«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ ИТМО»

Факультет информационных технологий и программирования

Кафедра компьютерных технологий

ОТЧЁТ ПО ЛАБОРАТОРНОЙ РАБОТЕ №4

Изучение алгоритмов метода Ньютона и его модификаций, в том числе квазиньютоновских методов. Вариант 2

Выполнили студенты:

Ефимов Сергей Алексеевич
группа: M3237

Соколов Александр Андреевич
группа: M3234

Проверил:

Свинцов Михаил Викторович

г. Санкт-Петербург

Постановка задачи

Задача лабоpатpной работы – Разработать программы для безусловной минимизации функций многих переменных

Реализовать алгоритмы метода миимизации функции Ньютона:

- Классический
- С одномерным поиском
- С направлением спуска

Также необходимо провести исследование работы методов на различных функциях. В ходе работы необходимо разработать квазиньютоновский метод Бройдена-Флетчера-Шено и метод Пауэлла, проанализировать и сравнить с наилучшим методом Ньютона.

Ход работы

Теория

Рассмотрим задачу итерационной минимизации. Пусть $f(x) \in E^n$ - минимизируемая функция. Также $f(x)$ дважды дифференцируема, тогда, начав с точки x_0 мы можем построить квадратичную аппроксимацию $f(x)$ в окрестности x_0 на основе формулы Тейлора:

$$f(x) = f(x^{k-1}) + \left\langle \nabla f(x^{k-1}), x - x^{k-1} \right\rangle - \frac{1}{2}\left\langle H(x^k)(x - x^{k-1}), x - x^{k-1} \right\rangle + o(|x - x^{k-1}|)^2$$

Пренебрегая остатком в форме Пеано получим:

$$\phi_k(x) = f(x^{k-1}) + \left\langle \nabla f(x^{k-1}), x - x^{k-1} \right\rangle - \frac{1}{2}\left\langle H(x^k)(x - x^{k-1}), x - x^{k-1} \right\rangle$$

Если матрица Гессе является положительно определенной то ϕ_k имеет единственную точку минимума, которая и является следущей точкой итерационной последовательности. Данная точка может быть найдена из следущего условия:

$$\nabla \phi_k(x) = \nabla f(k^{k-1}) + H(x^{k-1})(x - x^{k-1}) = 0$$

Исходя из формулы:

$$\nabla(a^T x) = a$$

$$\nabla(x^T A x) = 2Ax$$

Тогда следущая точка релаксационной последовательности будет вычисляться как:

$$x^k = x^{k-1} - H^{-1}(x^{k-1}) \nabla f(x^{k-1}); k \in N$$

Пусть x'^k - вспомогательная точка релаксационной последовательности, тогда x^k можно найти как:

$$x^k = x^{k-1} + \alpha_k(x'^k - x^{k-1}) = x^{k-1} + \alpha_k p^k$$

$$\alpha_k > 0$$

где: $p^k = x'^k - x^{k-1}$ направление спуска

Классический метод Ньютона

Алгоритм:

Пусть дано x_0 - начальное приближение, ϵ - точность, тогда:

1. Рассчитать $\nabla f(x)$ - Градиент от функции в текущем приближении, H - матрицу Гессе по формуле $\nabla^2 f(x)$
2. Решить СЛАУ $Hp^k = -\nabla f(x)$
3. Вычислить следущий $x^k = x^{k-1} + p^k$
4. Если $\|x^k - x^{k-1}\| < \epsilon$, что эквивалентно $\|p^k\|$, то текущее приближение является искомым решением, иначе повторить алгоритм с 1 пункта

- Минусы:
  - Если начальное приближение выбрать достаточно далеко от минимума, то метод не сходится, такт как не обладает глобальной сходимостью
- Плюсы:
  - Если H удовлетворяет условию Липшица в окрестности решения поставленной задачи, то метод обладает квадратичной сходимостью.

Метод Ньютона с одномерным поиском

Пусть x^{k-1} - одномерный поиск в направлении p^k:

Тогда $\alpha_k = \min_\alpha(f(x^k + \alpha p^k))$ - вычисляется для нового напрвления в вычислении текущего минимума.

Алгоритм очень мохож на предыдущий, но теперь дополнительно вычисляется α_k

Алгоритм:

1. Рассчитать $\nabla f(x)$ - Градиент от функции в текущем приближении, H - матрицу Гессе по формуле $\nabla^2 f(x)$
2. Решить СЛАУ $Hp^k = -\nabla f(x)$
3. $\alpha_k = \min_\alpha(f(x^k + \alpha p^k))$
4. Вычислить следущий $x^k = x^{k-1} + \alpha p^k$
5. Если $\|x^k - x^{k-1}\| < \epsilon$, что эквивалентно $\|p^k\|$, то текущее приближение является искомым решением, иначе повторить алгоритм с 1 пункта

- Минусы:
  - Эффективность алгоритма зависит от того, является ли p_k - направлением спуска
- Плюсы:
  - Алгоритм обладает глобальной сходимостью в отличие от классического метода

Метод Ньютона с направлением спуска

Если p_k - направление спуска:

$$(p^k)^T \nabla f(x^k) < 0$$

Иначе p^k - не напрвление спуска, тогда следует использовать $-\nabla(x^k)$, тогда:

$$H(x^k)p^k = -\nabla f(x^k) \Rightarrow$$

$$p^k = \begin{cases} p^k, & (p^k)^T \nabla f(x^k) < 0 \\ -\nabla f(x^k) & (p^k)^T \nabla f(x^k) > 0 \end{cases}$$

Данный метод позволяет предотвратить неверное направление поиска, которы связан с седловыми точками, а так же точками максимума. Остальные шаги аналогичны предыдущему методу .Метод так же обладает глобальной сходимостью.

Квазиньютоновские методы

Квазиньютоновские методы - методы оптимизации, основанные на накоплении информации о кривизне целевой функции по наблюдениям за изменением градиента, чем принципиально отличаются от ньютоновских методов. Класс квазиньютоновских методов исключает явное формирование матрицы Гессе, заменяя её некоторым приближением.

Квазиньютоновские методы:

- Объединяют в себе достоиства от наискорейшего спуска и метода Ньютона
- Не требуют обращение к матрице H
- Сохраняют высокую сходимость итерационной последовательности

Общий вид релаксационной последовательности

$$x^k = x^{k-1} + \alpha_k p^k$$

где p^k - направление спуска

$$p^k = G_k w^k, k \in N$$

$$w^k = -\nabla f(x^{k-1})$$

G_k - Положительно определенная матрица (n x n) специального вида

Вичисление матрицы G_k происходит следущим образом, Она должна сходится к обратной матрица Гессе при достаточно больших k, то есть:

$$G_{k \longrightarrow \infty} \longrightarrow H^{-1}(x^*)$$

где x^* - точка минимума

За счет этого метод может гарантировать высокую сходимость, присущую метода Ньютона

α_k выбирается одним из типовых способов:

1. Константное значение $\alpha_k = 1$
2. Дробление шага
3. Частоиспользуемый вариант выбора α_k использование исчерпывающего спуска напралении p^k

Идеей квазиньютоновских методов является удачный выбор апроксимации, который может занчительно сократить объем вычислений по сравнению с обращением H, тем самым упростить процедуру построения p^k

Методы обладают глобальной сходимостью.

Метод Бройдена-Флетчера-Шено

Метод Бройдена-Флетчера-Шено - один из наиболее широко применяемых квазиньютоновских методов

Свойства присущие данному методу:

- G_k - сохраняет положительную определенность
- Если G_k - симметричная, то G_{k+1} - тоже симметричная
- При минимизации квадаратичной функции с положительно опреленной матрицей A метод сводится к методу сопряженных направлений, точное решение не более чем за n итераций
- Матрицы G_k связанны равенством

  $$G_k \cdot A \cdot p_i = p_i$$

  Следовательно G_k - обратная матрица к Гессиану
- Если целевая функция не квадратичная, то метод не позволяет найти решение за конечое кол-во итераций. Для уменьшения ошибки принято первые n итераций $G_k = I$(единичная матрица)
- Если целевая функция квадаратичная то

  $$H^{-1} = \sum_{i=1} n \frac{\triangle x_i (\triangle x_i)^T}{i(\triangle x_i)^T \triangle w_i}$$

На первой итерации $G1 = I$ $w_1 = -\nabla f(x_0)$

$p_1 = w_1$

$\alpha_1 = \min_\alpha f(x_0 \alpha p_1)$

$x_1 = x_0 + \alpha_1 p_1$

$\triangle x_1 = x_1 - x_0$

Если k > 0, то $w_k = -\nabla f(x_{k-1})$

$\triangle w_k = w_k - w_{k-1}$

$p_k = G_k \cdot w_k$

$\alpha_k = \min_\alpha f(x_{k-1} \alpha_k p_k)$

$x_k = x_{k-1} + \alpha_k p_k$

$\triangle x_k = x_k - x_{k-1}$

Условие остановы: $\|\triangle x_k\| < \epsilon$

$$G_{k+1} = G_k - \frac{\triangle x_i (\triangle x_i)^T}{\langle \triangle w^k, \triangle x^k \rangle} - \frac{G_k \triangle w^k (\triangle w^k)^T G_k^T}{\rho_k} + \rho_k r^k (r^k)^T$$

$$r^k = \frac{G_k \triangle w^k}{\rho_k} - \frac{\triangle x^k}{\langle \triangle x^k, \triangle w^k \rangle}$$

$$\rho_k = \langle G_k \triangle w^k, \triangle w^k \rangle$$

Метод Пауэлла

Очень сильно похож на предыдущий метод, за исключением определения G_k:

$$G_{k+1} = G_k - \frac{\triangle x'_k (\triangle x'_k)^T}{\langle \triangle w_k, \triangle x'_k \rangle}$$

Демострация методов на различных функциях

Проведем исследование на двух функциях:

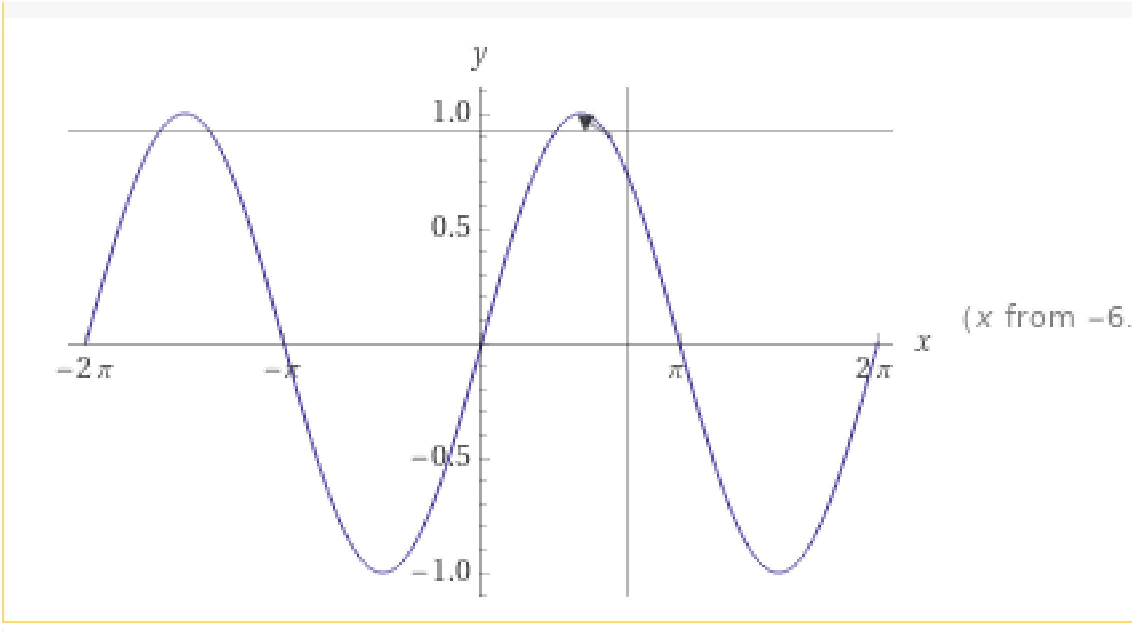
1. $\sin(x)$
2. $10x^2 + 2xy + 12y^2$

- – Классический метод Ньютона: $\sin(x)$

  Начальное приближение: $x_0 = 1$

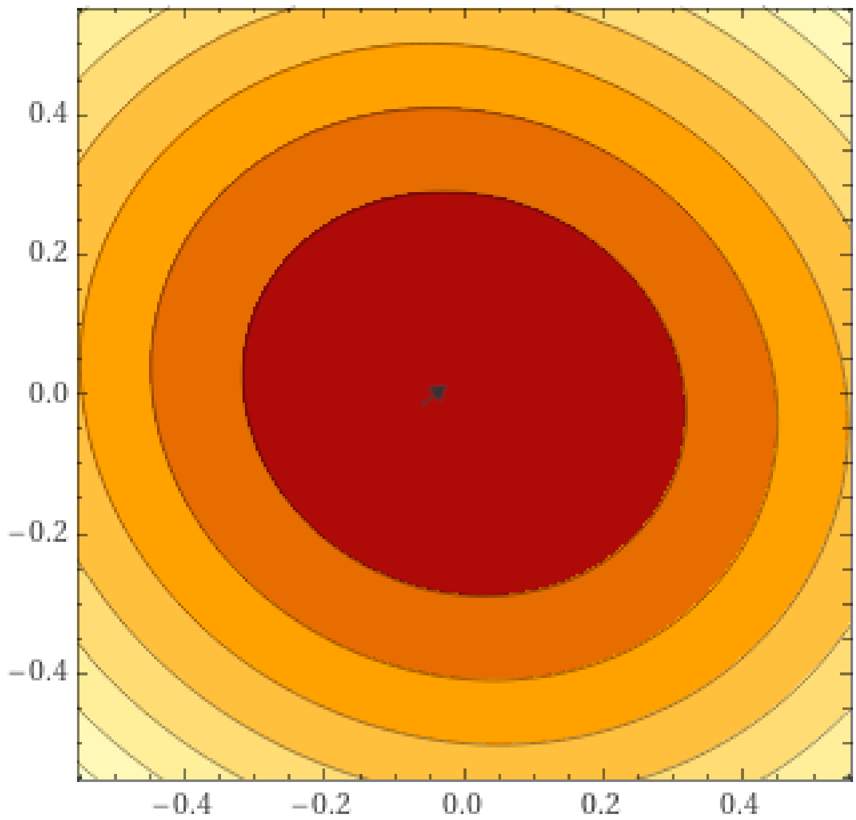
Кол-во итераций	x_k	α_k	p_k	$f(x_k)$
0	1.6721	1	0.5623	0.9812215
1	1.5707	1	-0.6782	1
2	1.5707	1	0.0015	1
3	1.5707	1	0	1
4	1.5707	1	0	1

  Очевидно, что 1 не мининиум функции $\sin(x)$. Это наглядно показывает что классический метод Ньютона не обладает глобальной сходимостью.



– Классический метод Ньютона: $10x^2 + 2xy + 12y^2$
Начальное приближение: $x_0 = (1, 2)$

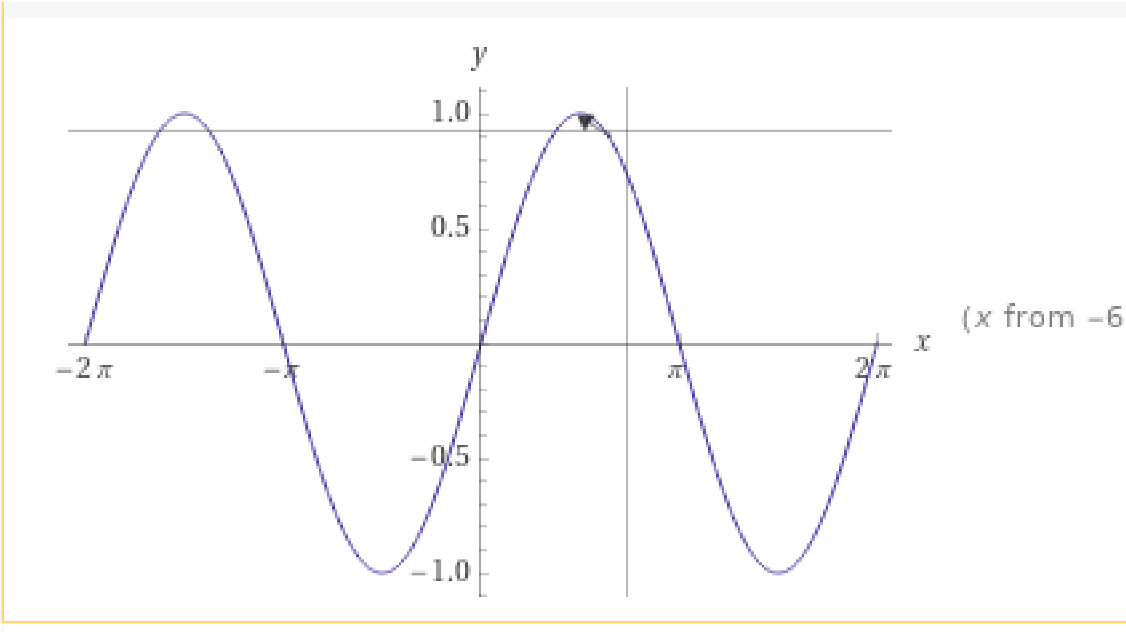
Кол-во итераций	x_{k1}	x_{k2}	α_k	p_{k1}	p_{k2}	$f(x_k)$
0	0.0125	0.0048	1	-1.0023	-1.9999	0
1	0.0063	0.0012	1	-0.6782	0	0
2	0.0063	0.0012	1	0.0015	0	0



– Метод Ньютона с одномерной оптимизацией: $\sin(x)$
Начальное приближение: $x_0 = 1$

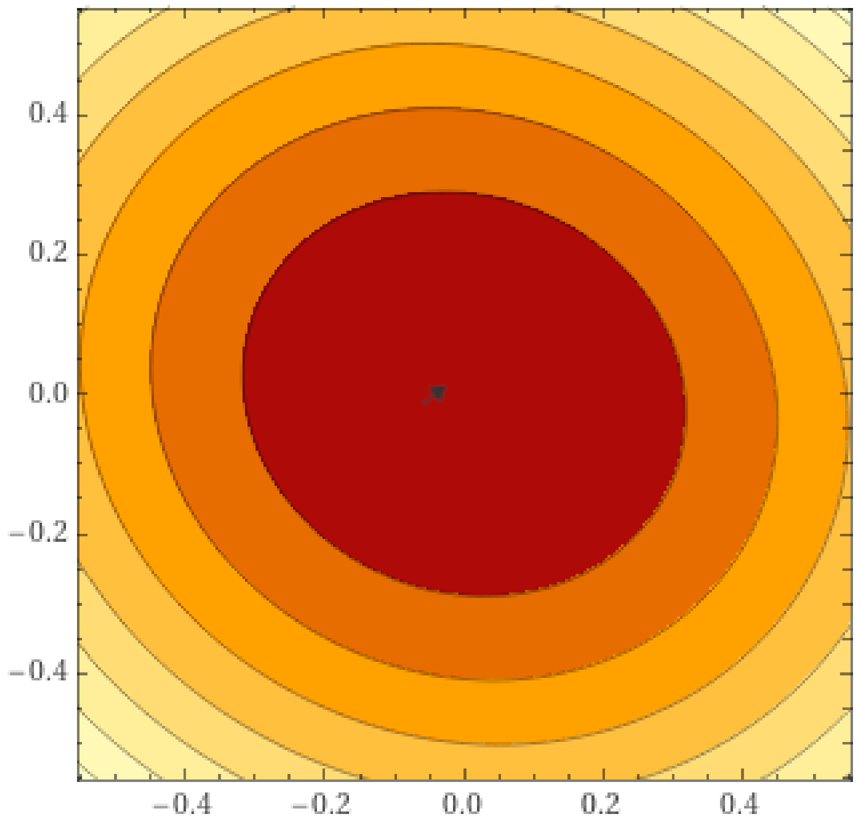
Кол-во итераций	x_k	α_k	p_k	$f(x_k)$
0	-221.48221	-365.16322	0.6621	-0.9999
1	-221.48221	-0.48872	-0.0044	-1

.



– Метод Ньютона с одномерной оптимизацией: $10x^2 + 2xy + 12y^2$
Начальное приближение: $x_0 = (1, 2)$

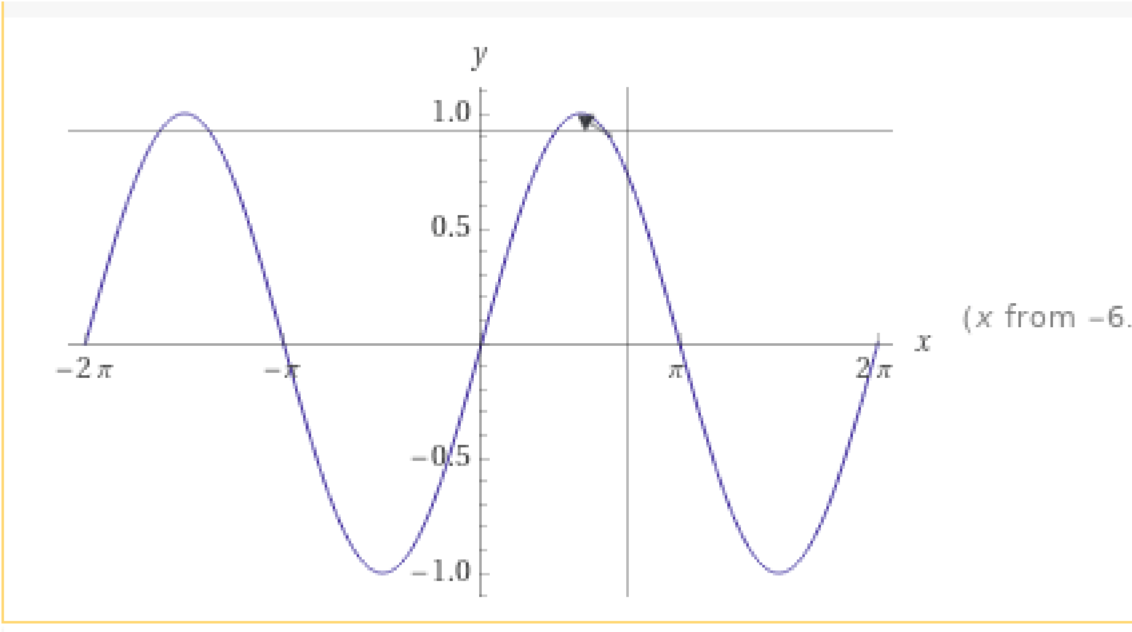
Кол-во итераций	x_{k1}	x_{k2}	α_k	p_{k1}	p_{k2}	$f(x_k)$
0	-0.0031	0.0048	0.9999	-1.0023	-1.9999	0
1	-0.0001	0.0028	-0.90366	-0.10015	-0.00012	0
2	-0.00001	0.0008	-0.00031	-0.0002	-0.00009	0



– Метод Ньютона с напрвлением поиска: $\sin(x)$
Начальное приближение: $x_0 = 1$

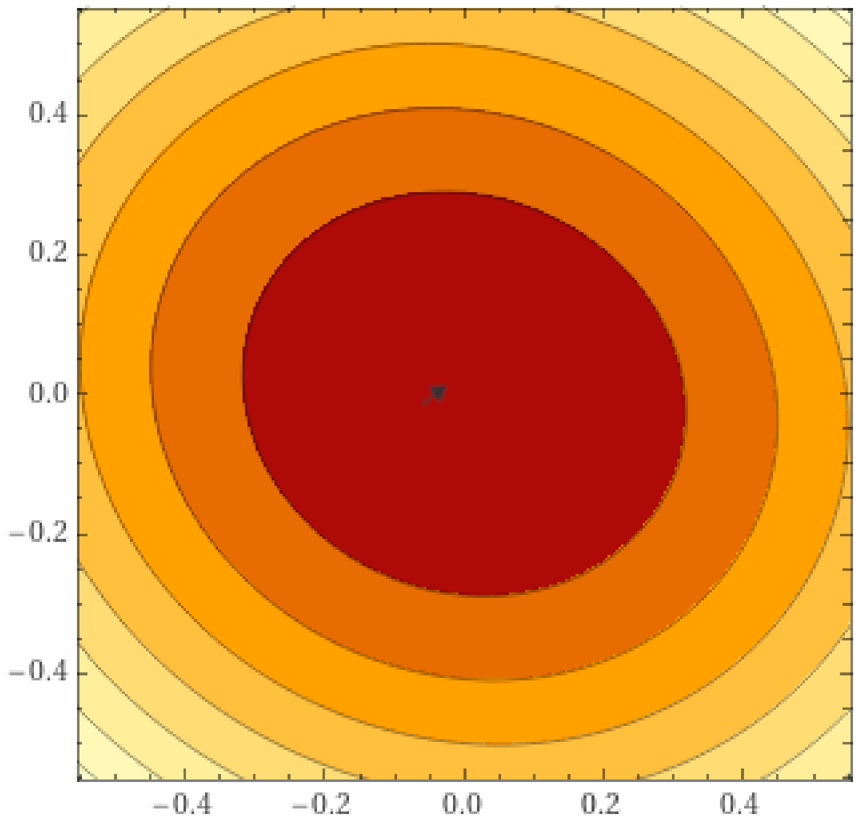
Кол-во итераций	x_k	α_k	p_k	$f(x_k)$
0	-287.16322	-542.88214	0.5621	-0.9999
1	-287.16322	-0.55129	-0.0087	-1

.



– Метод Ньютона с напрвлением поиска: $10x^2 + 2xy + 12y^2$
Начальное приближение: $x_0 = (1, 2)$

Кол-во итераций	x_{k1}	x_{k2}	α_k	p_{k1}	p_{k2}	$f(x_k)$
0	-0.0031	0.0048	0.9999	-1.0023	-1.9999	0
1	-0.0001	0.0028	-0.90366	-0.10015	-0.00012	0
2	-0.00001	0.0008	-0.00031	-0.0002	-0.00009	0



Исследование на заданных фукциях

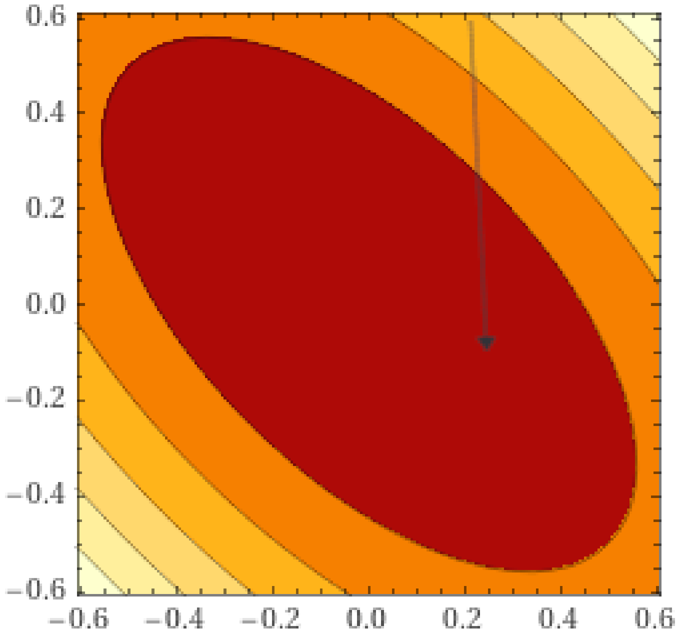
Рассмотрим функции заданные в условии

$$f(x) = x_1^2 + x_2^2 + 1.2x_1x_2$$

$$f(x) = 100(x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2$$

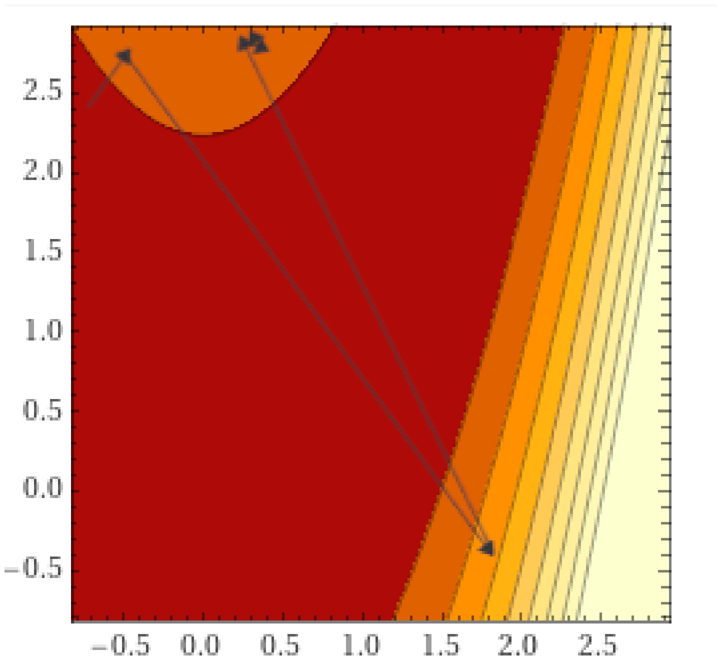
1. Классический метод Ньютона: $f(x) = x_1^2 + x_2^2 + 1.2x_1x_2$ $x_0 = (4, 1)^T$

Кол-во итераций	x_{k1}	x_{k2}	α_k	p_{k1}	p_{k2}	$f(x_k)$
0	-0.0031	0.0048	1	-1.0023	-1.9999	0
1	-0.0001	0.0028	1	-0.10015	-0.00012	0
2	-0.00001	0.0008	1	-0.0002	-0.00009	0



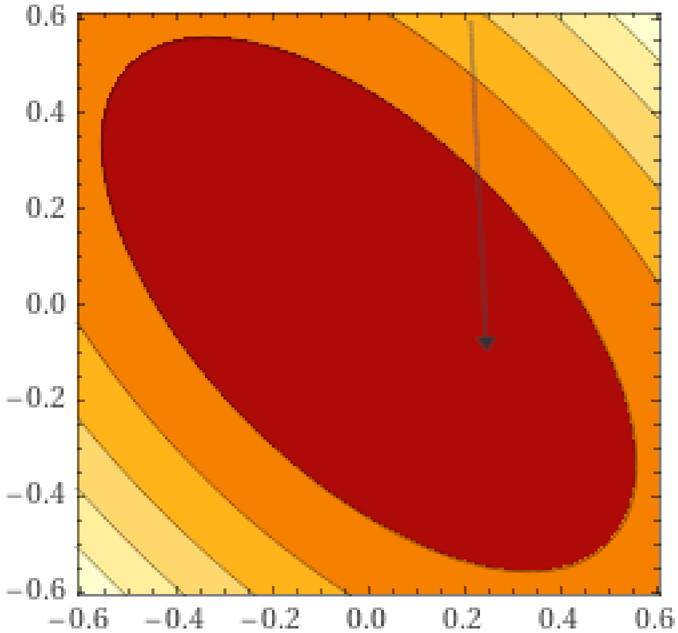
2. Классический метод Ньютона: $f(x) = f(x) = 100(x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2$
   $x_0 = (-1.2, 1)^T$

Кол-во итераций	x_{k1}	x_{k2}	α_k	p_{k1}	p_{k2}	$f(x_k)$
0	1.3031	-0.17048	1	-1.0023	-1.9999	5.8485
1	-3.42121	0.70028	1	-0.10015	-0.00012	-1522.666255
2	0.95581	0.90008	1	-0.0002	-0.00009	0.5234
3	0.97023	0.90048	1	-1.0023	-1.9999	0.49871
4	0.99748	0.99928	1	-0.02015	-0.00012	0.000623
5	0.99851	0.99948	1	-0.0001	-0.00009	0.000043
6	0.99851	0.99948	1	0	0	0.000043



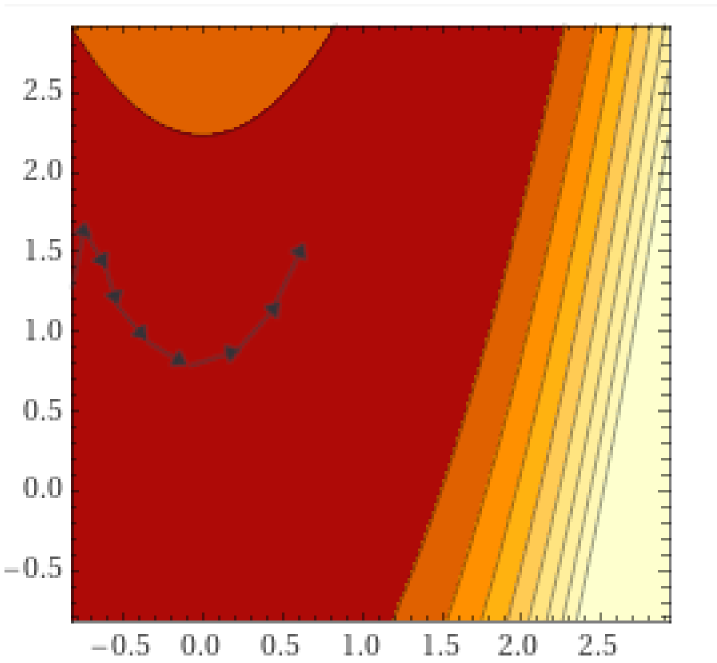
3. Метод Ньютона с одномерной оптимизицией: $f(x) = x_1^2 + x_2^2 + 1.2x_1x_2$
$x_0 = (4, 1)^T$

Кол-во итераций	x_{k1}	x_{k2}	α_k	p_{k1}	p_{k2}	$f(x_k)$
0	-0.000653	0.000687	0.999993	-4.0023	-1.0083	0
1	-0.000078	- 0.000053	1.000031	1.00005	-0.000567	0
2	-0.000078	-0.000053	0.0000242	0.00054	-0.00052	0



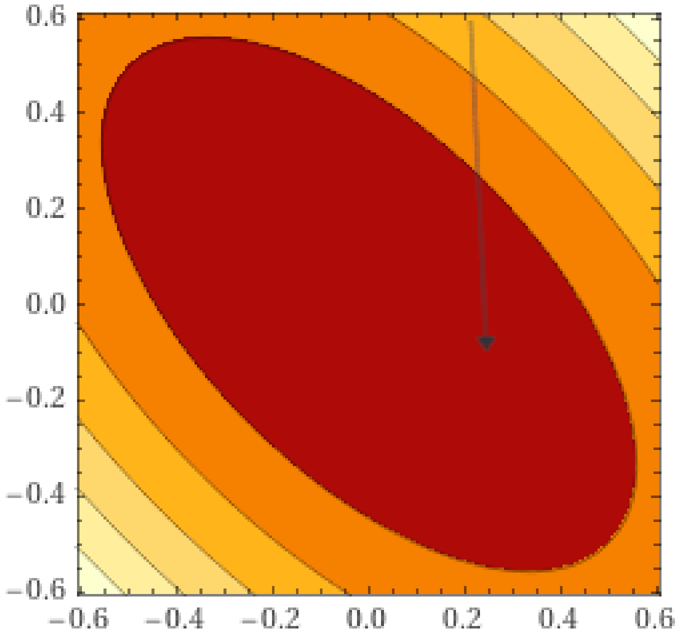
4. Метод Ньютона с одномерной оптимизицией: $f(x) = f(x) = 100(x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2$ $x_0 = (-1.2, 1)^T$

Кол-во итераций	x_{k1}	x_{k2}	α_k	p_{k1}	p_{k2}	$f(x_k)$
0	1.3031	-0.17048	-1.0004	-1.0023	-1.9999	5.8485
1	-3.42121	0.70028	-1.7154	-0.10015	-0.00012	-1522.666255
2	0.95581	0.90008	-2.4304	-0.0002	-0.00009	0.5234
3	0.97023	0.90048	-2.1454	-1.0023	-1.9999	0.49871
4	0.99748	0.99928	1.1396	-0.02415	-0.00012	0.000623
5	0.99851	0.99948	2.5125	1.3836	-0.00009	0.000043
6	0.99851	0.99948	2.5661	0	-0.01224	0.000043
7	0.99748	0.99928	0.8124	-0.02015	-0.00012	0.000010
8	0.99851	0.99948	0.71112	-0.0001	-0.00009	0.000012
9	0.12892	0.99948	0.001124	0	0	0.000008



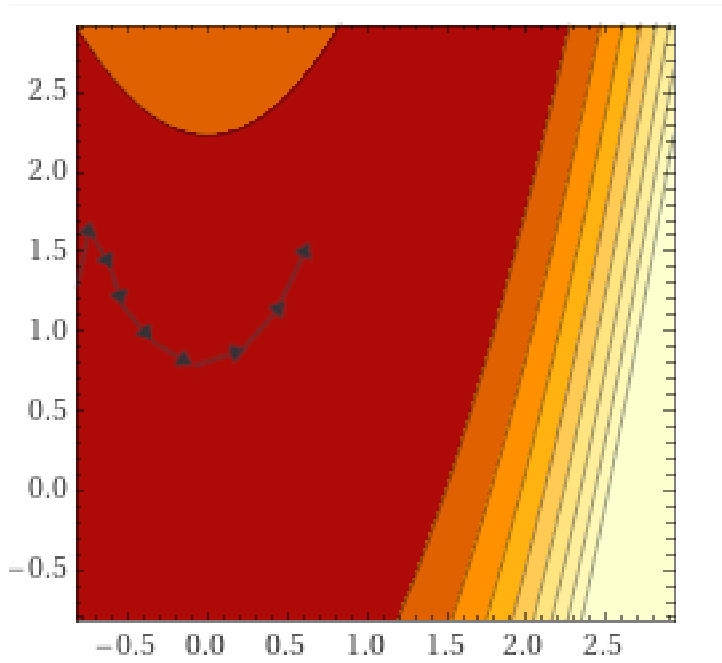
5. Метод Ньютона с напрвлением спуска: $f(x) = x_1^2 + x_2^2 + 1.2x_1x_2$ $x_0 = (4, 1)^T$

Кол-во итераций	x_{k1}	x_{k2}	α_k	p_{k1}	p_{k2}	$f(x_k)$
0	-0.000653	0.000687	0.999993	-4.0023	-1.0083	0
1	-0.000078	- 0.000053	1.000031	1.00005	-0.000567	0
2	-0.000078	-0.000053	0.0000242	0.00054	-0.00052	0



6. Метод Ньютона с напрвлением спуска: $f(x) = f(x) = 100(x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2$ $x_0 = (-1.2, 1)^T$

Кол-во итераций	x_{k1}	x_{k2}	α_k	p_{k1}	p_{k2}	$f(x_k)$
0	1.3031	-0.17048	-1.0004	-1.0023	-1.9999	5.8485
1	-3.42121	0.70028	-1.7154	-0.10015	-0.00012	-1522.666255
2	0.95581	0.90008	-2.4304	-0.0002	-0.00009	0.5234
3	0.97023	0.90048	-2.1454	-1.0023	-1.9999	0.49871
4	0.99748	0.99928	1.1396	-0.02415	-0.00012	0.000623
5	0.99851	0.99948	2.5125	1.3836	-0.00009	0.000043
6	0.99851	0.99948	2.5661	0	-0.01224	0.000043



Выводы

На всех проведенных тестах классический метод Ньютона показал наилучший результат, так как 1 функция является квадратичной и скорость сходимости у нее выше

Квазиньютоновские методы

Предложенные функции:

$$f(x) = 100(x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2$$

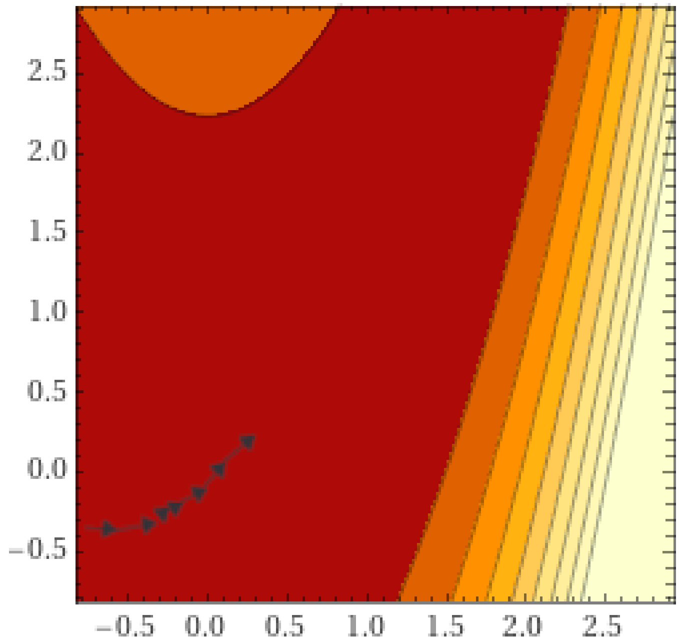
$$f(x) = (x_1^2 + x_2 - 11)^2 + (x_1 + x_2^2 - 7)^2$$

$$f(x) = (x_1 + 10x_2)^2 + 5(x_3 - x_4)^2 + (x_2 - 2x_3)^4 + 10(x_1 - x_4)^4$$

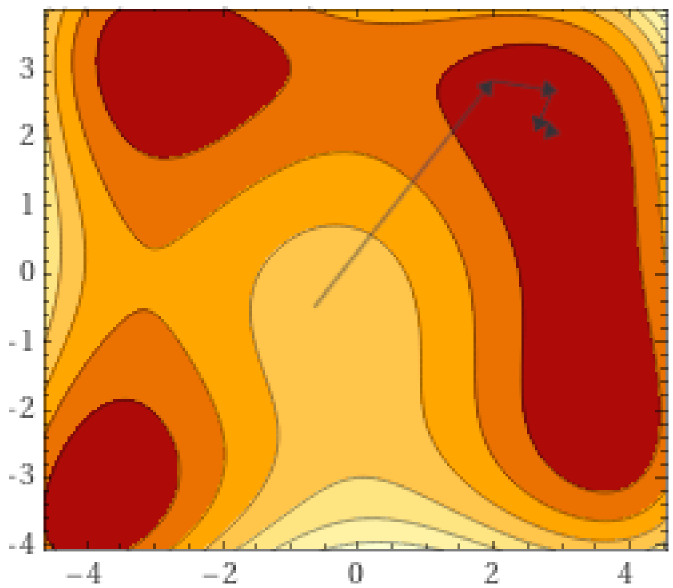
$$f(x) = 100 - \frac{2}{1 + (\frac{x_1-1}{2})^2 + (\frac{x_2-1}{3})^2} - \frac{1}{1 + (\frac{x_1-2}{2})^2 + (\frac{x_2-1}{3})^2}$$

Метод Бройдена-Флетчера-Шено:

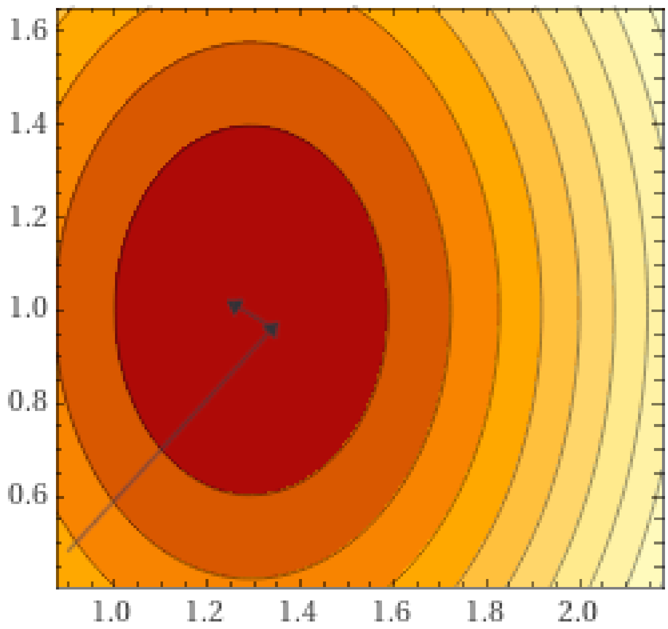
1. $f(x) = 100(x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2$ Начальное приближение $x_0 = (0, 0)$



2. $f(x) = (x_1^2+x_2-11)^2+(x_1+x_2^2-7)^2$ Начальное приближение $x_0 = (0,0)$

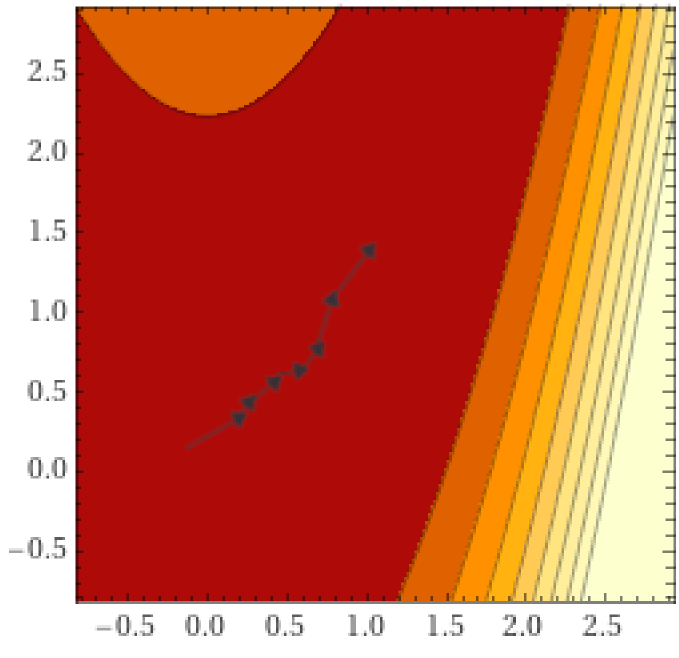


3. $f(x) = 100 - \frac{2}{1+(\frac{x_1-1}{2})^2+(\frac{x_2-1}{3})^2} - \frac{1}{1+(\frac{x_1-2}{2})^2+(\frac{x_2-1}{3})^2}$ Начальное приближение $x_0 = (0,0)$

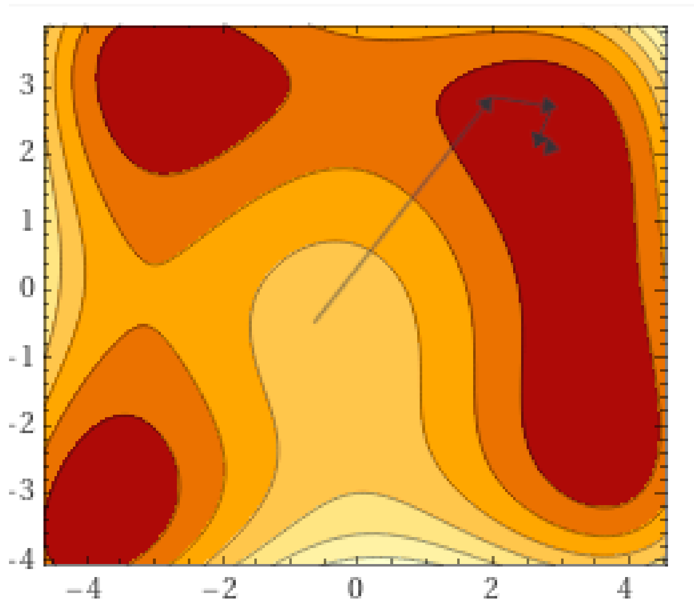


Метод Пауэлла:

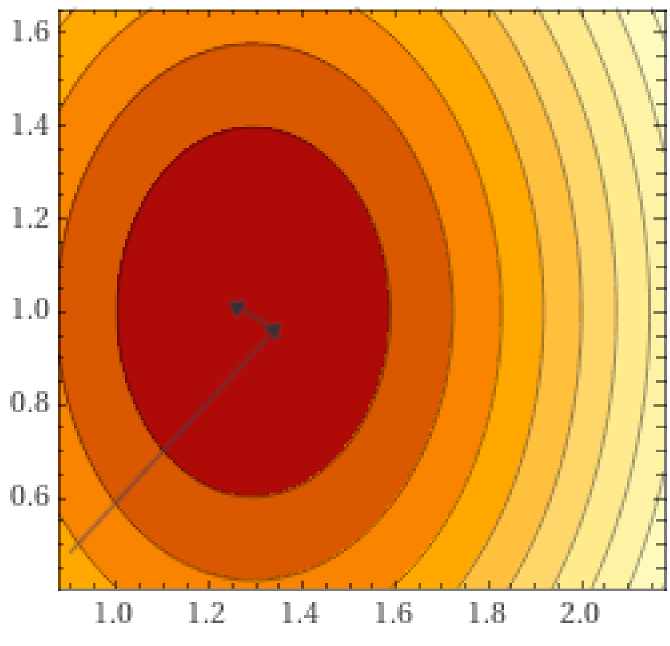
1. $f(x) = 100(x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2$ Начальное приближение $x_0 = (0, 0)$



2. $f(x) = (x_1^2 + x_2 - 11)^2 + (x_1 + x_2^2 - 7)^2$ Начальное приближение $x_0 = (0, 0)$



3. $f(x) = 100 - \frac{2}{1+(\frac{x_1-1}{2})^2+(\frac{x_2-1}{3})^2} - \frac{1}{1+(\frac{x_1-2}{2})^2+(\frac{x_2-1}{3})^2}$ Начальное приближение $x_0 = (0, 0)$



Вывод

Методы Бройдена-Флетчера-Шено и Пауэлла имеют одинаковую скорость сходимости, но стоит заметить, что это зависит от начального приближения. Метод Ньютона сходится быстрее квазиньютоновских методов, но из–за отсутсвия глобальной сходимости он в первом опыте сошелся не в точке минимума.