ĐẠI HỌC QUỐC GIA TP HỒ CHÍ MINH
TRƯỜNG ĐẠI HỌC BÁCH KHOA

BÁO CÁO BÀI TẬP LỚN
PHƯƠNG PHÁP TÍNH

PHƯƠNG PHÁP QUASI-NEWTON ĐỂ GIẢI BÀI TOÁN TỐI ƯU PHI TUYẾN

GVHD: TRẦN THỊ NGỌC HUYỀN

Lớp: L10

Nhóm số: 22

Danh sách thành viên:

Họ tên	MSSV
Trần Huỳnh Quốc Bảo	2310262
Trần Lê Ngọc Thịnh	2313312
Trần Nhật Quang	2312814
Trần Quốc Khánh	2311539
Trần Trọng Tín	2313461

Thuật toán cho các bài toán giải quyết bằng phương pháp quasi-Newton

Mục lục

Giới thiệu chung

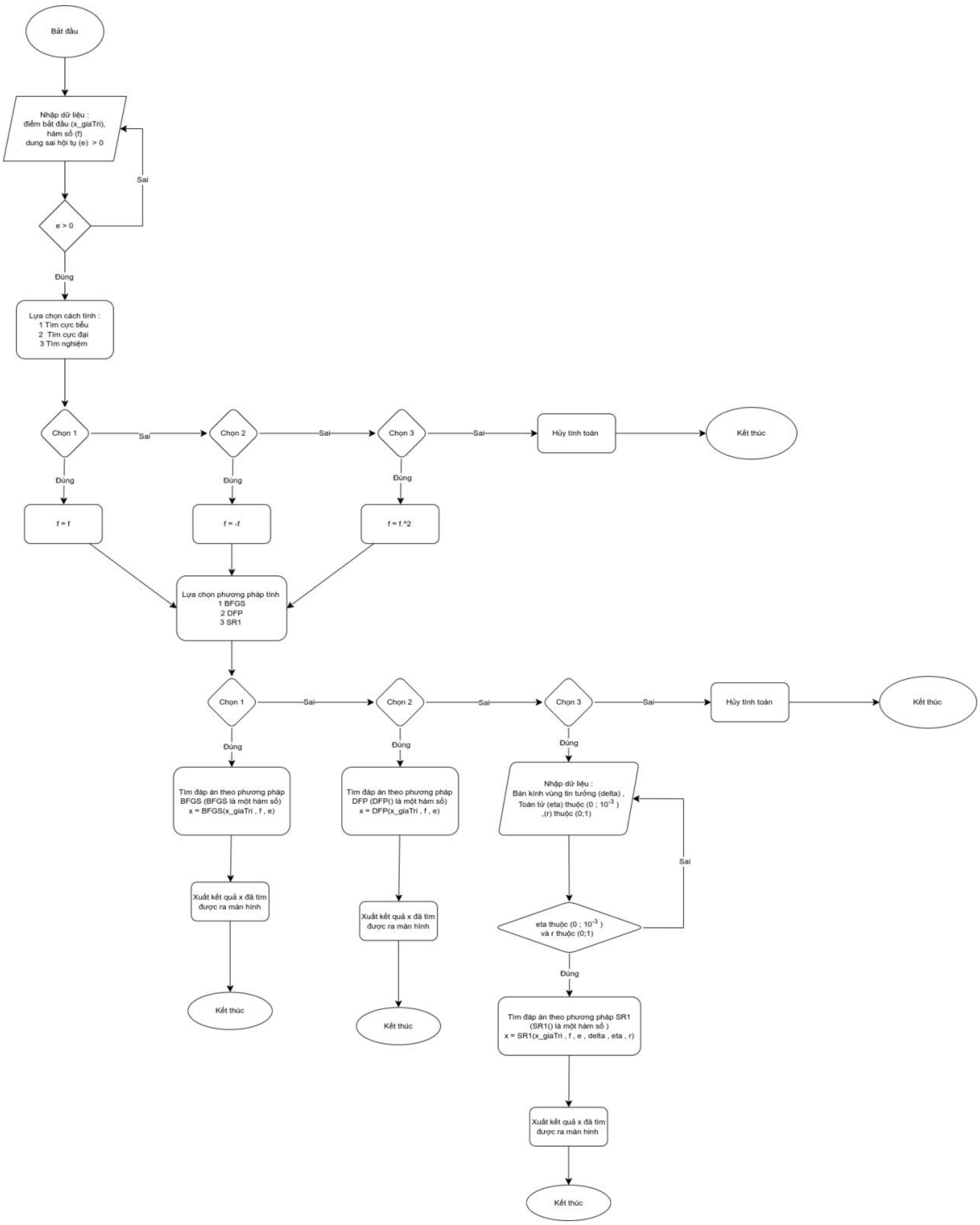
Bên dưới đây trình bày thuật toán toàn phần dùng để giải quyết các bài toán về quasi-Newton , trong thuật toán này chúng em sử dụng 3 phương pháp là phương pháp BFGS , DFP và SR1 được tham khảo trong sách Numerical Optimization, Jorge Nocedal, Stephen J. Wright , trong thuật toán chúng em nêu tóm tắt các bước và tách các thao tác tính của 3 phương pháp này riêng biệt để tránh gây rối trong quá trình gỡ lỗi đồng thời cũng tránh gây nhầm lẫn cho người đọc .

Thuật toán này được chia làm 2 phần :
- Phần thuật toán tổng quát
- Phần thuật toán riêng hàm

Trong phần thuật toán tổng quát , chúng em nêu ra các bước cơ bản để nhập và xử lý dữ liệu đầu vào , các thao tác người dùng có thể lựa chọn và đầu ra của dữ liệu .
Trong phần thuật toán riêng hàm , chúng em nêu ra chi tiết quá trình xử lý dữ liệu đầu vào của từng phương pháp (từng hàm) và nêu ra đầu ra của chúng .

Thuật toán tổng quát

Thuật toán biểu diễn bằng lưu đồ giải thuật :



Thuật toán biểu diễn bằng lời :

Nhập các dữ liệu cần thiết :

- Giá trị x ban đầu (x_giaTri)
- Nhập hàm số cần tính (f)

- Nhập dung sai hội tụ (e) > 0

Kiểm tra giá trị của e , nếu e nhỏ hơn không thì cho tiến hành nhập lại e

Lựa chọn :

1 Tìm cực tiểu
2 Tìm cực đại
3 Tìm nghiệm

Nếu lựa chọn là 1 thì f = f
Nếu lựa chọn là 2 thì f = -f
Nếu lựa chọn là 3 thì $f = f^2$
Nếu là một số khác 1,2,3 thì hủy quá trình tính và kết thúc chương trình

Lựa chọn phương pháp tính :

1 Phương pháp BFGS
2 Phương pháp DFP
3 Phương pháp SR1

Nếu lựa chọn là 1 thì :

Tìm x theo phương pháp BFGS : x = BFGS(f , x_giaTri , e)
In kết quả của x ra màn hình

Nếu lựa chọn là 2 thì :

Tìm x theo phương pháp DFP : x = DFP(f , x_giaTri , e)
In kết quả của x ra màn hình

Nếu lựa chọn là 3 thì :

Bổ sung các dữ liệu cần thiết từ bàn phím :

Giá trị vùng tin tưởng Δ
Giá trị của toán tử $\eta \in (0;10^{-3})$, $r \in (0;1)$

Nếu η hoặc r không nằm trong khoảng giá trị đã cho thì tiến hành nhập lại

Tiến hành tìm x theo phương pháp SR1 : x =SR1(f , x_giaTri , e , Δ , η , r)
In kết quả của x ra màn hình

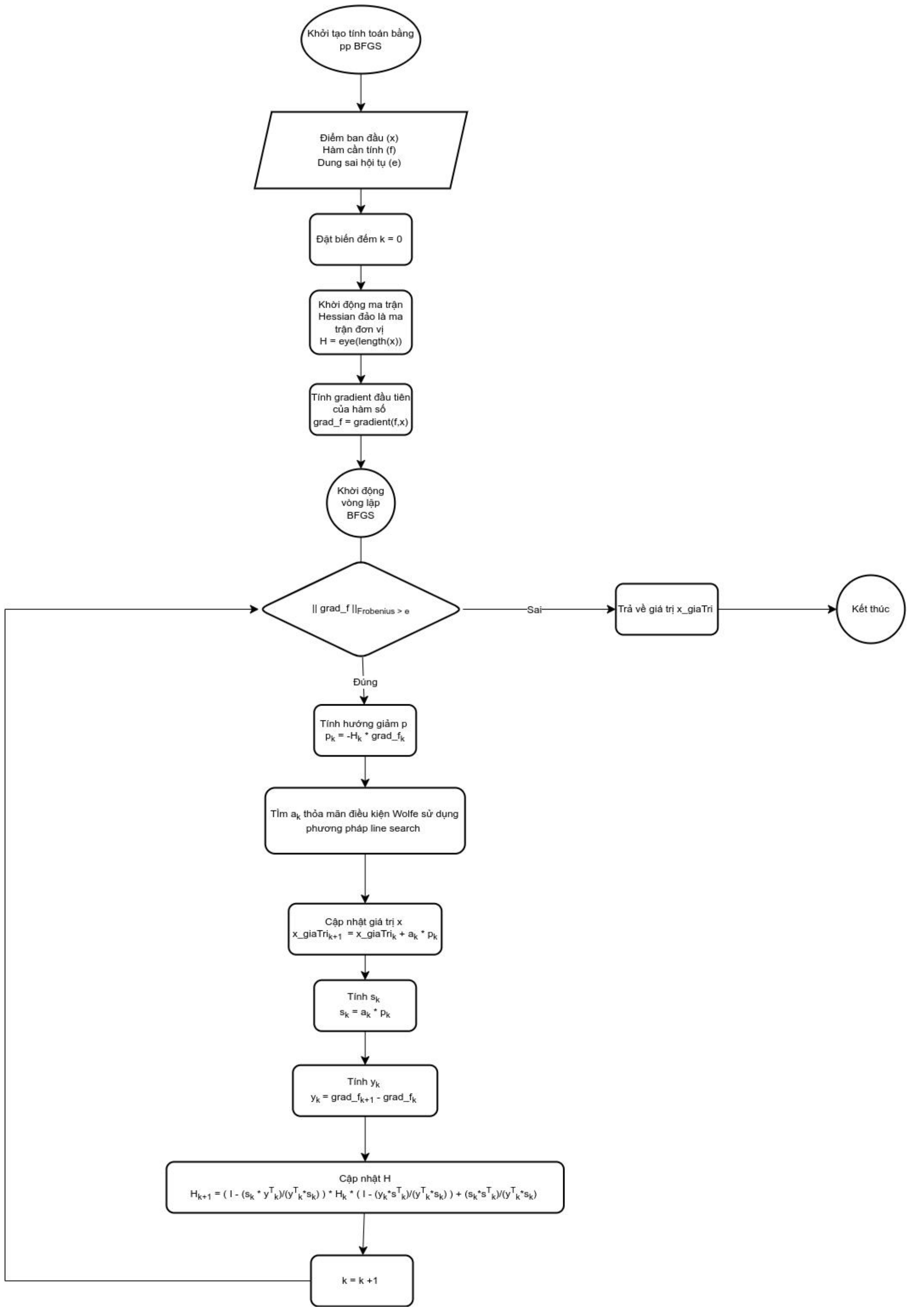
Nếu là một số khác 1,2,3 thì hủy quá trình tính và kết thúc chương trình

**Lưu ý : BFGS() , DFP() , SR1() là các hàm riêng biệt để giải quyết bài toán , để tránh gây rối cho thuật toán các hàm này sẽ có một lưu đồ giải thuật riêng được biểu diễn ngay bên dưới đây

Thuật toán riêng hàm

Thuật toán giải quyết vấn đề bằng phương pháp BFGS :

Thuật toán biểu diễn bằng lưu đồ thuật giải thuật :



Thuật toán biểu diễn bằng lời :

Hàm BFGS buộc người dùng phải nhập các giá trị sau đây
Giá trị đầu vào :

- Giá trị điểm x ban đầu (x_giaTri)
- Hàm cần tính (f)
- Dung sai hội tụ (e)

Đặt biến đếm k = 0

Khời động ma trận xấp xỉ Hessian đảo là ma trận đơn vị :

H = I

Tính gradient đầu tiên của hàm số ∇f

Khởi động vòng lặp tính theo phương pháp BFGS đến khi $\|\nabla f\| < e$:

Tính hướng giảm p_k : $p_k = -H\,\nabla f$

Tìm α_{k+1} thỏa mãn điều kiện Wolfe :

i. $f(x_k + a_k.p_k) \leq f(x_k) + c_1\, a_k\, p_k^T \nabla f(x_k)$

ii. $p_k^T \nabla f(x_k + a_k.p_k) \leq -c_2 p_k^T \nabla f(x_k)$

Cập nhật giá trị x : $x_{k+1} = x_k + a_k\, p_k$

Tính $s_k = a_k\, p_k$

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

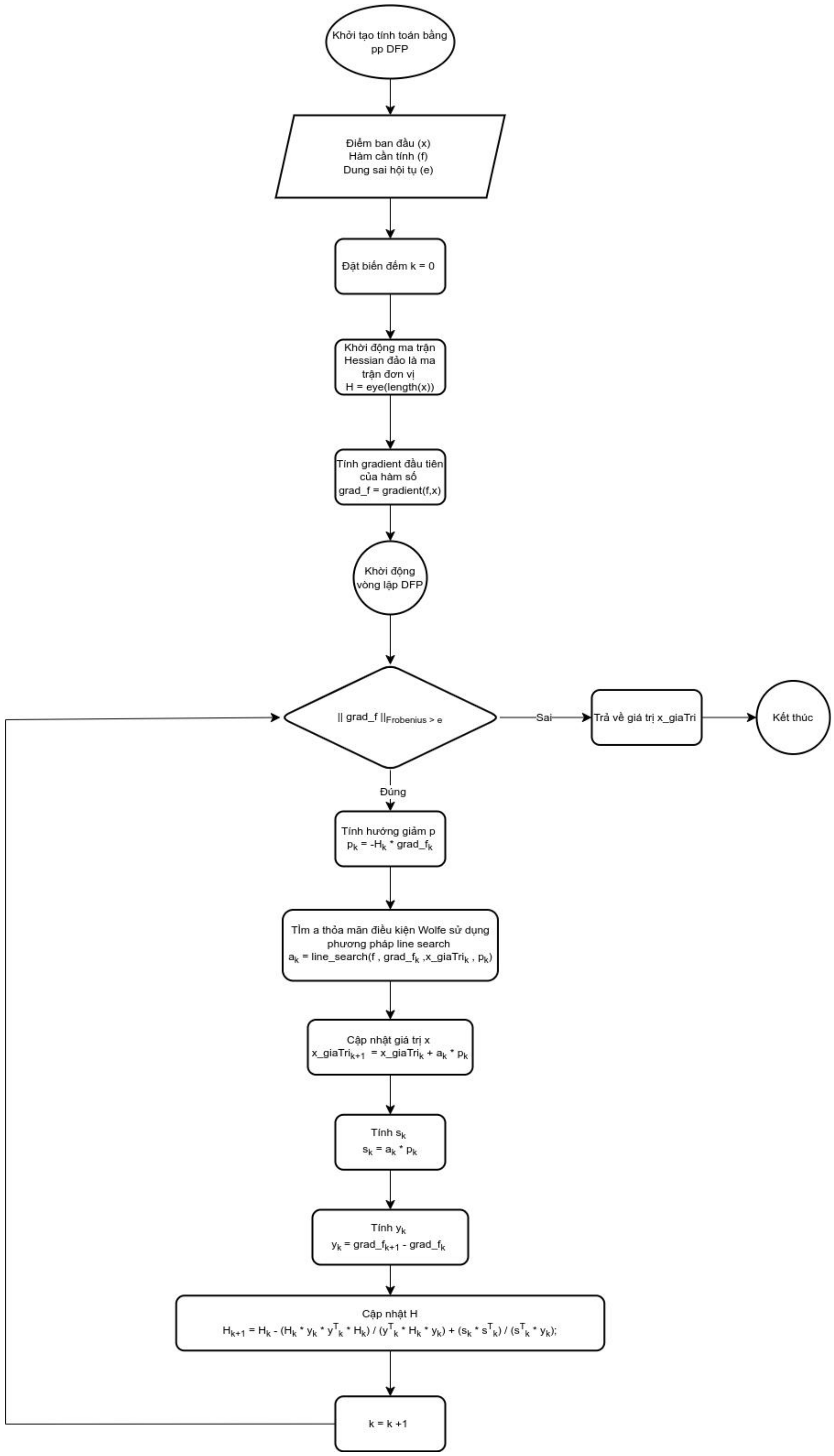
Cập nhật H_k : $H_{k+1} = (I - \frac{s_k\, y_k^T}{y_k^T s_k}) H_k (I - \frac{y_k\, s_k^T}{y_k^T\, s_k}) + \frac{s_k\, s_k^T}{y_k^T\, s_k}$

Tăng giá trị k lên 1

Khi vòng lặp kết thúc sẽ trả về giá trị của X phù hợp
Giá trị đầu ra X phù hợp

Thuật toán giải quyết vấn đề bằng phương pháp DFP :

Thuật toán biểu diễn bằng lưu đồ giải thuật :



Thuật toán biểu diễn bằng lời :

Hàm DFP buộc người dùng phải nhập các giá trị sau đây

Giá trị đầu vào :
- Giá trị điểm x ban đầu (x_giaTri)
- Hàm cần tính (f)
- Dung sai hội tụ (e)

Đặt biến đếm k = 0

Khởi động ma trận xấp xỉ Hessian đảo là ma trận đơn vị :

H = I

Tính gradient đầu tiên của hàm số ∇f

Khởi động vòng lặp tính theo phương pháp BFGS đến khi $\|\nabla f\| < e$:

Tính hướng giảm p_k : $p_k = - H \nabla f$

Tìm α_{k+1} thỏa mãn điều kiện Wolfe :

iii. $f(x_k + a_k . p_k) \leq f(x_k) + c_1 a_k p_k^T \nabla f(x_k)$

iv. $p_k^T \nabla f(x_k + a_k . p_k) \leq - c_2 p_k^T \nabla f(x_k)$

Cập nhật giá trị x : $x_{k+1} = x_k + a_k p_k$

Tính $s_k = a_k p_k$

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

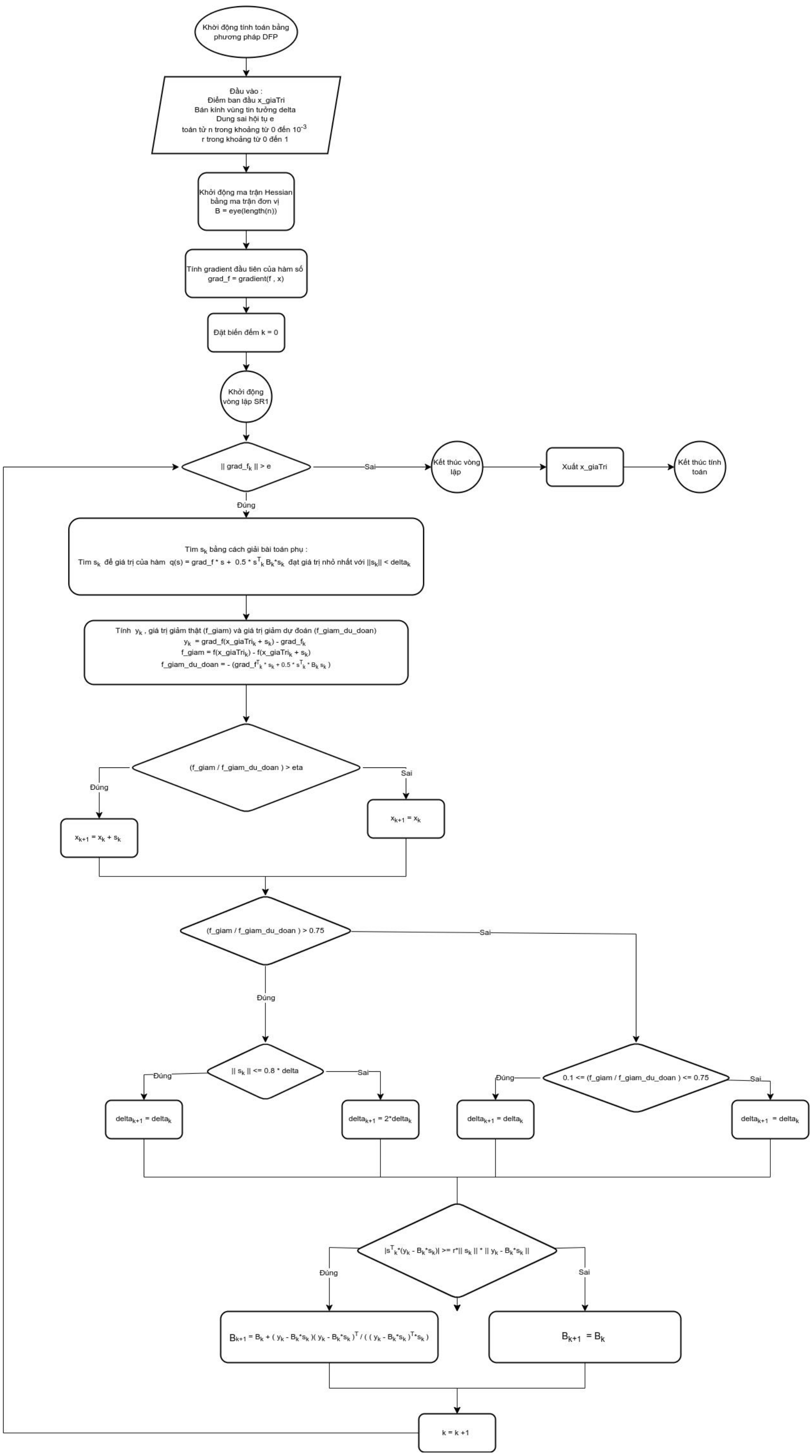
Cập nhật H_k : $H_{k+1} = H_k - \frac{H_k y_k y_k^T H_k}{y_k^T H_k y_k} + \frac{s_k s_k^T}{y_k^T s_k}$

Tăng giá trị k lên 1

Khi vòng lặp kết thúc sẽ trả về giá trị của X phù hợp
Giá trị đầu ra : X phù hợp

Thuật toán giải quyết vấn đề bằng phương pháp SR1 :

Thuật toán biểu diễn bằng lưu đồ giải thuật :


Khởi động tính toán bằng phương pháp DFP
Đầu vào :
Điểm ban đầu x_giaTri
Bán kính vùng tin tưởng delta
Dung sai hội tụ e
toán tử n trong khoảng từ 0 đến 10^{-3}
r trong khoảng từ 0 đến 1
Khởi động ma trận Hessian bằng ma trận đơn vị
B = eye(length(n))
Tính gradient đầu tiên của hàm số
grad_f = gradient(f , x)
Đặt biến đếm k = 0
Khởi động vòng lặp SR1
|| $grad\_f_k$ || > e
Sai
Kết thúc vòng lặp
Xuất x_giaTri
Kết thúc tính toán
Đúng
Tìm s_k bằng cách giải bài toán phụ :
Tìm s_k để giá trị của hàm q(s) = grad_f * s + 0.5 * $s^T{}_k B_k * s_k$ đạt giá trị nhỏ nhất với $||s_k|| < delta_k$
Tính y_k , giá trị giảm thật (f_giam) và giá trị giảm dự đoán (f_giam_du_doan)
y_k = grad_f(x_giaTri$_k$ + s_k) - grad_f$_k$
f_giam = f(x_giaTri$_k$) - f(x_giaTri$_k$ + s_k)
f_giam_du_doan = - (grad_f$^T{}_k$ * s_k + 0.5 * $s^T{}_k$ * B_k s_k)
(f_giam / f_giam_du_doan) > eta
Đúng
Sai
$x_{k+1} = x_k + s_k$
$x_{k+1} = x_k$
(f_giam / f_giam_du_doan) > 0.75
Sai
Đúng
|| s_k || <= 0.8 * delta
Đúng
Sai
0.1 <= (f_giam / f_giam_du_doan) <= 0.75
Đúng
Sai
$delta_{k+1} = delta_k$
$delta_{k+1} = 2*delta_k$
$delta_{k+1} = delta_k$
$delta_{k+1} = delta_k$
$|s^T{}_k*(y_k - B_k*s_k)| >= r*|| s_k || * || y_k - B_k*s_k ||$
Đúng
Sai
$B_{k+1} = B_k + (y_k - B_k*s_k)(y_k - B_k*s_k)^T / ((y_k - B_k*s_k)^T*s_k)$
$B_{k+1} = B_k$
k = k +1

Thuật toán biểu diễn bằng lời :

Hàm SR1 buộc người dùng phải nhập các giá trị sau đây

Giá trị đầu vào :

- Giá trị x ban đầu
- Hàm cần tính f
- Giá trị vùng tin tưởng Δ
- Dung sai hội tụ e
- Toán tử η ϵ [0 ; 10^{-3}] và r ϵ [0;1]

Đặt biến đếm k = 0

Khởi động ma trận xấp xỉ Hessian đảo là ma trận đơn vị :

B = I

Tính gradient đầu tiên của hàm số ∇f

Khởi động vòng lặp tính theo phương pháp SR1 đến khi $\|\nabla f\| < e$:

Tính s_k bằng cách giải quyết vấn đề phụ :

Tìm s_k sao cho biểu thức $q(s_k) = \nabla f_k^T s_k + \frac{1}{2} s_k^T B_k s_k$ đạt giá trị nhỏ nhất với điều kiện $\|s_k\| < \Delta_k$

Tính y_k, giá trị giảm thật f_giam và và giá trị giảm dự đoán f_giam_du_doan

$y_k = \nabla f(x_k + s_k) - \nabla f_k$
$\text{f\_giam} = f_k - \nabla f(x_k + s_k)$
$\text{f\_giam\_du\_doan} = -(\nabla f_k^T s_k + \frac{1}{2} s_k^T B_k s_k)$

Thực hiện so sánh

Nếu f_giam/f_giam_du_doan > η thì

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

Ngược lại

$x_{k+1} = x_k$

Kết thúc so sánh

Tiếp tục thực hiện so sánh

Nếu f_giam/f_giam_du_doan > 0.75 thì

Thực hiện thêm so sánh phụ

Nếu $\|s_k\| < 0.8\Delta_k$ thì

$\Delta_{k+1} = \Delta_k$

Ngược lại

$\Delta_{k+1} = 2\Delta_k$

Kết thúc so sánh phụ

Ngược lại nếu 0.1 ≤ f_giam/f_giam_du_doan ≤ 0.75 thì

$$\Delta_{k+1} = \Delta_k$$

Ngược lại

$$\Delta_{k+1} = \frac{1}{2} \Delta_k$$

Kết thúc so sánh

Thực hiện so sánh

Nếu $|s_k^T(y_k - B_k s_k)| \geq r \|s_k\| \|y_k - B_k s_k\|$ thì

$$B_{k+1} = B_k + \frac{(y_k - B_k s_k)(y_k - B_k s_k)^T}{(y_k - B_k s_k)^T s_k}$$

Ngược lại

$$B_{k+1} = B_k$$

Kết thúc so sánh

Cập nhật biến đếm k = k +1

Khi vòng lặp kết thúc sẽ trả về giá trị x phù hợp
Giá trị đầu ra : x phù hợp