**Домашнее задание № 3.**

**Методы многомерного поиска.**

**Цель работы:**

1. **Изучение алгоритмов многомерного поиска 1-го и 2-го порядка.**
2. **Разработка программ реализации алгоритмов многомерного поиска 1-го и 2-го порядка.**
3. **Вычисление экстремумов функции.**

**Методические указания.**

**4.2.1. Метод наискорейшего градиентного спуска.**

**Стратегия поиска.**

Стратегия решения задачи состоит в построении последовательности точек  таких, что . Точки последовательности  вычисляются по правилу , где точка  задается пользователем; величина шага  определяется для каждого значения  из условия:

.

Решение задачи , где , может осуществляться с использованием необходимого условия минимума  с последующей проверкой достаточного условия минимума . Такой путь может быть использован либо при простой минимизирующей функции , либо при аппроксимации достаточно сложной функции  полиномом  (как правило, второй или третьей степени), и тогда условие  замещается условием , а условие  - условием .

Другой путь решения задачи  связан с использованием численных методов, когда ищется , т.е. с использованием методов одномерного поиска. Границы интервала  задаются пользователем. При этом степень близости найденного значения  к оптимальному значению , удовлетворяющему условиям  и , зависит от задания интервала  и точности методов одномерной минимизации.

Построение последовательности  заканчивается в точке , для которой , где  - заданное число, или если ,  - предельное число итераций, или при двукратном одновременном выполнении неравенств , где  - малое положительное число. Вопрос о том, может ли точка  рассматриваться как найденное приближение искомой точки локального минимума , решается путем дополнительного исследования.

**Алгоритм.**

**Ш.1.** Задать , предельное число итераций . Найти градиент функции в начальной точке .

**Ш.2.** Положить .

**Ш.3.** Вычислить .

**Ш.4.** Проверить выполнение критерия окончания :

 если неравенство выполнено, то  ;

 если нет, то перейти на Ш.6.

**Ш.5.** Проверить выполнение неравенства :

 если неравенство выполнено, то ;

 если нет, то перейти на Ш.6.

**Ш.6.** Вычислить величину шага , где .

**Ш.7.** Вычислить .

**Ш.8.** Проверить выполнение условий: :

 если оба условия выполнены при текущем значении  и , то ; расчет окончен;

 если хотя бы одно из условий не выполнено, то положить  и перейти на Ш.3.

**Замечание 3.2.**

Метод наискорейшего спуска гарантирует сходимость последовательности  к точке минимума для сильно выпуклых функций.

**4.2.2. Метод Флетчера-Ривза и Полака-Рибьера.**

***Постановка задачи***

Требуется найти безусловный минимум функции  многих переменных, т,е. найти такую точку  , что на множестве допустимых решений . При этом предполагается использование методов одномерного поиска для определения величины шага в направлении поиска .

**Стратегия поиска.**

Стратегия метода Флетчера-Ривза (FR) состоит в построении последовательности точек , таких, что . Точки последовательности  вычисляются по правилу:

 (4.1.1.)

 (4.1.2.)

 (4.1.3.)

. (4.1.4.)

Точка  задается пользователем, величина шага  определяется для каждого значения  из условия . Решение задачи одномерной минимизации может осуществляться либо из условия , либо численно, с использованием методов одномерной минимизации, когда решается задача:

. (4.1.5.)

При численном решении задачи определения величины шага степень близости найденного значения  к оптимальному значению , удовлетворяющему условиям , зависит от задания интервала  и точности одномерной минимизации.

Вычисление величины  по формуле (4.1.4.) обеспечивает для квадратичной формы  построение последовательности -сопряженных направлений , для которых . При этом в точках последовательности  градиенты функции  взаимно перпендикулярны, т.е. .

Для квадратичных функций  с матрицей  метод Флетчера-Ривза является конечным и сходится за число шагов, не превышающее - размерность  вектора переменных.

При минимизации неквадратичных функций метод не является конечным, при этом следует отметить, что погрешность в решении задачи (4.1.5.) приводит к нарушению не только перепендикулярности градиентов, но и -сопряженности направлений. Для неквадратичных функций, как правило, используется алгоритм Полака-Рибьеры, когда в формулах (4.1.1. – 4.1.3.) величина  вычисляется следующим образом:

**Флетчер-Ривз:** ,

**Полак-Рибьр:** 

где . В отличие от алгоритма Флетчера-Ривза алгоритм Полака-Рибьера предусматривает использование итерации наискорейшего спуска через каждые  шагов. Построение последовательности  заканчивается в точке, для которой , где  - заданное число, или при  - предельное число итераций, или при двукратном одновременном выполнении двух неравенств  где  - малые положительные числа. Вопрос о том, может ли точка  рассматриваться как найденное приближение искомой точки минимума, решается путем проведения дополнительного исследования.

**Алгоритм.**

**Ш.1.** Задать  - предельное число итераций. Вычислить градиент .

**Ш.2.** Положить 

**Ш.3.** Вычислить

**Ш.4.** Проверить выполнение критерия окончания 

 если критерий выполнен,  расчет заканчивается;

 если нет, то перейти на Ш.5.

**Ш.5.** Проверить условие 

 если неравенство выполняется, то расчет окончен и 

 если нет, то при  перейти на Ш.6., а при  перейти на Ш.7.

**Ш.6.** Определить 

**Ш.7.** Определить

**Флетчер-Ривз:**, или

**Полак-Рибьер:**

**Ш.8.** Определить 

**Ш.9.** Найти  из условия .

**Ш.10.** Вычислить 

**(Ш.10. Для алгоритма Полака-Рибьера: Если , то переход на Ш.2)**

**Ш.11.** Проверить выполнение условий 

 в случае выполнения обоих условий в двух последовательных итерациях с номерами  и  расчет окончен, найдена точка .

 если не выполняется хотя бы одно из условий, полагаем  и переход на Ш.3.

**4.2.3. Метод Девидона-Флетчера-Пауэлла.**

***Постановка задачи***

Пусть дана функция , ограниченная снизу на множестве  и имеющая непрерывные частные производные во всех его точках (т.е. ).

Требуется найти локальный минимум функции  на множестве допустимых решений , т.е. найти такую точку , что .

**Стратегия поиска.**

Стратегия метода Девидона-Флетчера-Пауэлла (DFP) состоит в построении последовательности точек , таких, что . Точки последовательности  вычисляются по правилу:

 , (4.2.1.)

где  - матрица размера , являющаяся аппроксимацией обратной матрицы Гессе. Она вычисляется по правилу:

 (4.2.2.)

 (4.2.3.)

где .

Точка  задается пользователем, величина шага  определяется из условия:

**.** (4.2.4.)

Решение задачи (4.2.4.) может выполняться как из условия  , либо численно, с использованием методов одномерной минимизации, когда решается задача:  оптимизации.

Формулы (4.2.2.), (4.2.3.) при аналитическом решении задачи (4.2.4.) обеспечивают построение последовательности  положительно определенных матриц, таких, что  при . Следствием этого для квадратичной функции , является тот факт, что направления  будут -сопряженными и, следовательно, алгоритм DFP сойдется не более чем за шагов.

Для неквадратичных функций  алгоритм DFP перестаёт быть конечным и его сходимость зависит от точности решения задачи (4.2.4.). Глобальную сходимость алгоритма можно гарантировать лишь при его обновлении через каждые  шагов, т.е. когда в формуле (4.2.1.):



Построение последовательности  заканчивается в точке , для которой  где  - заданное число, или при ( - предельное число итераций), или при двукратном одновременном выполнении двух неравенств: , где  - малые положительные числа. Вопрос о том, может ли точка  рассматриваться как найденное приближение искомой точки минимума, решается путем проведения дополнительного исследования.

**Алгоритм.**

**Ш.1.** Задать  - предельное число итераций. Найти градиент .

**Ш.2.** Положить 

**Ш.3.** Вычислить .

**Ш.4.** Проверить критерий окончания 

 если критерий выполнен,  расчет заканчивается;

 Если нет, то перейти на Ш.5.

**Ш.5.** Проверить условие 

 если неравенство выполняется, то расчет окончен и 

 если нет, то при  перейти на Ш.10., а при  перейти на Ш.6.

**Ш.6.** Вычислить .

**Ш.7.** Вычислить .

**Ш.8.** Вычислить .

**Ш.9.** Вычислить 

**Ш.10.** Определить .

**Ш.11.** Вычислить .

**Ш.12.** Вычислить .

**Ш.13.** Проверить условия :

 в случае выполнения обоих условий в двух последовательных итерациях с номерами  и  расчет окончен, найдена точка .

 если не выполняется хотя бы одно из условий, полагаем  и переход на Ш.3.

**4.2.4. Метод Бройдена-Флетчера-Гольдфарба-Шенно.(BFGS).**

Обозначим



Тогда



Отсюда



Такая замена обеспечивает более устойчивый процесс

поиска экстремума. Как видно из соотношений для и  формулы

пересчета для DFP и BFGS взаимнообратны.



****

**4.2.4. Метод Левенберга-Марквардта.**

***Постановка задачи***

Пусть дана функция , ограниченная снизу на множестве  и имеющая непрерывные вторые частные производные во всех его точках (т.е. ).

Требуется найти локальный минимум функции  на множестве допустимых решений , т.е. найти такую точку , что .

**Стратегия поиска.**

Стратегия метода Левенберга-Марквардта (LM) состоит в построении последовательности точек , таких, что . Точки последовательности  вычисляются по правилу:

, (4.3.1.)

где точка  задается пользователем,  - единичная матрица,  - последовательность положительных чисел, таких, что матрица  положительно определена. Как правило, число  назначается как минимум на порядок больше, чем самый большой элемент матрицы , а в ряде стандартных программ полагается . Если , то . В противном случае . Легко видеть, что алгоритм Левенберга-Марквардта в зависимости от величины  на каждом шаге по своим свойствам приближается либо к алгоритму Ньютона, либо к алгоритму градиентного спуска.

Построение последовательности  заканчивается, когда либо  , либо число итераций , где  - малое положительное число, а  - предельное число итераций.

Вопрос о том, может ли точка  рассматриваться как найденное приближение искомой точки минимума, решается путем проведения дополнительного исследования.

**Алгоритм.**

**Ш.1.** Задать  - предельное число итераций. Найти градиент  и матрицу Гессе .

**Ш.2.** Положить 

**Ш.3.** Вычислить .

**Ш.4.** Проверить критерий окончания 

 если критерий выполнен,  расчет заканчивается;

 если нет, то перейти на Ш.5.

**Ш.5.** Проверить условие 

 если неравенство выполняется, то расчет окончен и 

 если нет, то перейти на Ш.6.

**Ш.6.** Вычислить .

**Ш.7.** Вычислить .

**Ш.8.** Вычислить .

**Ш.9.** Вычислить .

**Ш.10.** Вычислить .

**Ш.11.** Проверить выполнение условия 

 если неравенство выполняется, то перейти на Ш.12;

 если нет, перейти на Ш.13.

**Ш.12.** Положить  и перейти на Ш.3.

**Ш.13.** Положить  и перейти на Ш.7.

**Замечание 4.1.** В окрестности точки минимума  метод Левенберга-Марквардта обладает скоростью сходимости, близкой к квадратичной.

**Задание.**

Требуется найти минимум тестовой функции Розенброка:

.

1. Методами сопряженных градиентов (методом Флетчера-Ривза и методом Полака-Рибьера).
2. Квазиньютоновским методом (Девидона-Флетчера-Пауэлла).
3. Методом Левенберга-Марквардта.

**Замечание 4.2.** В качестве методов одномерного поиска использовать любой из известных методов одномерного поиска.

**Варианты задания:**

1. ;

2. ;

3. ;

4. ;

5. ;

6. ;

7. ;

8. ;

9. ;

10. ;

11. ;

12. ;

13. ;

14.;

15. ;

16.;

17. ;

18.;

19. ;

20. ;

21.;

22.;

23.;

24.;

25.

1. **Найти все стационарные точки и значения функций соответствующие этим точкам.**
2. **Оценить скорость сходимости указанных алгоритмов и сравнить по времени получение результата оптимизации для разных методов.**
3. **Реализовать алгоритмы программированием на одном из языков высокого уровня (C++, C#,Python, Haskell и др.).**
4. **Отчет представить в стандартном виде (TEX, PDF).**

**Требования к отчету.**

1. Отчет должен содержать:

1.1. титульный лист;

1.2. цель работы;

1.3. постановку задачи;

1.4. проверку решения на допустимость.

2. Исследование выполнить с помощью написанной Вами программы с результатами в графическом виде.

3. Кроме текста исследования следует привести также текст исходного кода программ.

4. Отчет оформляется в формате PDF желательно в редакторе TEX.