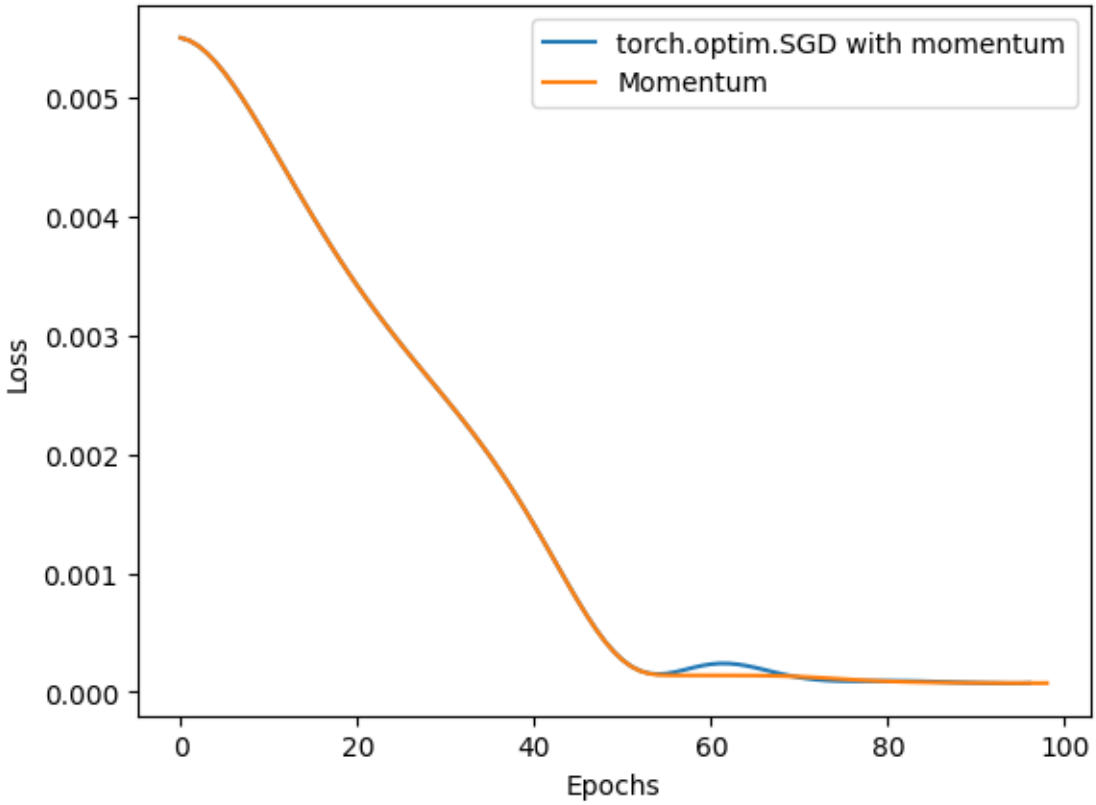
Полученные результаты соответствующие:

Испытуемый	Значение функции потерь	Среднее число шагов до схождения
Настоящие данные	0.00007481586253817499	-
`torch.optim.AdaGrad`	0.00007116629643237779	68
Собственная реализация	0.00007581577268337732	1488

Ситуация обратная самому первому исследованию: собственная реализация сильно проигрывает библиотечной. Это происходит из-за неправильно установленного изначально `learning_rate`, отчего своя реализация уходит в небытие. Также, существует мнение, что библиотечная функция рассчитана на «неудобные» начальные данная (что-то вроде защиты от дураков). А поскольку в нашем случае такого не предполагалось (вернее, обработки столь щепетильной ситуации), то и в реализации такого и нету.

Momentum vs. `torch.optim.SGD` (with `momentum = True`)

От более сложной модели мы перейдем, внезапно, к самой простой модификации к стохастическому градиентному спуску, основанный на физических моделях момента Momentum. Запустим наших зверей и посмотрим на вывод в виде графика, по оси Y которой мы выставим значения функции потерь, по оси X - количество шагов до остановки алгоритма.



Implemented Momentum vs. PyTorch's

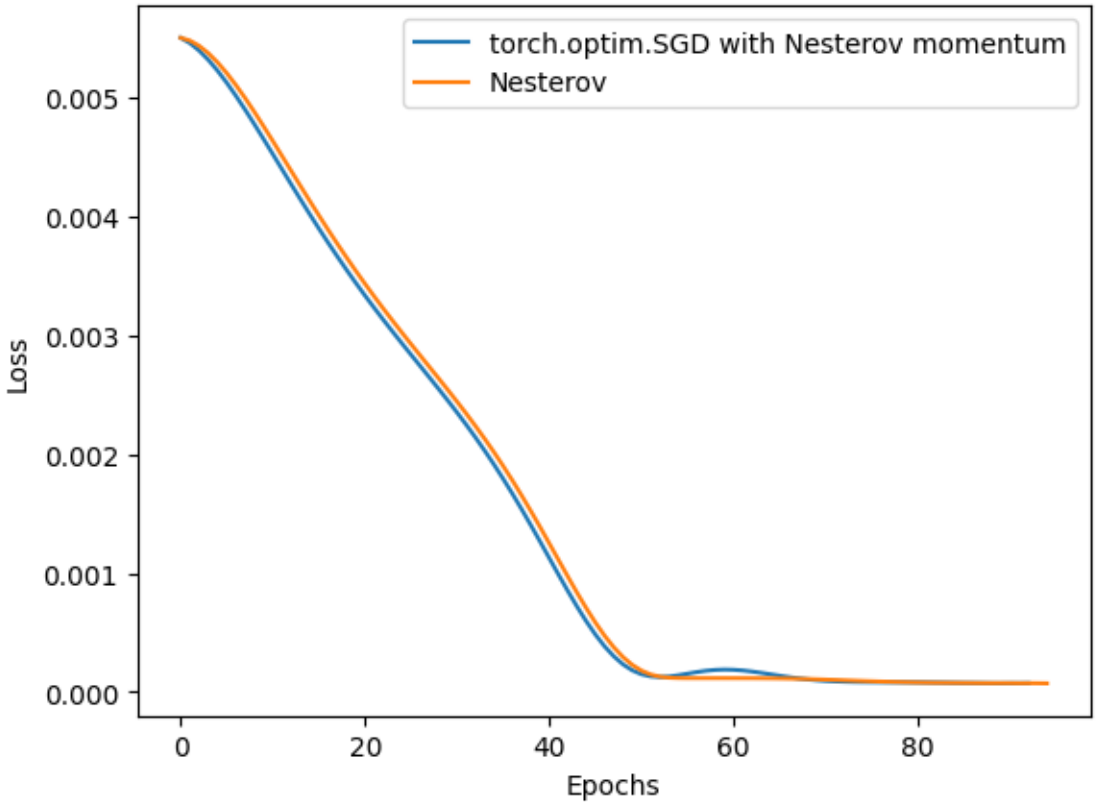
Полученные результаты соответствующие:

Испытуемый	Значение функции потерь	Среднее число шагов до схождения
Настоящие данные	0.00007481586253817499	-
`momentum = True`	0.00007458029055847868	97
Собственная реализация	0.00007460658043034181	99

Замечаем, что результаты, в особенности среднее значение функции потерь, почти не изменилось. В отличие от количества шагов, который совершенно мало увеличилось, что, опять же, как и в предыдущем случае, может быть связано с кривым поданным `learning_rate`. И всё же, почему полученные значения почти совпадают? Ситуация аналогична с ситуацией при исследовании обычного стохастического спуска: простота написания функции уменьшает количество ошибок и неточностей далее.

Nesterov vs. `torch.optim.SGD` (with `momentum = True`, `nesterov = True`)

В реализации библиотеки PyTorch функция SGD, для работы того самого Nesterov требует два флага: `momentum` и `nesterov` – это объясняется тем, модификация Nesterov берет за основу и использует идею Momentum. Запустим наших зверей и посмотрим на вывод в виде графика, по оси Y которой мы выставим значения функции потерь, по оси X - количество шагов до остановки алгоритма.



Implemented Nesterov vs. PyTorch's

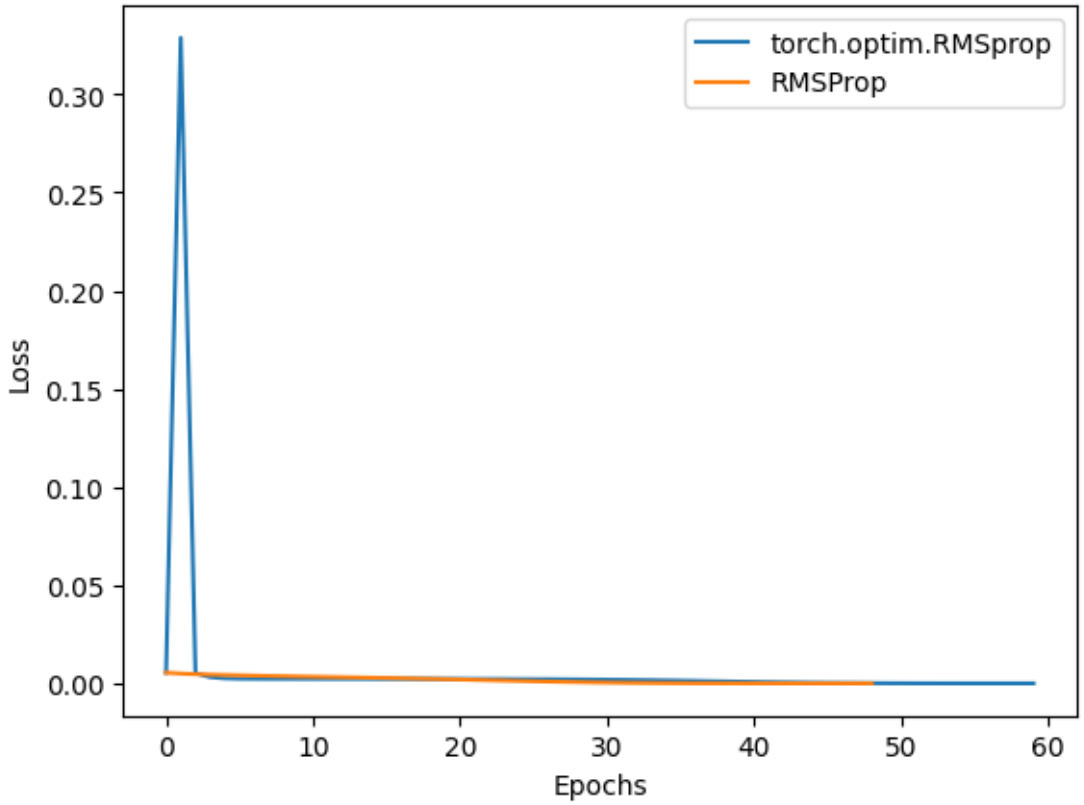
Полученные результаты соответствующие:

Испытуемый	Значение функции потерь	Среднее число шагов до схождения
Настоящие данные	0.00007458029055847868	-
`nesterov = True` и ...	0.00007412807086024441	93
Собственная реализация	0.00007271430540397701	95

Ситуация аналогична с предыдущим исследованием: наши средние значения функции потерь также почти одинаковы, отличаемые лишь в шестой цифре, и по среднему число шагов до схождения, отличаемые лишь на некоторую константу. Полученные эквивалентные результаты обусловлены простотой реализации данной модификации к стохастическому градиентному спуску.

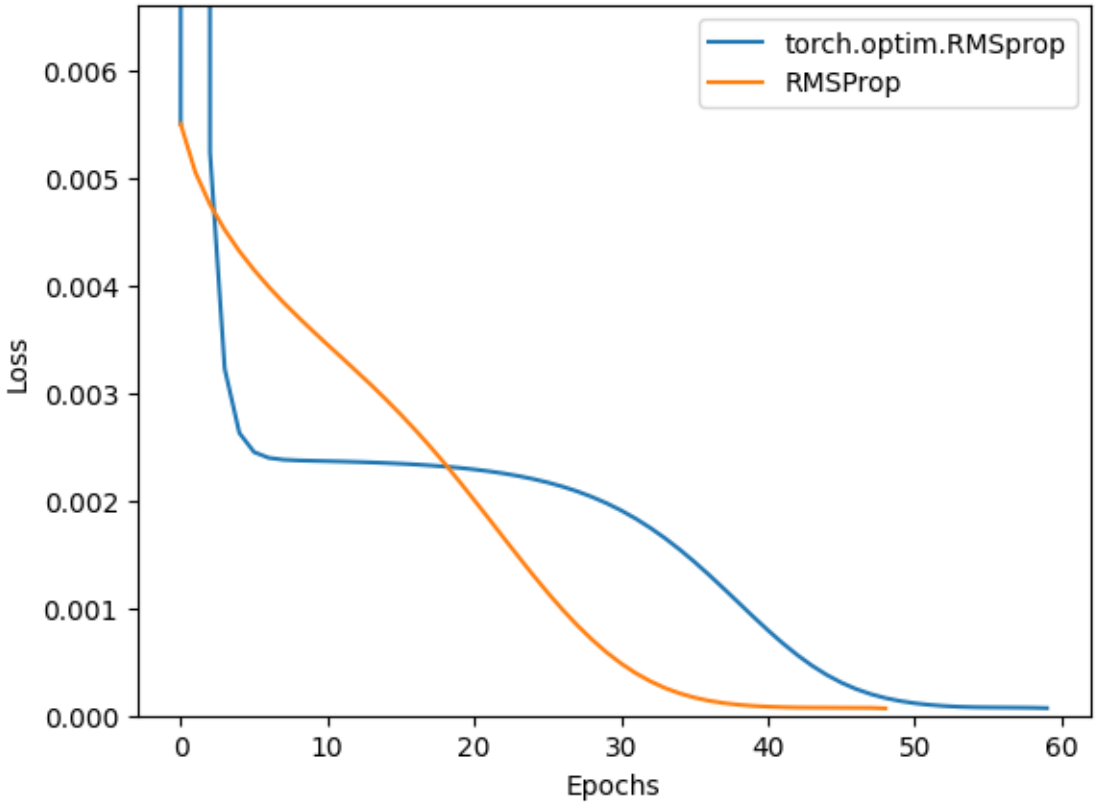
RMSProp vs. `torch.optim.RMSProp`

А вот мы и добрались до того самого момента, когда самописная реализация выходит победителем в межвидовой борьбе. Рассмотрим одного из двух гигантов модификаций – RMSProp. Запустим наших зверей и посмотрим на вывод в виде графика, по оси Y которой мы выставим значения функции потерь, по оси X - количество шагов до остановки алгоритма.



Implemented RMSProp vs. PyTorch's

Также, для наглядности, немного приблизимся к почти незаметной горке, ограничивая по оси Y.



Implemented RMSProp vs. PyTorch's (zoom)

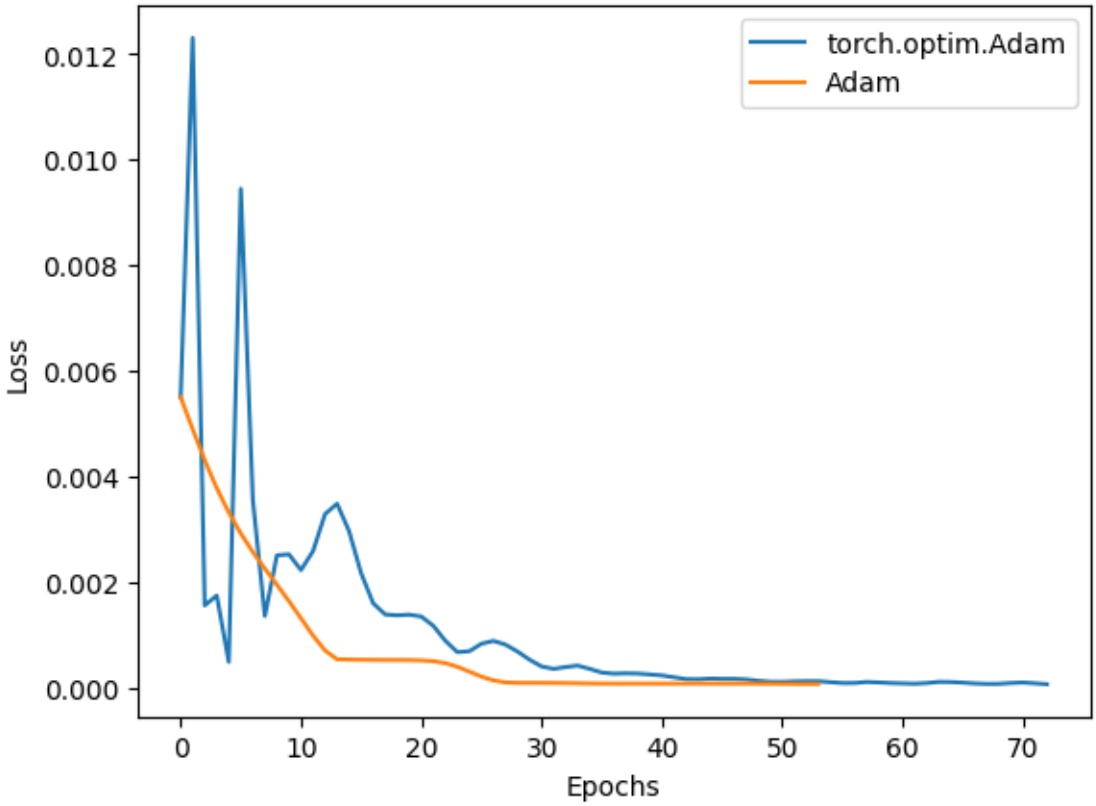
Полученные результаты соответствующие:

Испытуемый	Значение функции потерь	Среднее число шагов до схождения
Настоящие данные	0.00007481586253817499	-
`torch.optim.RMSProp`	0.00007001601600272134	60
Собственная реализация	0.00006762658137925631	49

Неожиданно, теперь в исследовании мы получаем обратную картину об общем строении мира. Дело в том, что мы все это время имели в том или ином смысле функции, которые направлены на решение более общих задач, даже для случаев, когда в функцию минимизации намеренно дают «плохой» вариант `learning_rate`, она за конечное число шагов выровняет в нормальный размер шага. Однако, посматривая на реализацию `torch.optim.RMSProp` https://pytorch.org/docs/stable/generated/torch.optim.RMSprop.html, мы понимаем, что есть некоторые параметры, которые оказались никоим образом не тронутые в исследовании и возможно они бы уменьшили число шагов до или даже меньше собственной реализации. С другой стороны, поскольку предоставленные значения все же являются усредненными, мы можем предположить, что та δ-разница между средним числом шагов своей реализации и библиотечной, является константной и никуда не меняется (следовательно, если бы мы немного изменили начальный шаг, мы бы получили совершенно иные результаты).

Adam vs. `torch.optim.Adam`

Еще один гигант и еще одна жертва падения (на самом деле, не совсем) перед своей реализацией библиотечной версии. Запустим наших зверей и посмотрим на вывод в виде графика, по оси Y которой мы выставим значения функции потерь, по оси X - количество шагов до остановки алгоритма.



Implemented Adam vs. PyTorch's

Полученные результаты соответствующие:

Испытуемый	Значение функции потерь	Среднее число шагов до схождения
Настоящие данные	0.00007481586253817499	-
`torch.optim.Adam`	0.00006828866230090804	73
Собственная реализация	0.00007292588434103817	54

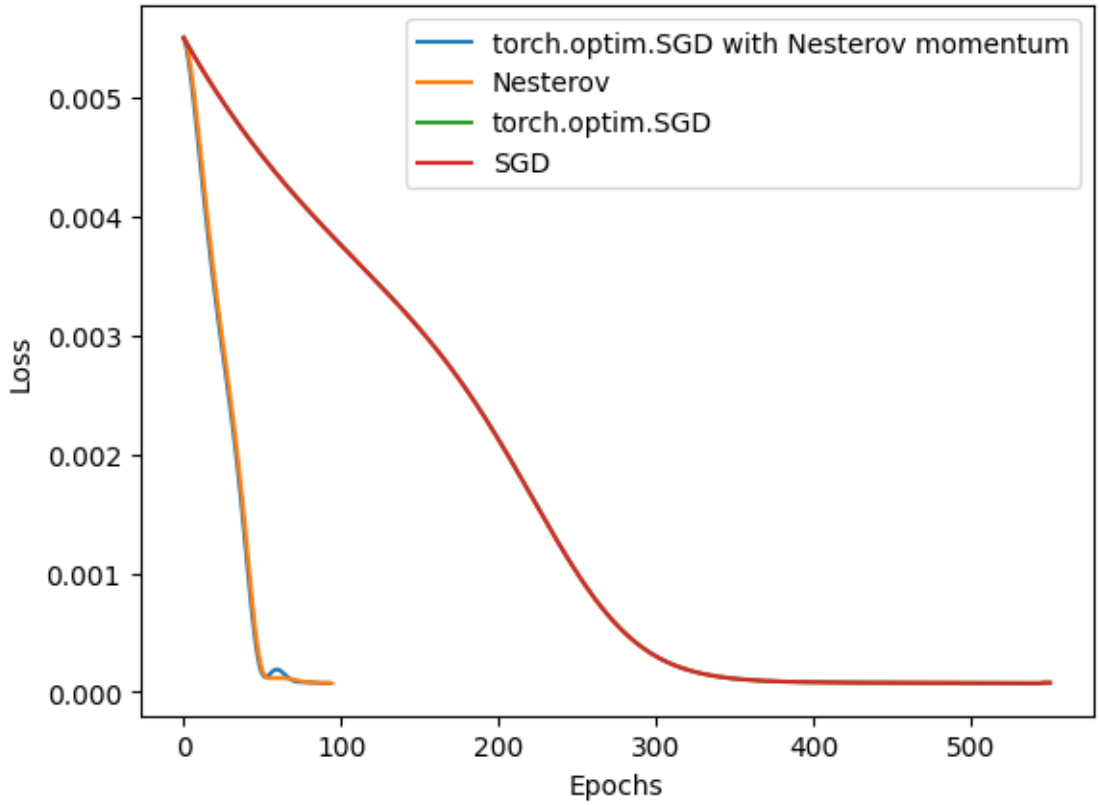
Казалось бы, свой Adam побеждает в числе шагов до вхождения, но тут мы внезапно осознаем, что не все так просто, как кажется. Дело в том, что библиотечный Adam, внезапно, оказывается куда точнее, нежели чем тем же настоящие данные и своя реализация. Это связано опять же с нашим вездесущим другом по имени `learning_rate`, если в собственная функция, вероятнее всего, по задумке изученного алгоритма, считает правильно точно, то вот новый, который по документации – https://pytorch.org/docs/stable/generated/torch.optim.Adam.html – включает в себя дополнительный, еще один, последний, `if` возвращает, очевидно, еще более точный минимум. Объяснение, почему количество шагов в реализации с нуля оказывается меньше, чем в библиотечной функции, аналогично предыдущем суждениям.

Дополнительные исследования

Дальнейшие исследования не буду включать в себя многословные попытки объяснит, что к чему, а лишь будут иметь информативные представления о том, какие функции используются и какие результаты по итогам исследования вышли. Данный блок скорее нужен только для того, чтобы увидеть разницу между методами и их работой на общей поле битвы.

Nesterov vs. SGD vs. `torch.optim.SGD` vs. `torch.optim.SGD` (`momentum`)

Рассмотрим вот такую именитую четверку двух самых простых и неинтересных, двух сражающихся за право быть наименьшим по среднему числу шагов до сходимости: SGD и `torch.optim.SGD`, Nesterov и `torch.optim.SGD` (с `momentum = True` и `nesterov = True`). Запустим наших зверей и посмотрим на вывод в виде графика, по оси Y которой мы выставим значения функции потерь, по оси X - количество шагов до остановки алгоритма.



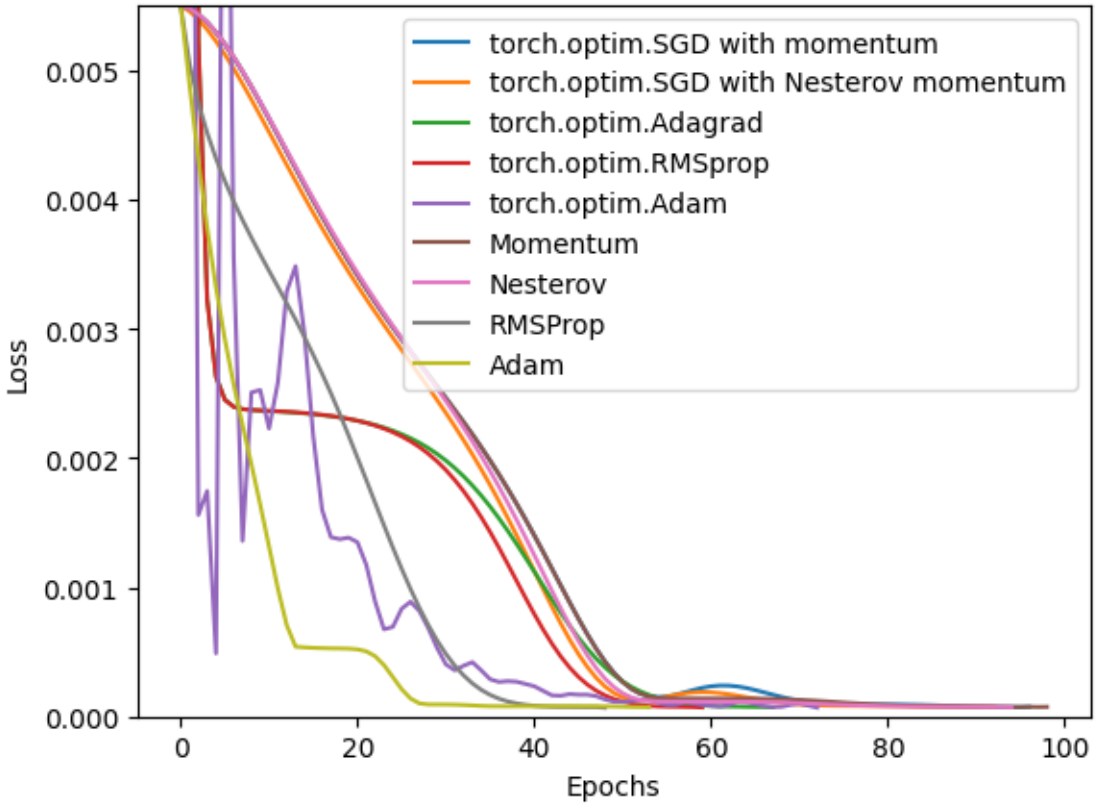
Implemented SGD and Nesterov vs. PyTorch's

Полученные результаты соответствующие:

Испытуемый	Значение функции потерь	Среднее число шагов до схождения
Настоящие данные	0.00007481586253817499	-
`nesterov = True` и ...	0.00007292588434103817	93
Свой Nesterov	0.00007271430540397701	95
`torch.optim.SGD`	0.00007753667274059714	551
Свой SGD	0.00007756952443600056	551

Хаос

А теперь выпустим всех зверей наружу кроме трех неудачников, чтобы график не выглядел слишком плохо и ужасно: SGD (свой), `torch.optim.SGD` и AdaGrad (свой).



Implemented almost everyone vs. PyTorch's

Полученные результаты соответствующие:

Испытуемый	Значение функции потерь	Среднее число шагов до схождения
Настоящие данные	0.00007481586253817499	-
`momentum = True`	0.00007458029055847868	97
`nesterov = True` и ...	0.00007412807086024441	93
`torch.optim.AdaGrad`	0.00007116629643237779	68
`torch.optim.RMSProp`	0.00007001601600272134	60
`torch.optim.Adam`	0.00006828866230090804	73
Свой Momentum	0.00007460658043034181	99
Свой Nesterov	0.00007271430540397701	95
Свой RMSProp	0.00006762658137925631	49
Свой Adam	0.00007292588434103817	54

`scipy.optimize.minimize` и `scipy.optimize.least_squares`

vs. ЛР №3

Настала пара проверить эквивалентность работы алгоритмов из великой и ужасной библиотеки SciPy, в котором, в отличии от PyTorch, уже за нас, ленивых разработчиков, сделано в виде удобных функций с бесконечным числом интуитивно понятных параметров. В первой части мы разберем примеры схождения BFGS и посмотрим на результаты L-BFGS, так как в идеи работы (и, в каком-то смысле, еще и реализации) он почти эквивалентен своему другу/сопернику, оптимизированному в использовании памяти. Во второй части мы проведем массовое исследование сразу на всех методах (как и с SciPy, так и с собственными реализациями) и по отдельности, так как, как мы увидим на общей картине, некоторых сильно «заносит» не туда.

vs. `scipy.optimize.minimize`

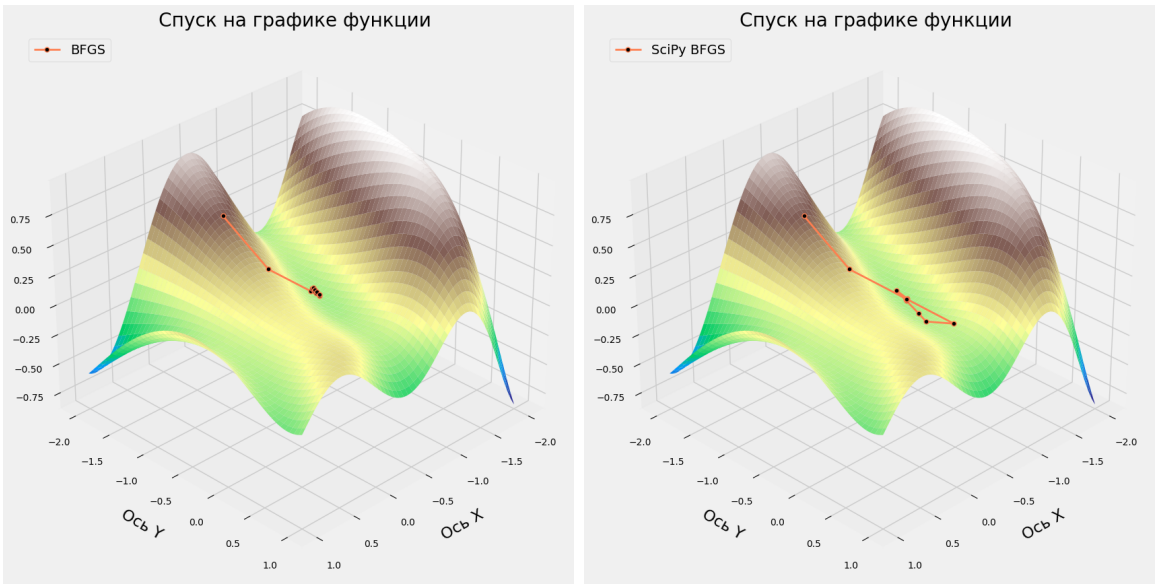
BFGS Начнем с BFGS или, как его еще называют в SciPy, `scipy.optimize.minimize(method='BFGS')`. Исследуем безымянную функцию $f : \mathbb{R} \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, определенную следующим образом:

$$f(x, y) = \sin\left(\frac{1}{2} \cdot x^2 - \frac{1}{4} \cdot y^2 + 3\right) \cdot \cos\left(2 \cdot x + 1 - e^y\right)$$

В качестве исходного приближения положим точку $\langle x_0, y_0 \rangle = \langle -0.3, -1.4 \rangle$. Также, в качестве дополнительных параметров для работы алгоритмов мы положим следующие:

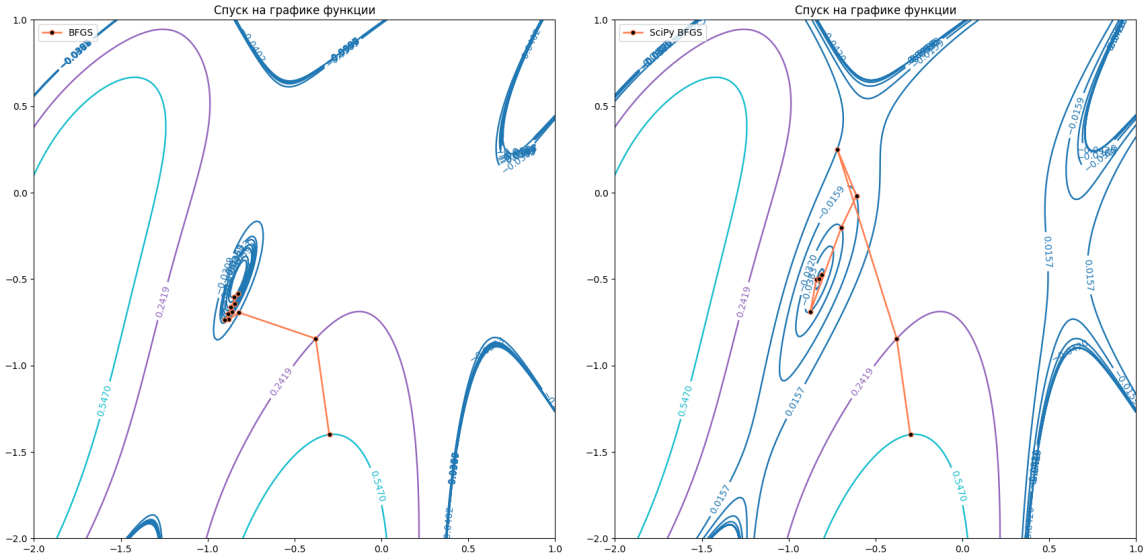
$$\texttt{max\_iter} = 10 \text{ (максимальное количество шагов)}$$
$$\varepsilon = 0.000000001 \text{ (условие сходимости)}$$

Запустим наших зверей на бедную функцию и посмотрим на вывод путей в трехмерном виде:



BFGS vs. SciPy's on first function

Как мы видим, собственная реализация, которая слева, первыми несколькими уверенными шагами почти доходит минимума, а затем начинает «топтаться» на месте в надежде на то, что он найдет самый-самый из минимумов. А с библиотечной реализацией чуть поинтереснее: он делает первые несколько шагов немного в сторону, но затем, сбавляя скорость (уменьшая размер шага), доходит и заканчивает свой алгоритм, из-за условия сходимости. Более наглядно можно разглядеть путь соперников в виде линий уровней:



BFGS vs. SciPy's on first function (levels)

Наконец, посмотрим на полученные результаты работы в виде таблицы:

Испытуемый	Количество шагов	$\langle x, y \rangle$	z
Собственная реализация	11	$\langle -0.848456, -0.605206 \rangle$	-0.040723
SciPy	11	$\langle -0.822922, -0.499418 \rangle$	-0.041983

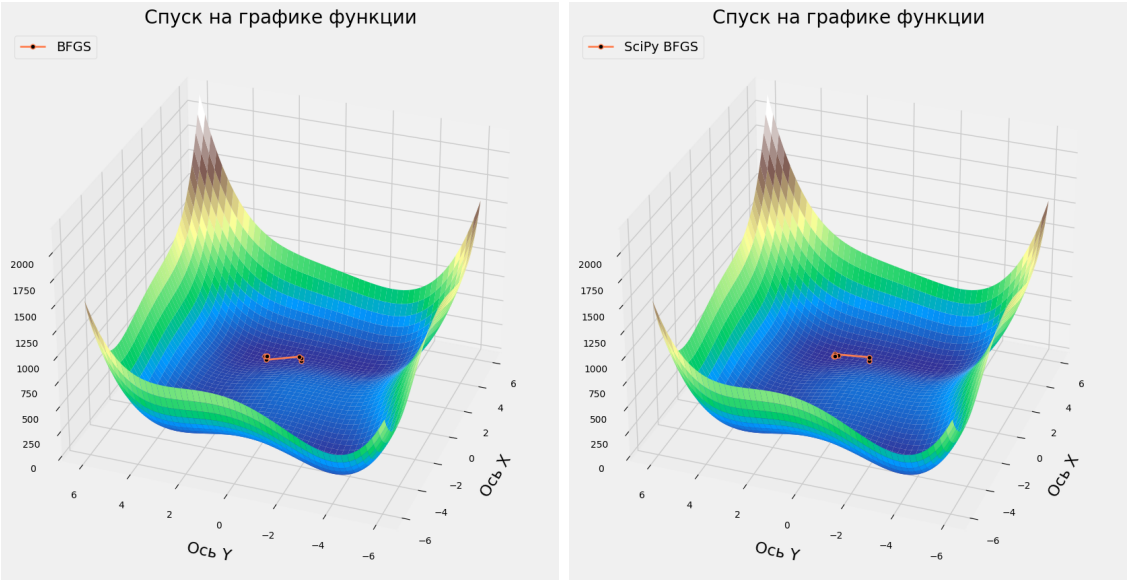
Теперь рассмотрим немного другую функцию, а именно – Химмельблау, у которого, как мы знаем, есть четыре эквивалентных минимума и определена она так:

$$f(x, y) = \left(x^2 + y - 11\right)^2 + (x + y^2 - 7)^2$$

Поставим здесь немного другие параметры на запуск алгоритмов:

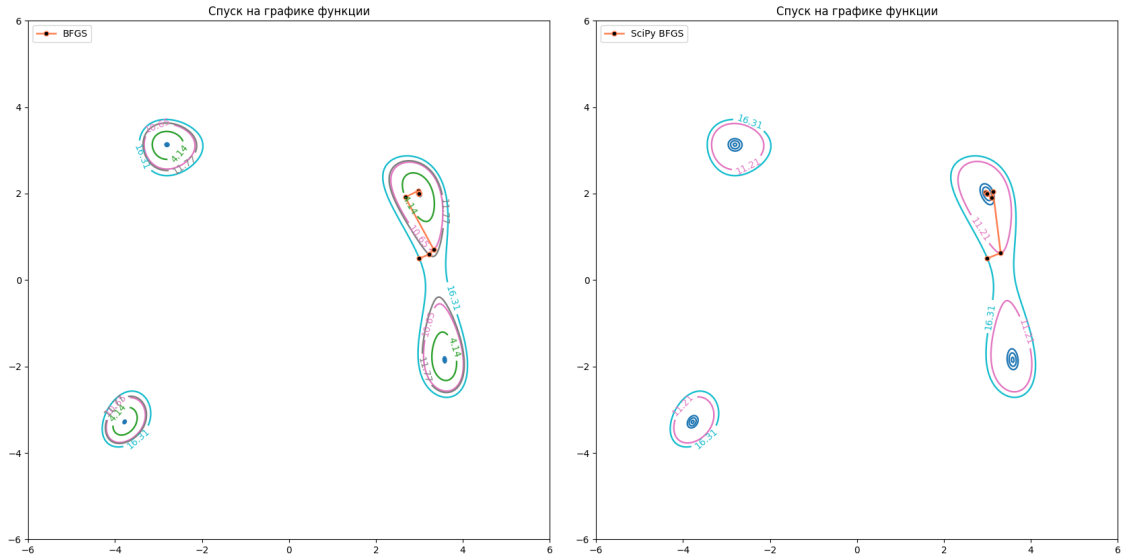
$$\langle x_0, y_0 \rangle = \langle 3.0, 0.5 \rangle \text{ (начальное приближение)}$$
$$\texttt{max\_iter} = 13 \text{ (максимальное количество шагов)}$$

Запустим наших зверей на бедную функцию и посмотрим на вывод путей в трехмерном виде:



BFGS vs. SciPy's on second function

А вот здесь своя реализация, которая опять же слева, начинает проигрывать библиотеке. Заметим, что с начальной позиции алгоритм начал неестественно себя вести и делать, внезапно, слишком малые шаги до тех пор, пока не понял, что он не прав. Это связано с тем, что исходная точка лежит примерно в окрестности локального минимума относительно одной из четырех настоящих. При этом заметим, что написанный вариант вручную упирается в количество данных ему шагов. Библиотечная же реализация не ошибается и сразу делает уверенный шаг к предполагаемой точке, а в следующие еще несколько итераций приближает минимум к самому-самому. Более наглядно можно разглядеть путь соперников в виде линий уровней:

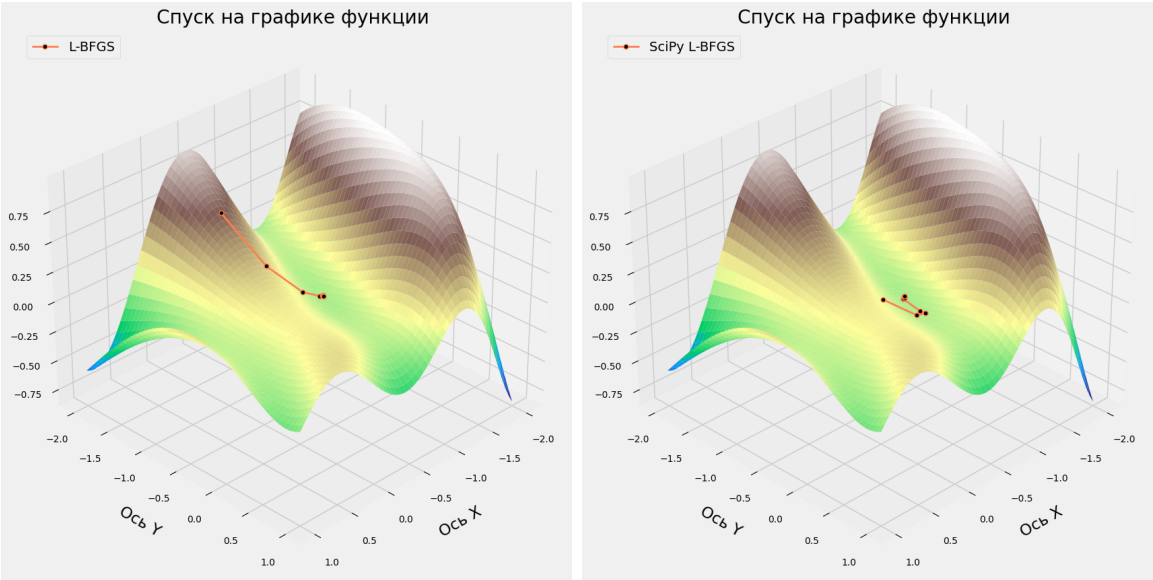


BFGS vs. SciPy's on second function (levels)

Наконец, посмотрим на полученные результаты работы в виде таблицы:

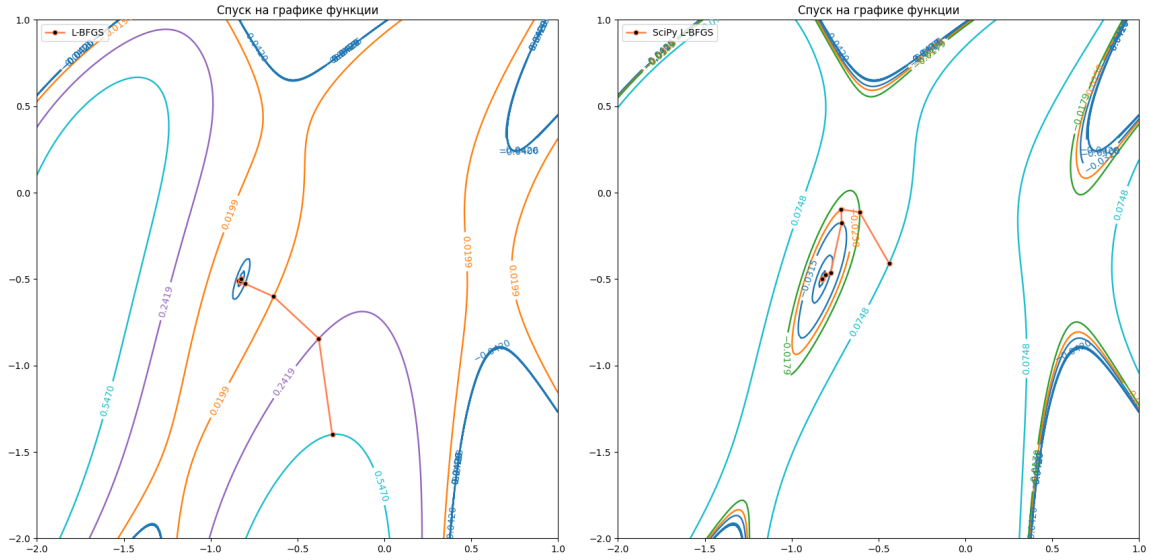
Испытуемый	Количество шагов	$\langle x, y \rangle$	z
Собственная реализация	14	$\langle 3.000000, 2.000000 \rangle$	0.000000
SciPy	10	$\langle 3.000000, 2.000000 \rangle$	0.000000

L-BFGS В этой части мы просто обозначим и вспомним, что столь не очевидная модификация, именуемая как L-BFGS, существует и пользуется популярностью, чем его предшественник. Функции и параметры мы возьмем теми же, поэтому, не будем на этом останавливаться и сразу выдадим результаты. Пути сходимости по первой функции:



L-BFGS vs. SciPy's on first function

Линии уровней путей сходимости по первой функции:

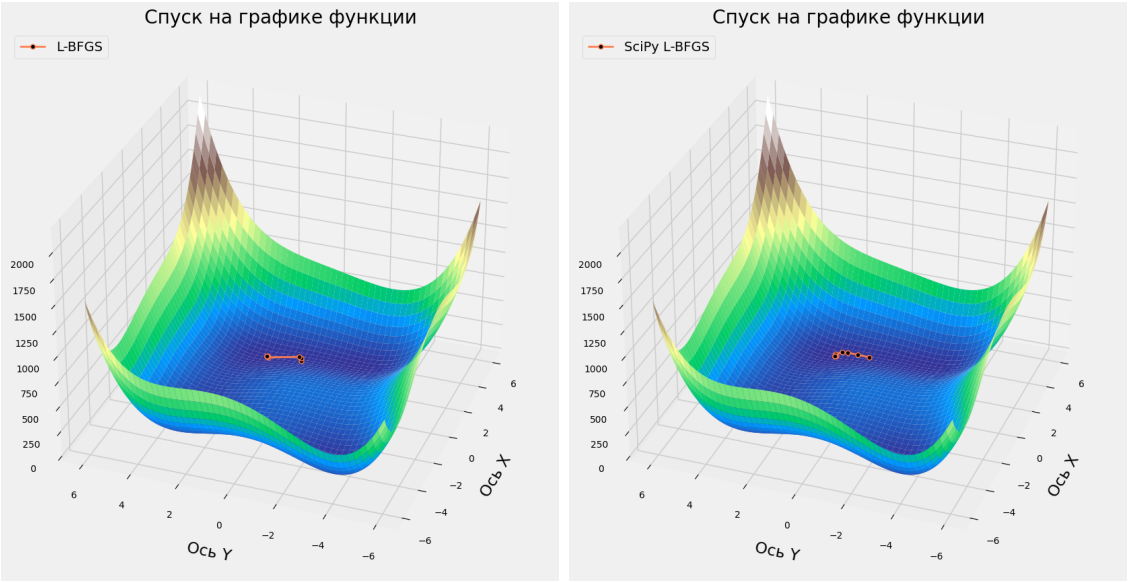


L-BFGS vs. SciPy's on first function (levels)

Данные, полученные после схождения:

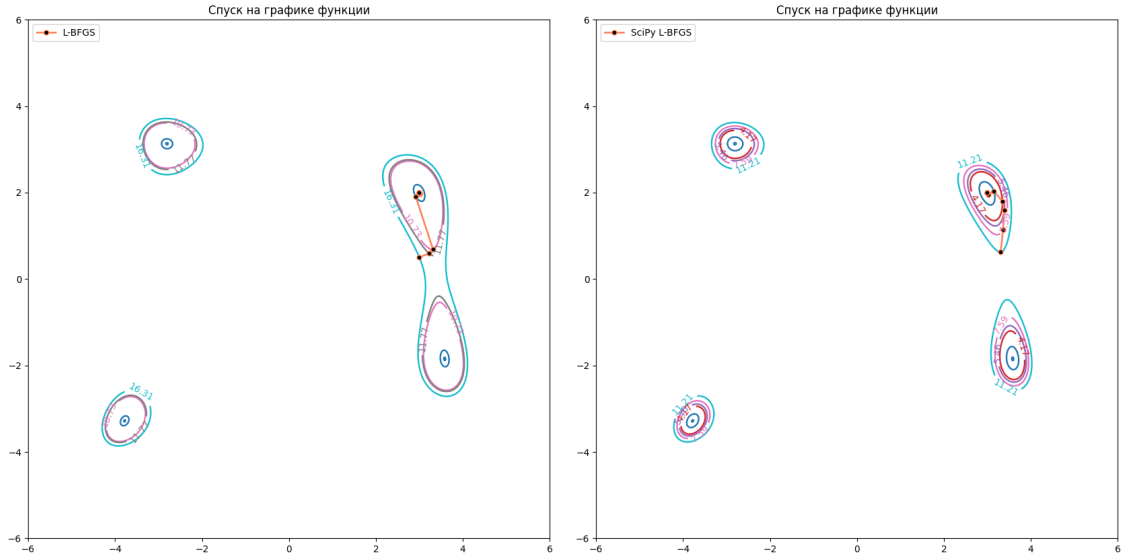
Испытуемый	Количество шагов	$\langle x, y \rangle$	z
Собственная реализация	10	$\langle -0.822934, -0.499453 \rangle$	-0.041983
SciPy	8	$\langle -0.822922, -0.499418 \rangle$	-0.041983

Теперь перейдем к второй функции. Пути сходимости алгоритмов:



L-BFGS vs. SciPy's on second function

Линии уровней путей сходимости:



L-BFGS vs. SciPy's on first function (levels)

Наконец, полученные после схождения данные:

Испытуемый	Количество шагов	$\langle x, y \rangle$	z
Собственная реализация	11	$\langle 3.000000, 2.000000 \rangle$	0.000000
SciPy	9	$\langle 3.000000, 2.000000 \rangle$	0.000000

vs. `scipy.optimize.least_squares`

В этой части мы будем по большей части рассматривать массовые исследования использования и сходимости тех или иных методов в нелинейных задачах наименьших квадратов с ограничениями на переменные. Среди некоторого множества методов, предложенные в функции `scipy.optimize.least_squares`, мы рассмотрим лишь два из них:

- ▷ `trf`, или обрезка и регуляризация Тихонова. Здесь применяется обрезка невязки и регуляризация для улучшения устойчивости оптимизации. Обычно такой метод применим к задачам к внезапным выбросам данных, что нам важно, ведь у нас случайные данные относительно некоторой заданной кривой (необязательно представимой в виде полинома конечной степени).
- ▷ `dogbox`. По сути, это смесь из методов известного там Powell Dog Leg, но имеет место быть в задачах про ограничения на переменные. Работает, как мы увидим дальше, хорошо для задач с нелинейными ограничениями на переменные.

В качестве исследуемой функции мы возьмем разложение функции сигнала в Фурье с некоторыми заранее заданными коэффициентами (звучит страшно, выглядит не менее ужасно):

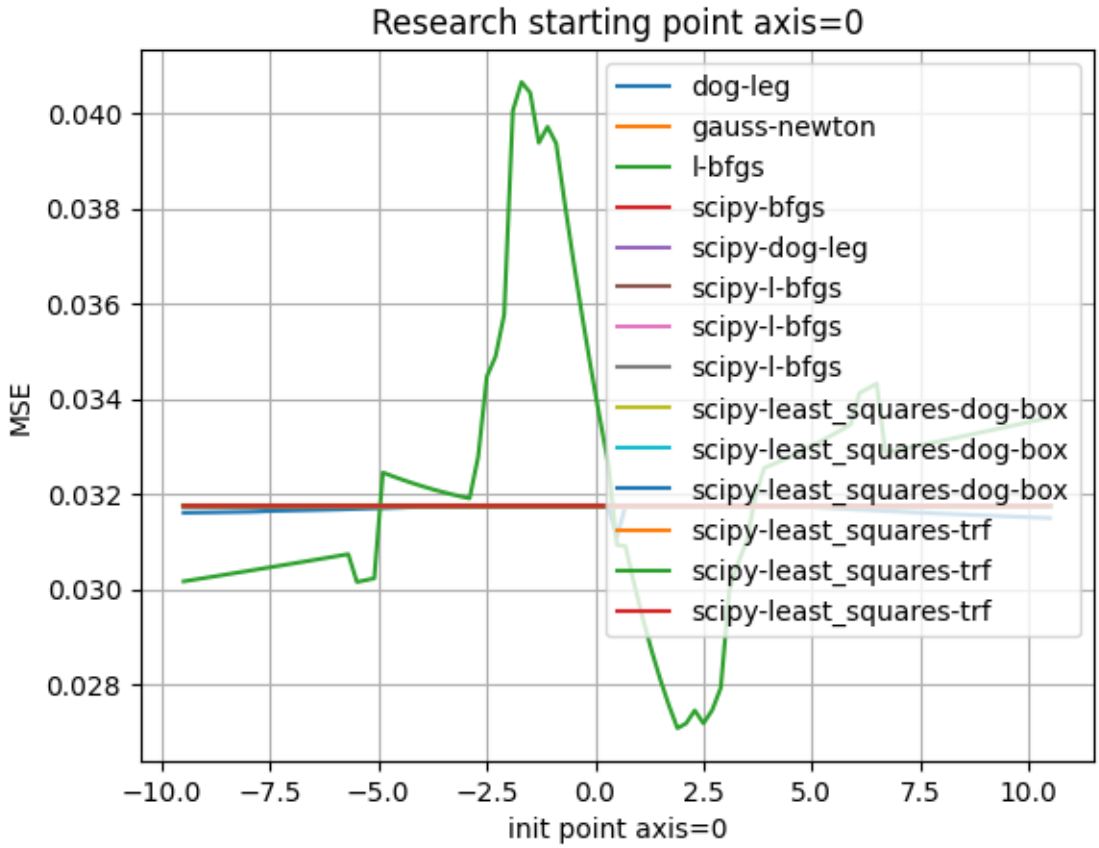
$$\begin{aligned} f(x, w) &= 1 + w_0 \cdot \cos(2 \cdot \pi \cdot x) + w_1 \cdot \sin(2 \cdot \pi \cdot x) \\ &= \frac{1}{2} \cdot \cos(4 \cdot \pi \cdot x) + \frac{1}{10} \cdot \sin(4 \cdot \pi \cdot x), \end{aligned}$$

где $w_0 = \dfrac{1}{2}$ и $w_1 = \dfrac{3}{10}$ – те самые параметры, по которым будут сходиться наши методы. Также зададим следующие параметры генерации точек и в целом всего-всего массового исследования на сходимости:

$$\begin{aligned} \texttt{density} &= 8000 \text{ (плотность генерируемых точек)} \\ \texttt{dots\_count} &= 2000 \text{ (количество генерируемых точек)} \\ \texttt{radius} &= 0.03 \text{ (радиус генерируемых точек)} \\ \texttt{dist} &= 1 \text{ (дистанция генерируемых точек относительно кривой)} \\ \texttt{test\_count} &= 15 \text{ (количество исследований на усреднение, умоляя случайность)} \end{aligned}$$

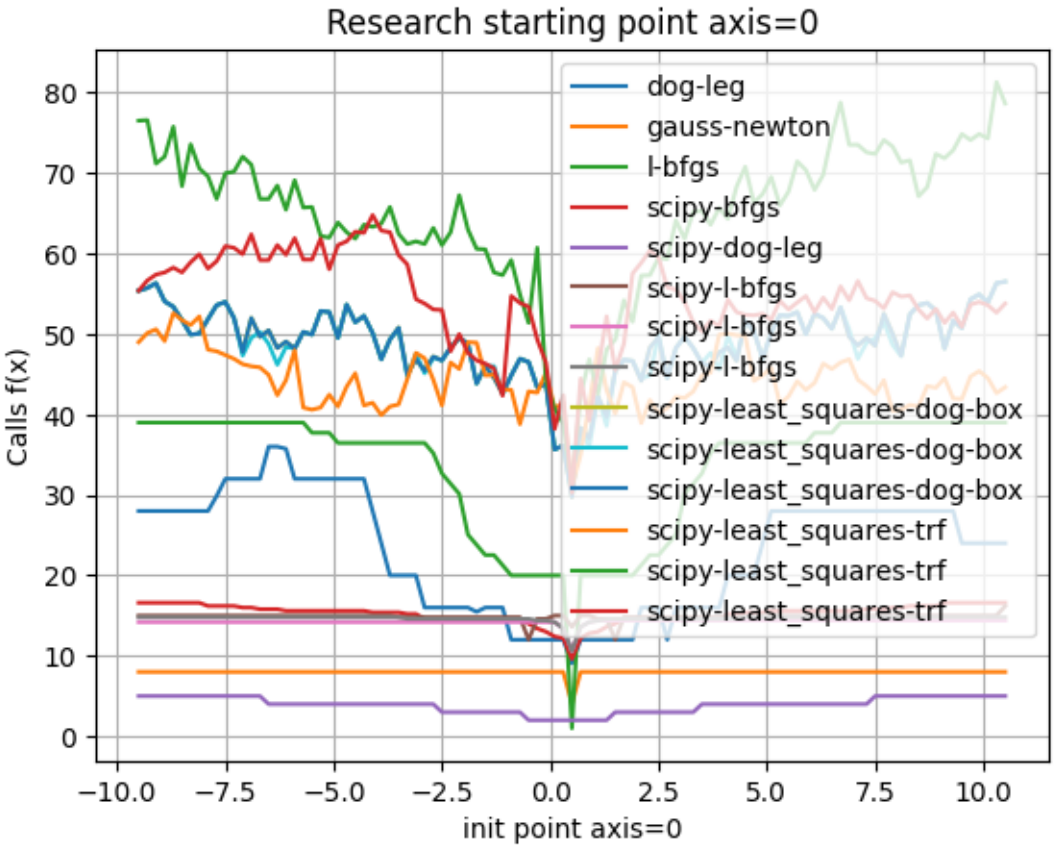
Итак, запустим наших зверей на бедную функцию, пусть они её растерзают, а мы лишь поглядим на результаты...

Посмотрим на вывод всех и сразу функций, а именно: `dog-leg`, `gauss-newton`, `l-bfgs`, `scipy-bfgs`, `scipy-lbfgs` (+ еще две разные версии ограничения), `scipy-dog-leg`, `scipy-least-squares-dog-box` (+ еще также две разные версии ограничения) и, наконец, `scipy-least-squares-trf` (+ все также с двумя различными версиями ограничений). Сами ограничения мы рассмотрим чуть ниже, а пока посмотрим на вывод графика MSE.



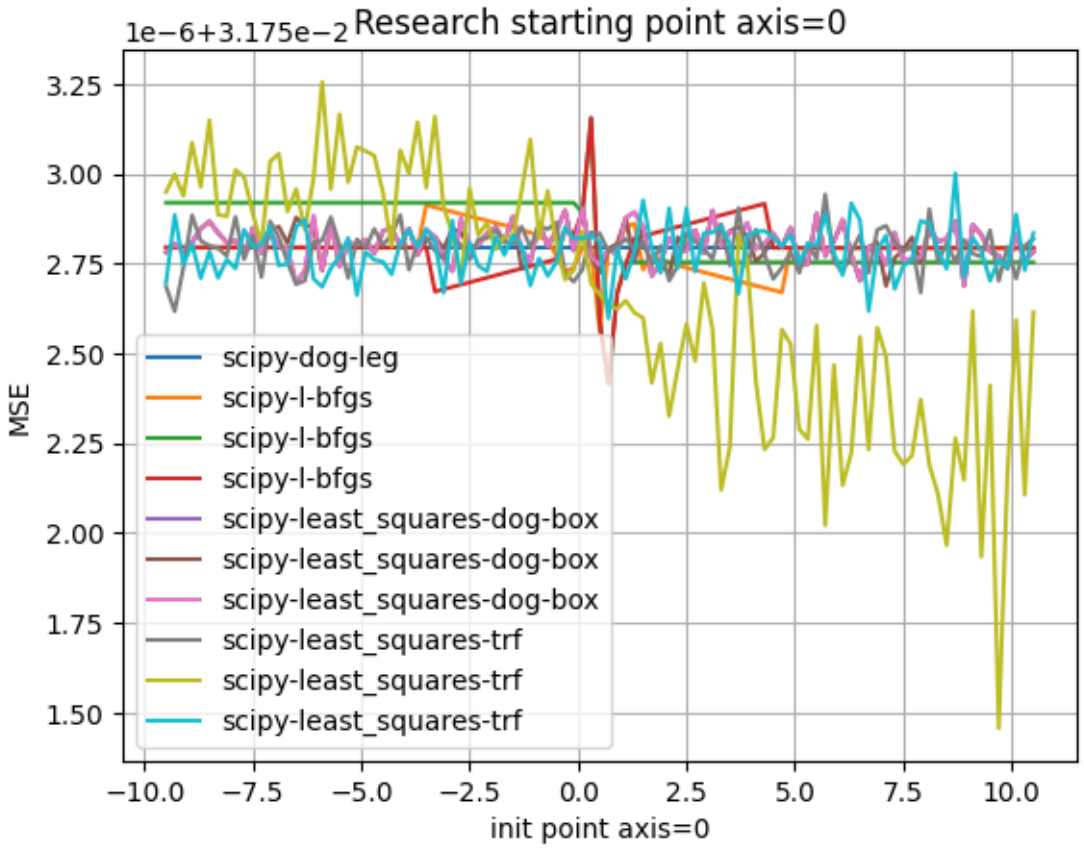
All (MSE)

Разные версии `scipy-least_squares-dog-box` и `scipy-least_squares-trf` – это те самые ограничения bound, которые будут рассмотрены чуть позже. Здесь, из-за «взрыва» неточности собственной реализации L-BFGS, мы не видим особой разницы между всеми остальными, зато видим, что примерно такая же картинка наблюдалась и в предыдущей лабораторной работе. Теперь посмотрим график на количество шагов (или вызовов функции $f(x, w)$):



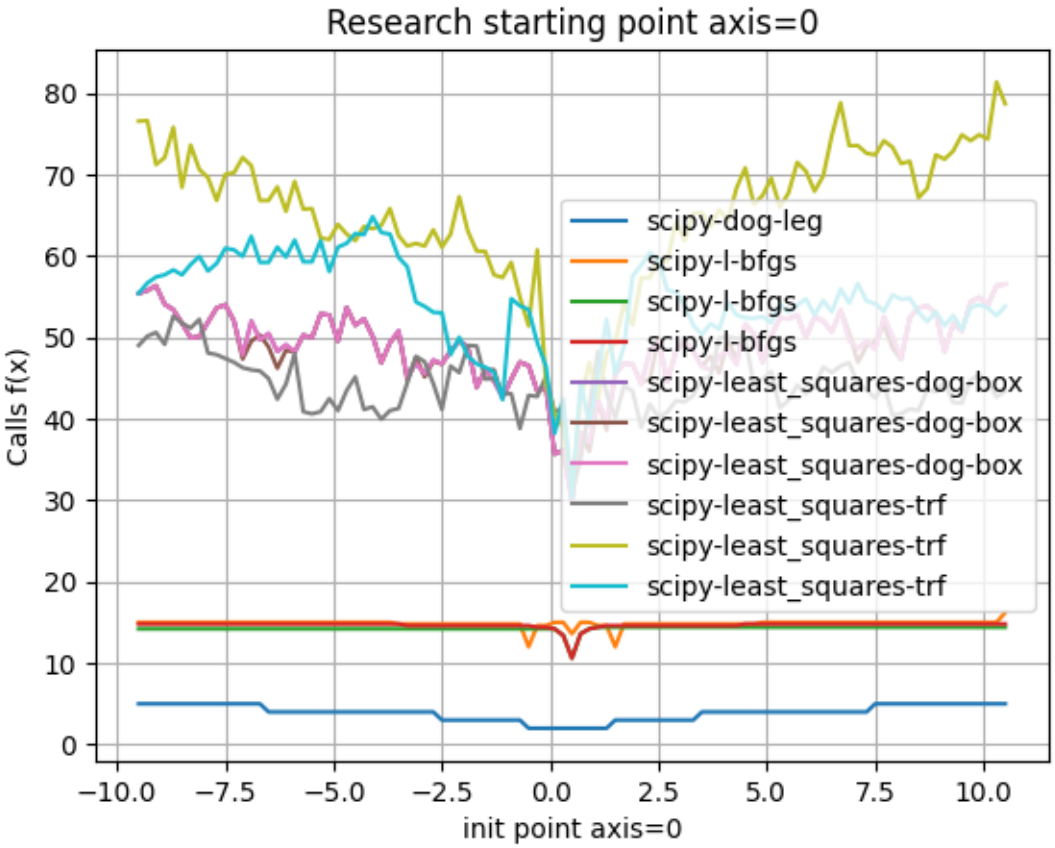
All (Calls)

График очень разношерстен: мы видим, что `gauss-newton`, как и в прошлой работе, не сильно поддается навязчивому мнению и использует столько шагов, сколько ему нужно, ввиду «лестничной» последовательности; далее `l-bfgs`, который также почти следует той же «лестнице»; а вот разница между `dog-leg`'ами довольно-таки печальна: вероятнее всего проблема в установленных изначально значениях, которые не дают собственной реализации реализовать себя и показать с хорошей стороны. Про всех остальных сложно сказать однозначно, что происходит, мы лучше дальше посмотрим те же графики, только без «взрывоопасных» `l-bfgs`, `scipy-bfgs`, `dog-leg` и уберем, чтобы не мешалось, `gauss-newton`, хотя он отработал достойно. Посмотрим на вывод графика MSE:



Not all (MSE)

Наконец, мы видим четкую разницу работы точного совпадения с реальными данными на разных методах. `scipy-least_squares-trf` (с золото-подобным цветом) с ограничением с нуля, либо с единицы до начальной показал себя лучше всех с положительным шагом от настоящего минимума, с отрицательным, соответственно, хуже. Все остальные работают плюс-минус одинаково. Интересен, например, `scipy-l-bfgs` (зеленый) с ограничением в заданном диапазоне $[0, 1]$: он *не ругается* и при этом, если он задан именно на таких границах, он лучше сходится, чем почти кто-либо другой (см. ниже еще один график). И обратная ситуация с `scipy-l-bfgs` (бордовый) с ограничением уже в $[-50, 50]$: мы дали ему больше простора, где он определен и стал он хуже работать, чем предыдущий. Наконец, посмотрим график на количество шагов:



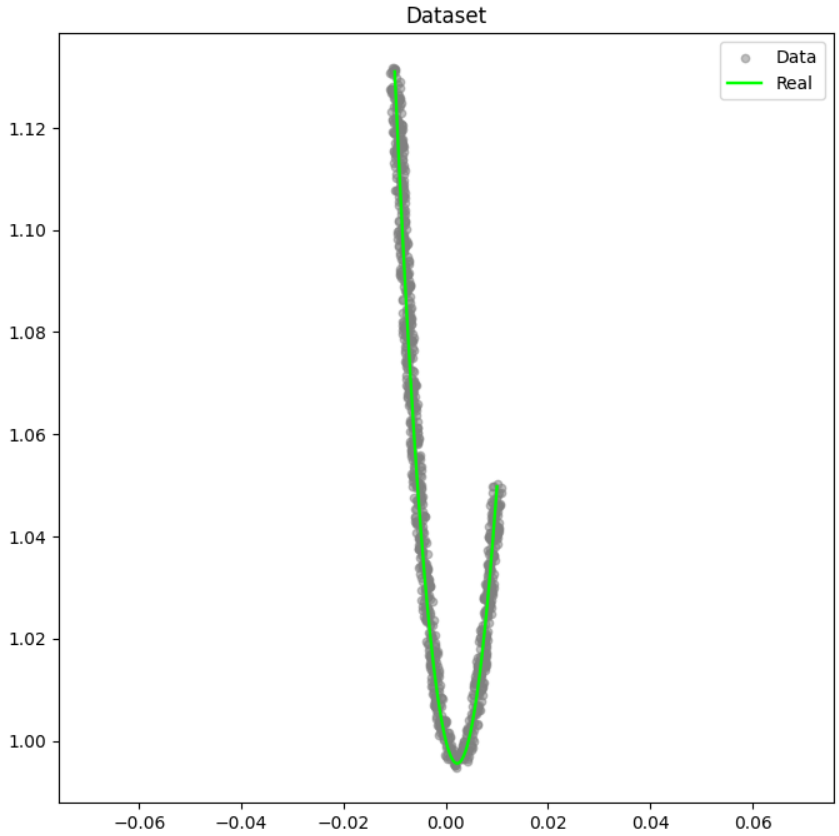
Not all (Calls)

Ситуация здесь аналогична предыдущему случаю (когда рассматривались все-все функции на одной плоскости). Разве что мы здесь четко видим, что все версии, со различными ограничениями, `scipy-l-bfgs` сработали почти всегда с каким-то адекватным число шагов, что ни может не радовать.

Градиентный спуск PyTorch

Итак, поймем, что мы хотим от любого спуска к минимуму: чтобы градиент, который является неотъемлемой частью почти любого известного нам алгоритма минимизации значения, был более менее правдоподобен. Но здесь мы встречаемся лицом к лицу с проблемой, связанной с возможностями нашей системы и математики: мы не можем бесконечно долго манипулировать и что-либо другого делать с не целочисленным типами данных, они буду всё хуже и хуже деградировать от одной математической операции к другой. Поэтому, мы ставим задачу получить как можно лучший градиент и значение в этой точке более точно.

Для примера мы рассмотрим функцию Розенброка и три метода получения градиента: из библиотеки `torch`, из `numdifftool`, и методом «по определению» в буквальном смысле. В качестве функции минимизации мы возьмем модификацию стохастического градиентного спуска Adam (из коллекции собственных реализаций), в качестве начальной точки $\langle p_{x_0}, p_{y_0} \rangle \leftarrow \langle -1.0, 0.1 \rangle$, для всех разных методов получения градиента мы положим в качестве начального шага `initial_w` $= 0.5$ и, наконец, сгенерируем набор данных для исследования градиентов.



Generated dataset for Rosen

Запустим наших зверей и посмотрим вот на какие результаты:

Выбранный метод градиента	Количество шагов до схождения
«По определению»	51
`torch`	51
`numdifftool`	51

Замечаем интересную находку: все использованные методы сходятся за одинаковое число шагов, умоляя общности среднего подсчета, что нам явно гарантирует, что мы можем использовать любой из них и, при любом раскладе, выиграть. Теперь же мы посмотрим на разницу отношения текущей приближенной точки алгоритма и её градиента для всех трех методов. Зададим в качестве обозначений $\langle p_x, p_y \rangle$ - точка, $\langle t_x, t_y \rangle$ - градиент из `torch`, $\langle n_x, n_y \rangle$ - градиент из `numdifftool` и $\langle d_x, d_y \rangle$ - градиент по определению. Полученные результаты для `torch`, здесь и далее будут выведены первые и последние четыре измерения.:

$\langle p_x, p_y \rangle$	$\langle t_x, t_y \rangle$
$\langle -1.0,\ 0.1 \rangle$	$\langle -0.00146706559993418353,\ -0.00014721156217214419 \rangle$
$\langle -0.58826355,\ 0.14131537 \rangle$	$\langle -0.00131440381006264718,\ -0.00019862055015740611 \rangle$
$\langle -0.14727034,\ 0.19673504 \rangle$	$\langle -0.00115017868324561500,\ -0.00026529536789049484 \rangle$
$\langle 0.29978107,\ 0.2682456 \rangle$	$\langle -0.00098270545906175904,\ -0.00034802171851757964 \rangle$
$\vdots$	$\vdots$
$\langle 1.79226672,\ 3.02522473 \rangle$	$\langle -0.00008879931707961148,\ 0.00002868576216914081 \rangle$
$\langle 1.81834509,\ 3.03876149 \rangle$	$\langle -0.00007504682716224205,\ 0.00008702729437093851 \rangle$
$\langle 1.8468342,\ 3.04139108 \rangle$	$\langle -0.00006181034719901721,\ 0.00012621921750756307 \rangle$
$\langle 1.87666167,\ 3.03296134 \rangle$	$\langle -0.00005016024349737770,\ 0.00013933684458654905 \rangle$

Полученные результаты для `numdifftool`:

$\langle p_x, p_y \rangle$	$\langle n_x, n_y \rangle$
$\langle -1.0,\ 0.1 \rangle$	$\langle -0.00146706559993418201,\ -0.00014721156217214299 \rangle$
$\langle -0.58826355,\ 0.14131537 \rangle$	$\langle -0.00131440381006265347,\ -0.00019862055015741075 \rangle$
$\langle -0.14727034,\ 0.19673504 \rangle$	$\langle -0.00115017868324561912,\ -0.00026529536789049452 \rangle$
$\langle 0.29978107,\ 0.2682456 \rangle$	$\langle -0.00098270545906175687,\ -0.00034802171851757129 \rangle$
$\vdots$	$\vdots$
$\langle 1.79226672,\ 3.02522473 \rangle$	$\langle -0.00008879931707961108,\ 0.00002868576216914129 \rangle$
$\langle 1.81834509,\ 3.03876149 \rangle$	$\langle -0.00007504682716224151,\ 0.00008702729437093872 \rangle$
$\langle 1.84683428,\ 3.04139108 \rangle$	$\langle -0.00006181034719901730,\ 0.00012621921750756380 \rangle$
$\langle 1.87666167,\ 3.03296134 \rangle$	$\langle -0.00005016024349737770,\ 0.00013933684458654840 \rangle$

Полученные результаты для собственного градиента:

$\langle p_x, p_y \rangle$	$\langle d_x, d_y \rangle$
$\langle -1.0,\ 0.1 \rangle$	$\langle -0.00146706560007897613,\ -0.00014721156195093843 \rangle$
$\langle -0.58826355,\ 0.14131537 \rangle$	$\langle -0.00131440380931810430,\ -0.00019862055056218964 \rangle$
$\langle -0.14727034,\ 0.19673504 \rangle$	$\langle -0.00115017868319855499,\ -0.00026529536813896248 \rangle$
$\langle 0.29978107,\ 0.2682456 \rangle$	$\langle -0.00098270545867418235,\ -0.00034802171864842246 \rangle$
$\vdots$	$\vdots$
$\langle 1.79226672,\ 3.02522473 \rangle$	$\langle -0.00008879931708840553,\ 0.00002868576212612835 \rangle$
$\langle 1.81834509,\ 3.03876149 \rangle$	$\langle -0.00007504682706977080,\ 0.00008702729432008473 \rangle$
$\langle 1.84683428,\ 3.04139108 \rangle$	$\langle -0.00006181034720512124,\ 0.00012621921753218010 \rangle$
$\langle 1.87666167,\ 3.03296134 \rangle$	$\langle -0.00005016024348539292,\ 0.00013933684456614911 \rangle$

Эксперименты с SciPy

Впервые мы будем работать только с библиотекой SciPy и будем проводить на ней некоторые опыты, а именно мы хотим понять, а как ограничение, которое уже было использовано в пункте (a) этого задания, влияет на работу самих методов. В тот раз мы смотрели на ограничение определения функции в заданном диапазоне, здесь же мы будем крутить параметр Bounds и смотреть, что да как. Для рассмотрения мы возьмем одного представителя из `scipy.optimize.minimize` и двух – `scipy.optimize.least_squares`: L-BFGS, Dog-Box (из Least Squares) и TRF (также

оттуда). В качестве исследуемой функции и генерируемого набора данных, относительно чего, мы возьмем те же параметры, что и в пункте (a), то есть, в качестве функции:

$$\begin{aligned} f(x, w) &= 1 + w_0 \cdot \cos(2 \cdot \pi \cdot x) + w_1 \cdot \sin(2 \cdot \pi \cdot x) \\ &= \frac{1}{2} \cdot \cos(4 \cdot \pi \cdot x) + \frac{1}{10} \cdot \sin(4 \cdot \pi \cdot x), \end{aligned}$$

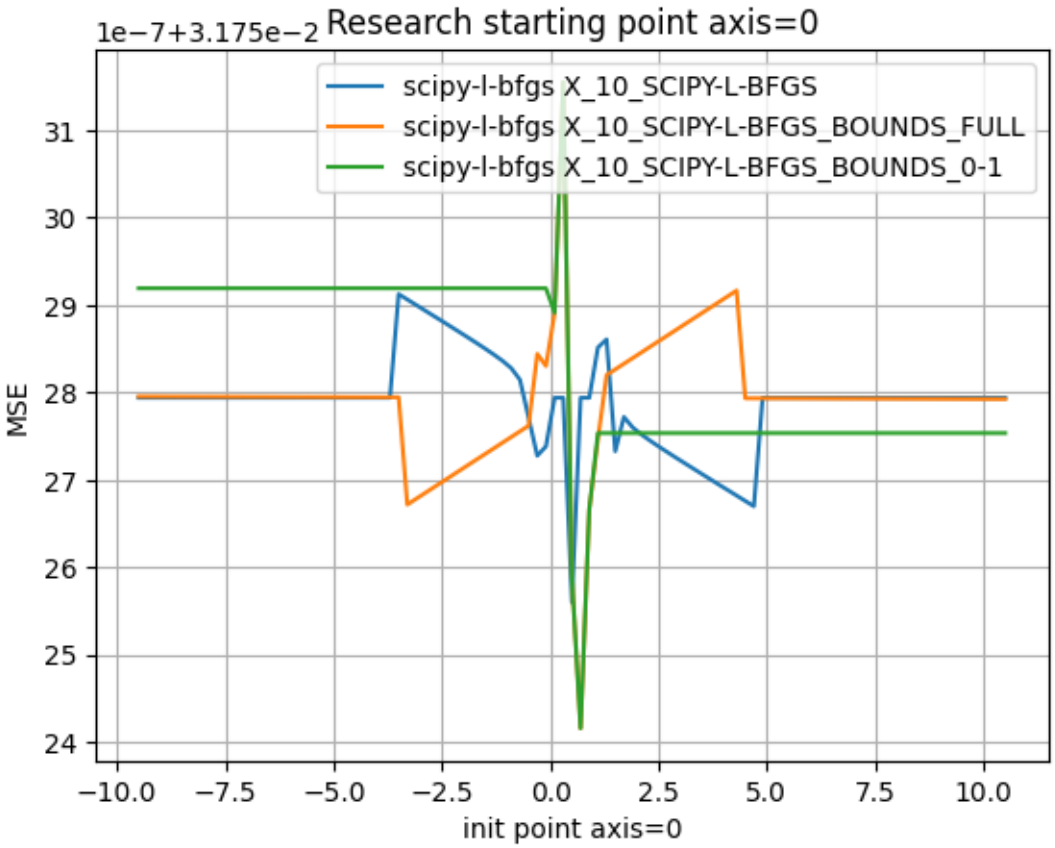
где $w_0 = \frac{1}{2}$ и $w_1 = \frac{3}{10}$; а параметры генерации точек и исследования:

$$\begin{aligned} \texttt{density} &= 8000 \text{ (плотность генерируемых точек)} \\ \texttt{dots\_count} &= 2000 \text{ (количество генерируемых точек)} \\ \texttt{radius} &= 0.03 \text{ (радиус генерируемых точек)} \\ \texttt{dist} &= 1 \text{ (дистанция генерируемых точек относительно кривой)} \\ \texttt{test\_count} &= 15 \text{ (количество исследований на усреднение, умоляя случайность)} \end{aligned}$$

Что вообще значит ограничение по параметру Bounds? *Bounds* – как и в первом пункте (a) это просто отрезок, на которой может быть определена функция. Ограничением `0-1` мы будем называть: в `scipy.optimize.minimize` – это границы определения функции в диапазоне $[0, 1]$, в `scipy.optimize.least\_squares` – отрезок от нуля, либо от единицы до начальной. Ограничение `FULL` мы будем называть границы определения функции (и в том, и в другом случае) на полном отрезке $[-50, 50]$.

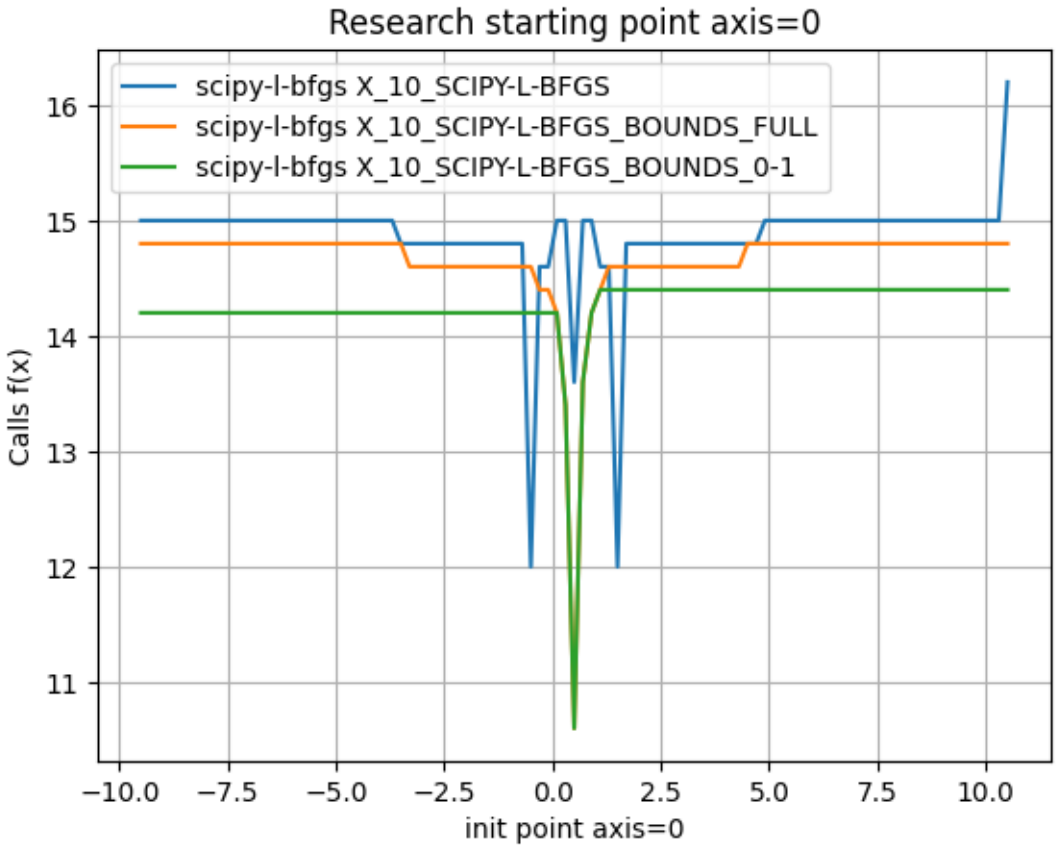
L-BFGS

Рассмотрим первого представителя из SciPy – L-BFGS. Исследуем и посмотрим на график MSE:



Bounds on L-BFGS (MSE)

Без каких-либо ограничений, кажется, рассматривать нет смысла, ибо уже и так было много раз обговорено также в предыдущей лабораторной работе. А вот, например, с `FULL` ситуация достаточно интересная: как будто, может быть нам просто повезло, но она является почти зеркальным отображением того же графика, только без ограничений. То есть, какой-либо пользы от нее, казалось бы, нету. Ограничение `0-1`, наоборот, хуже в точности, особенно, что забавно, на самом деле, наблюдать, что функция начала сильно ошибаться в точности в окрестностях настоящего минимума. А теперь посмотрим на то, сколько понадобилось шагов каждому из них, чтобы добиться такого успеха:

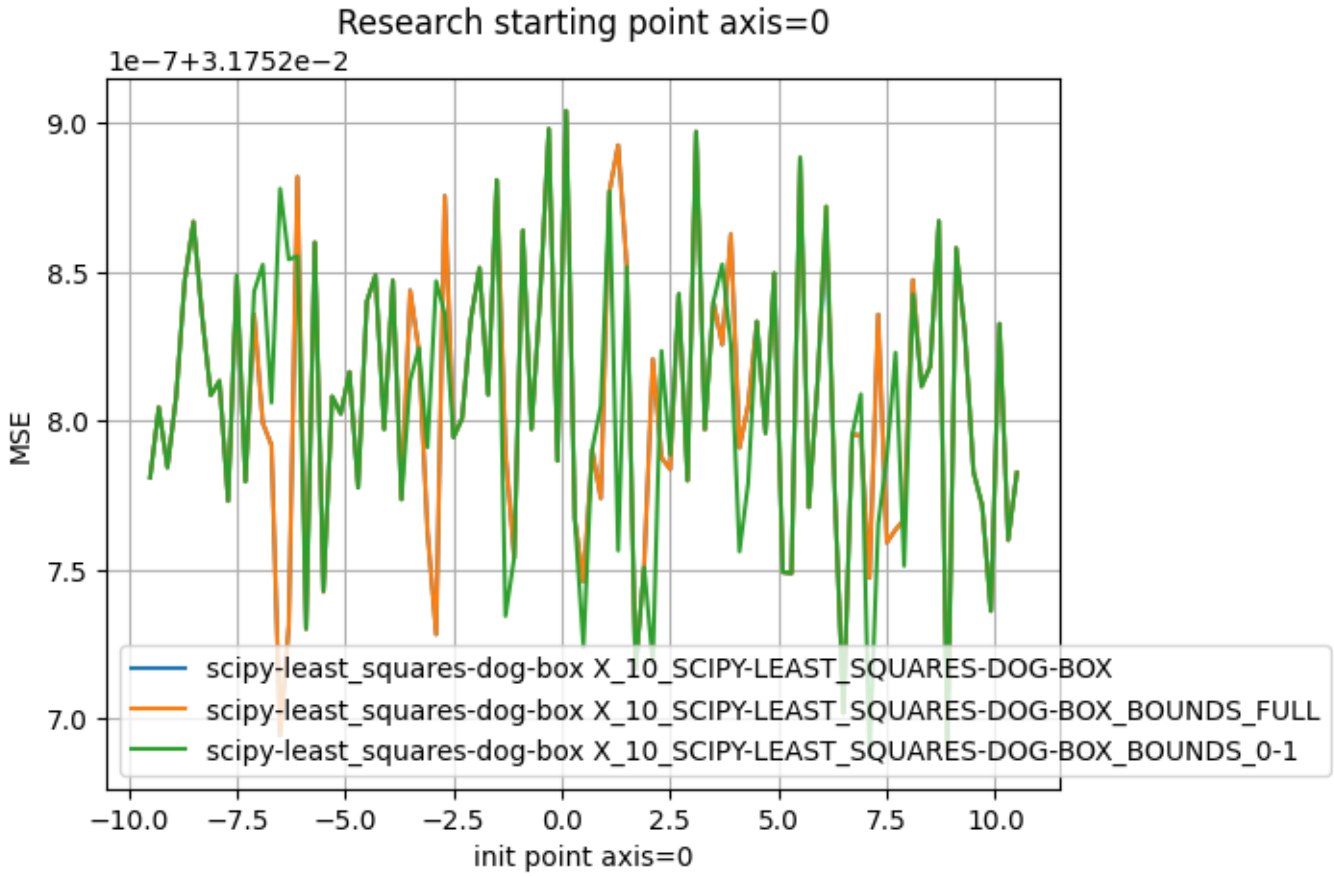


Bounds on L-BFGS (Calls)

Без ограничений имеет примерно такой же результаты, что и был получен в первом (a) пункте. `FULL` вновь выигрывает, так как ему понадобилось в среднем меньше шагов, при этом его точность, как мы помним чуть выше, почти эквивалентен настоящему результату. А вот `0-1` хоть и проиграл в точности, он, все же, сильно облегчает нагрузку на подсчет функции и во много быстрее как бы сходится (неточно, но все же).

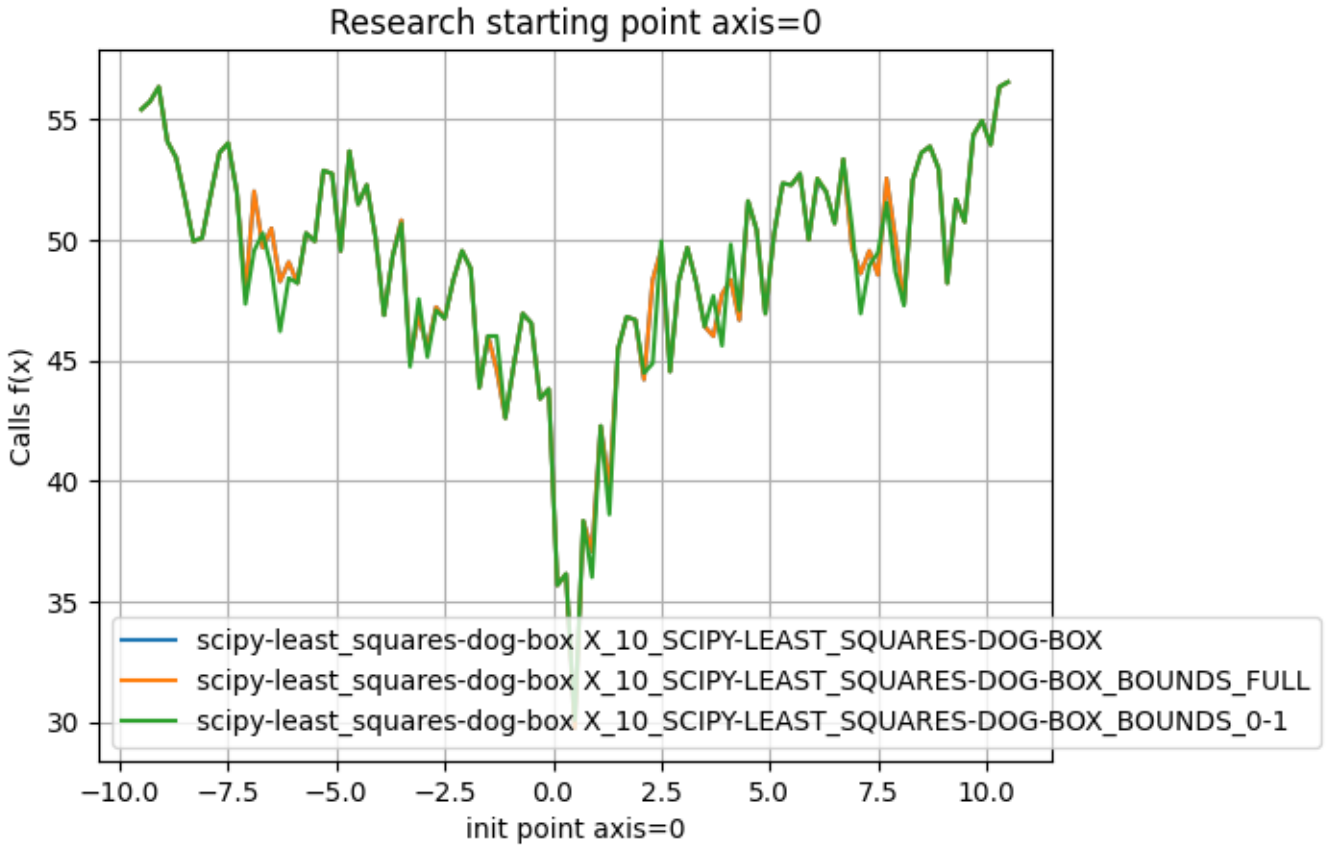
Dog Box (Least Squares)

Менее интересен случай Dog-Box, ибо, если рассматривать далее графики, мы увидим, что ограничения не сильно меняют картину мира. Убедимся в этом, рассмотрев график MSE:



Bounds on least square's Dog Box (MSE)

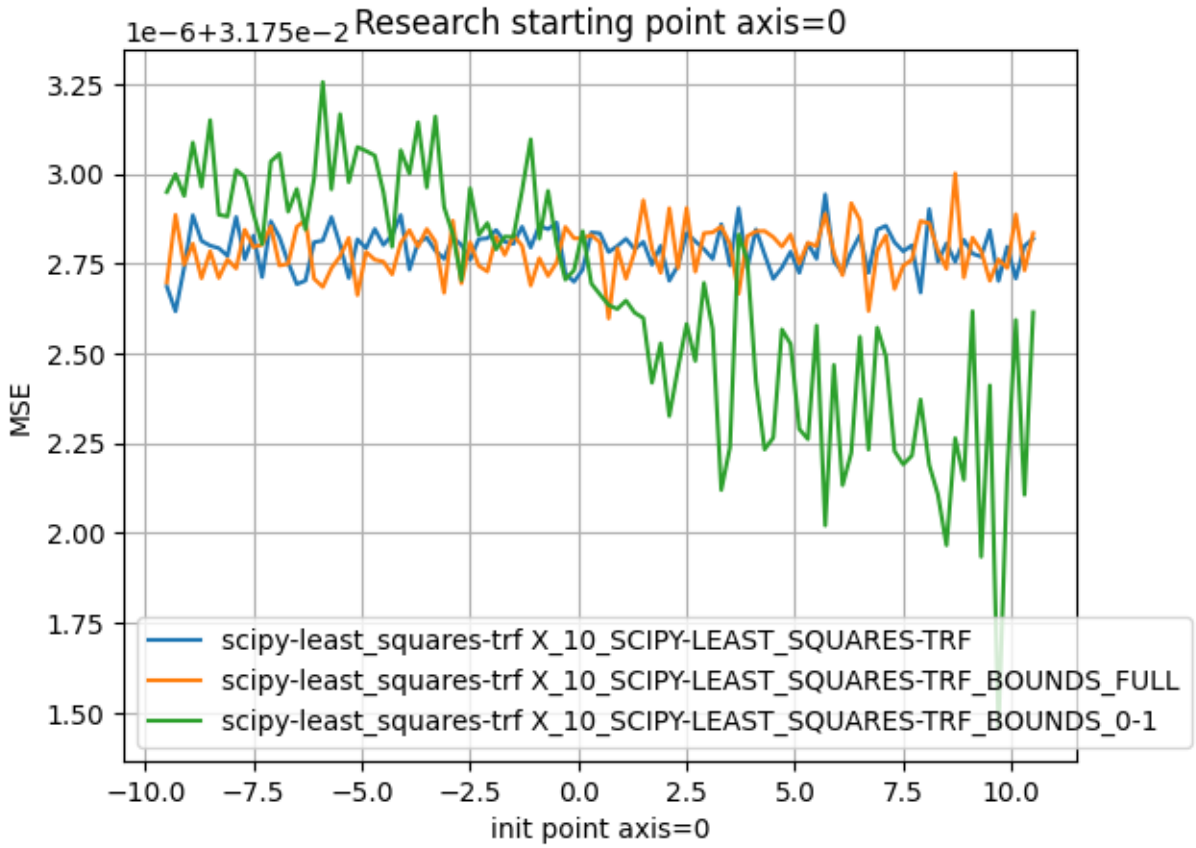
Как мы видим, хоть этого и не видно, но без ограничений и `0-1` полностью совпали, что говорит нам о том, что методу достаточно и меньший диапазон значений или ровно то, которые задали. А вот с `FULL`, внезапно, когда дают больше простора мы получаем в каких-то местах лучше, в каких-то эквивалентно и даже полностью совпадающий с предыдущему двумя по точности сходимости. По количеству шагов комментариев, как таковых не будет, так как они чуть не ли полностью совпадают (без ограничений и с `0-1` совпали):



Bounds on least square's Dog Box (Calls)

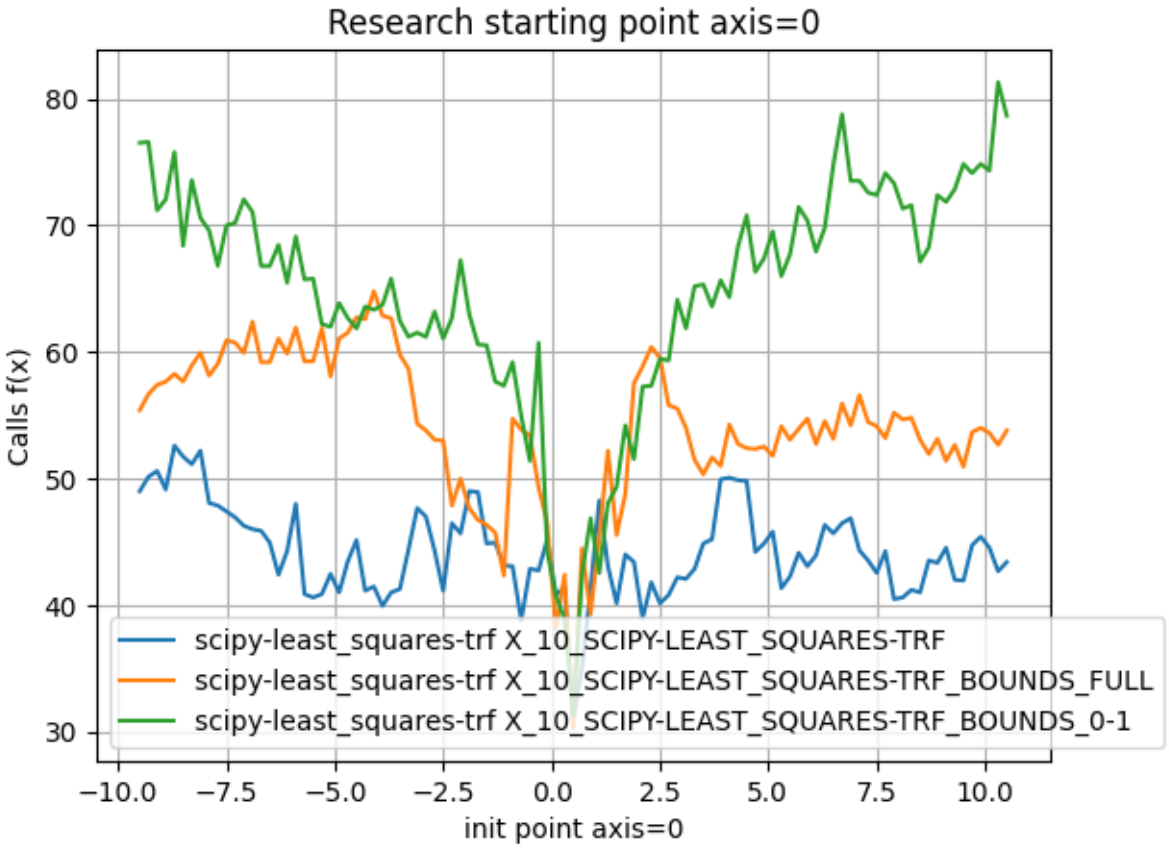
TRF (Least Squares)

Наконец, последний герой нашего вальса – TRF-метод. Посмотрим на MSE:



Bounds on least square's TRF (MSE)

В отличие от предыдущего метода мы здесь не получаем полную эквивалентность, но похожее на зеркальное отражение между без ограничений и `FULL`. С `0-1` ситуация аналогична из первого пункта (a), когда мы рассматривали всех и вся сразу. График изменения количества шагов у разных ограничений следующий, здесь ситуация аналогична также рассмотренному из первого пункта (a) задания 2:



Bounds on least square's TRF (Calls)

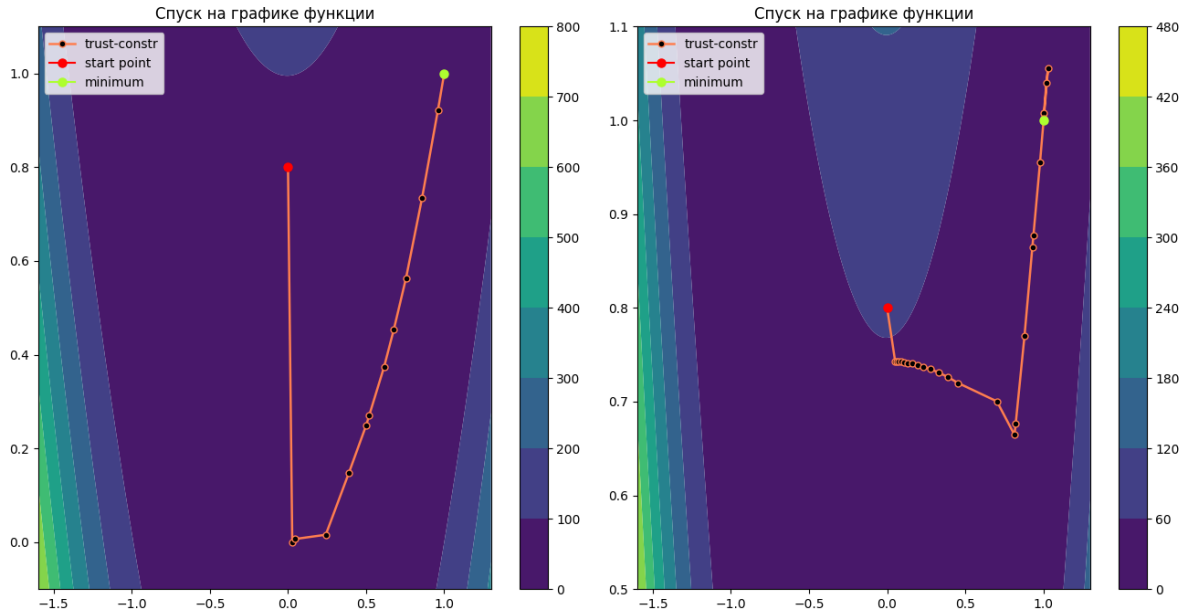
Линейные и нелинейные ограничения

Помимо всех рассмотренных ранее прелестей от библиотеки SciPy, вроде минимизации функции совершенно разными и некоторыми нерассмотренными на курсе методами или получения минимальной суммы квадратов, поддерживаются также возможности ограничения функции. Это бывает крайне полезно, когда почти-аналитически мы можем кое-что сказать про саму функцию и, возможно, таким образом, избавиться от лишнего числа хождений «не туда», куда надо. А как мы могли бы реализовать ограничения? Через запрет хождения функции. Поставим некую стену, через которую нельзя пройти, и таким образом, если наш алгоритм сделал шаг не туда, в сторону стены, то нам, пользователю, может повести, если он «отскочит» в нужную сторону, к минимуму.

Начнем с уже ни раз используемой функции Розенброка, а в качестве одного из методов, поддерживающий те или иные ограничения, возьмем `trust-constr`. Зададим начальную точку $\langle x_0, y_0 \rangle = \langle 0.0, 0.8 \rangle$, а также посмотрим сначала на нелинейное ограничение: поставим в некоторой точке центр, смещенного эллипса, заданный следующей формулой:

$$f(x, y) = \frac{(x^2)}{3} + \frac{(y^2)}{0.5} - 0.6$$

Само же ограничение будет определено на луче $[0.5, +\infty)$. Итак, посмотрим же на график без ограничений и с ними:



Rosen with no constraint and with non-linear

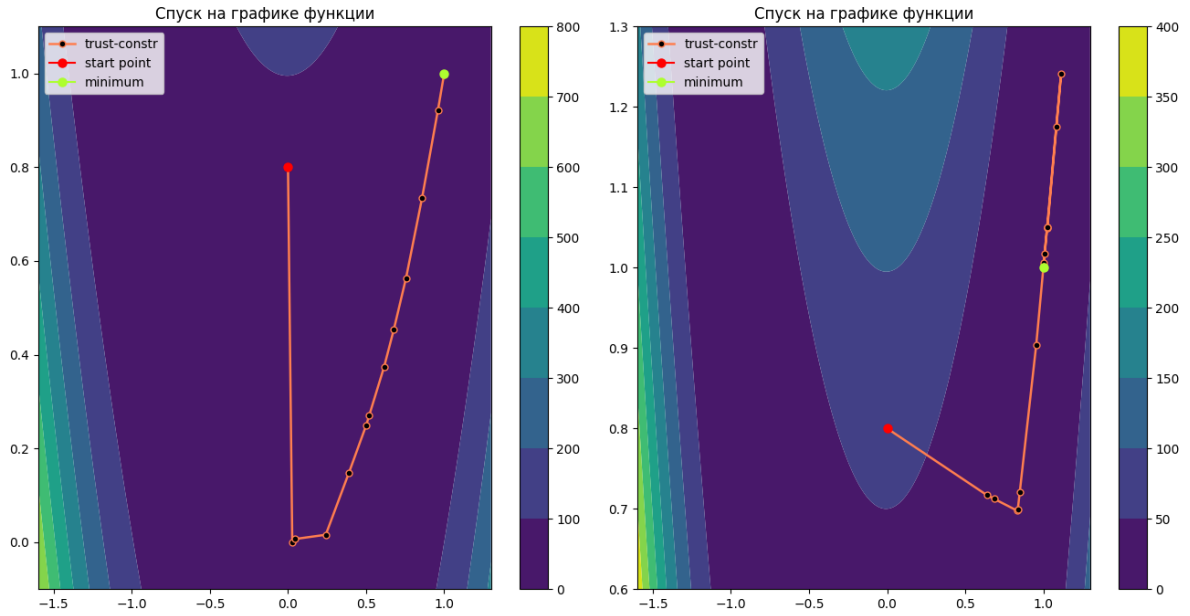
Уже без каких-либо таблиц с результатами схождения мы можем увидеть, что расстояние и, соответственно, количество шагов сильно увеличилось при добавленном эллипсе, так как алгоритм пошел по границе эллипса. Мы можем заметить небольшую «горку» в шагах алгоритма, которые и приводят к месту, где обитает минимум. Полученные табличные результаты:

Испытуемый	Число шагов	$\langle x, y \rangle$	z
No any constraints	49	$\langle 0.999995, 0.999991 \rangle$	0.000000
With non-linear constraint	79	$\langle 1.000018, 1.000036 \rangle$	0.000000

Теперь сделаем тоже самое, но уже только с линейным ограничением. Положим в качестве матрицы A – матрица, определяющая ограничение, – следующее:

$$A = \begin{pmatrix} 0.1 & 1 \end{pmatrix}$$

Также, само ограничение будет определено на луче $[0.78, +\infty)$. Итак, посмотрим же на график без ограничений и с ними:



Rosen with no constraint and with linear

Опять же, мы видим, что довольно-таки сильный срез в пути, а именно, в правильном направлении, по которому следует идти, вновь увеличил число шагов до сходимости в разы. Полученные табличные результаты:

Испытуемый	Число шагов	$\langle x, y \rangle$	z
No any constraints	49	$\langle 0.999995, 0.999991 \rangle$	0.000000
With linear constraint	122	$\langle 1.000000, 0.999999 \rangle$	0.000000

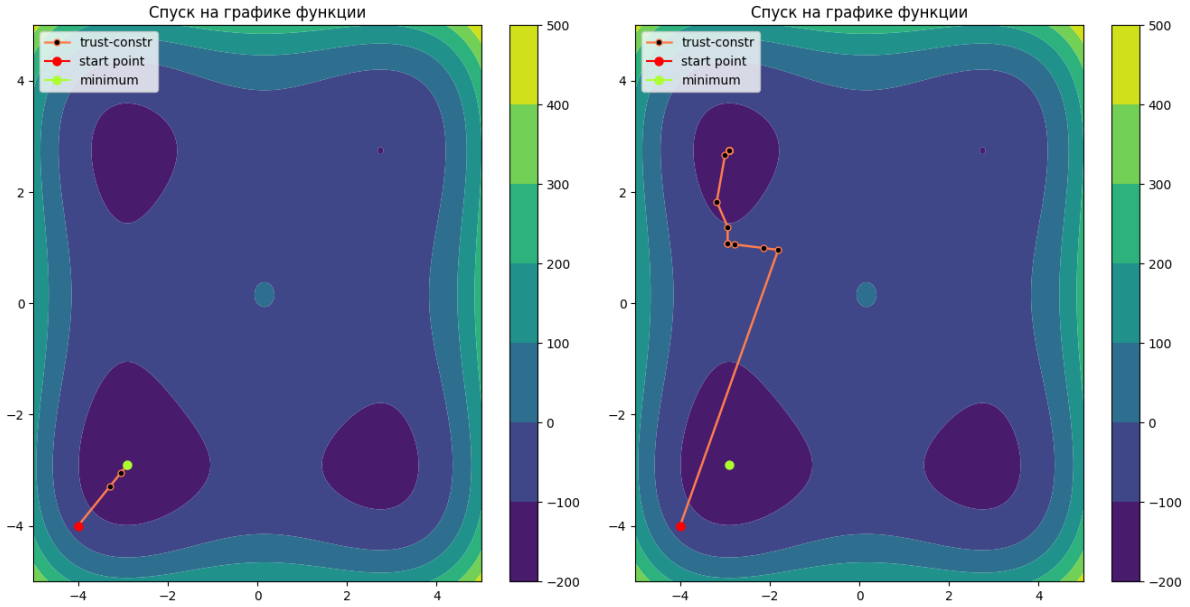
А теперь возьмем функцию посильнее и менее тривиальную в дальнейшей минимизации, а именно – Стыбинского-Танга, где также, как и во многих других пренеприятных функциях, имеется еще как минимум несколько похожих минимумов, среди которых лишь один является настоящим. Сама функция определяется следующей формулой, здесь $\vec{x}$ – вектор, так как функция рассчитана на многомерные и многопеременные случаи:

$$f(\vec{x}) = \frac{\sum_{i=1}^{n} x_i^4 - 16x_i^2 + 5x_i}{2}$$

Здесь мы рассматриваем два дополнительных случая, когда мы стоим на области минимума и при этом поставили ограничение. Пусть начальная точка задана как $\langle x_0, y_0 \rangle = \langle -4.0, -4.0 \rangle$ и положим следующие параметры для нелинейного ограничения:

$$f(x, y) = (x + 3)^2 + (y + 3)^2,$$

то это вновь эллипс, который стоит прямо на минимуме (центр там расположен); ограничительный луч будет следующим $[0.25, +\infty)$. Запустим и посмотрим на алгоритмы:



Tanga with no constraint and with non-linear

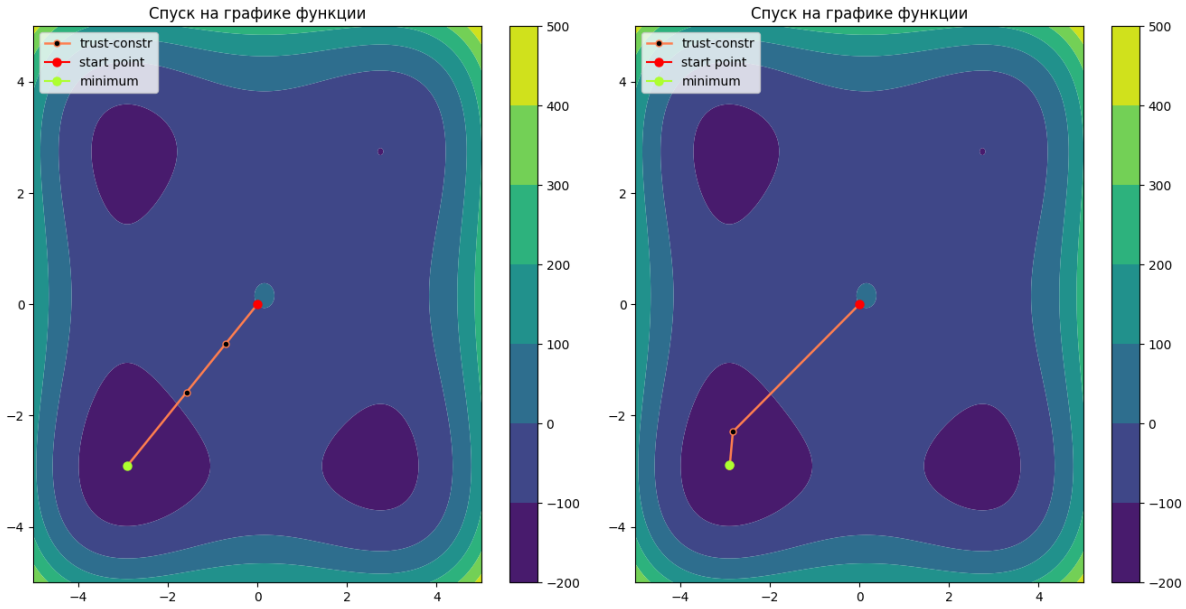
Из-за того, чтобы на данной функции существует еще некоторое число минимумов, метод поиска не растерялся и пошел другой минимум, так как мы ограничили какую-либо возможность добраться до минимума. Соответствующие графики, полученные после:

Испытуемый	Число шагов	$\langle x, y \rangle$	z
No any constraints	15	$\langle -2.903534, -2.903534 \rangle$	-156.664663
With non-linear constraint	89	$\langle -2.903534, 2.746803 \rangle$	-128.391225

А теперь сделаем тоже самое, но для линейного ограничения, то есть мы намеренно поставим точку в центр мира $\langle x_0, y_0 \rangle = \langle 0, 0 \rangle$ и проведем ограничительный отрезок с заданным параметрами:

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \texttt{lb} = -2.9, \quad \texttt{up} = +\infty,$$

где последние два параметра – это границы ограничительного луча. Получаем пути алгоритмов:



Tanga with no constraint and with linear

Получаем небольшую «лапку»: метод поиска на первой картинке уже видит минимум и бодрыми шагами шагает прямо в бездну, с ограничением он понимает, что что-то не так и сначала прыгает в область, где хоть и поменьше, но не совсем минимум, а дальше уже прыжок вновь в бездну.

Испытуемый	Число шагов	$\langle x, y \rangle$	z
No any constraints	16	$\langle -2.903534, -2.903534 \rangle$	-156.664663
With linear constraint	18	$\langle -2.903534, -2.899816 \rangle$	-156.664185