Данное задание основано на материалах секции, посвященной оптимизационным задачам и методам из решения. Вам понадобится компьютер с установленным интерпретатором Python и подключенными библиотеками NumPy, SciPy и Matplotlib.

Вы научитесь:

1. применять библиотеку SciPy для минимизации функций
2. делать выбор между градиентными и неградиентными методами оптимизации, исходя из особенностей задачи и ваших пожеланий к итоговому решению

Введение

В этом задании вы научитесь решать задачи оптимизации с помощью библиотеки SciPy. Сначала вы решите задачу поиска минимума функции с помощью одного из градиентных методов оптимизации, затем увидите отличия в работе градиентного метода и одного из методов глобальной оптимизации, а в заключение – найдете глобальный минимум негладкой функции, т.е. функции, у которой не всегда определен градиент.

Понимание задачи глобальной оптимизации и отличий градиентных методов, от методов, не использующих градиент, очень полезно в задачах анализа данных, в частности, для подбора параметров алгоритмов.

Материалы

1. Справка по функциям пакета scipy.optimize: <http://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/optimize.html>
2. Matplotlib User Guide: <http://matplotlib.org/users/index.html>

Инструкция по выполнению

Данное задание состоит из трех частей. В каждой ответом будет набор чисел, который вам нужно будет набрать через пробел в текстовом файле и загрузить. Десятичные дроби записывайте через точку.

**Задача 1. Минимизация гладкой функции**

1. Рассмотрим все ту же функцию из задания по линейной алгебре: f(x) = sin(x / 5) \* exp(x / 10) + 5 \* exp(-x / 2), но теперь уже на промежутке [1, 30]
2. В первом задании будем искать минимум этой функции на заданном промежутке с помощью scipy.optimize. Разумеется, в дальнейшем вы будете использовать методы оптимизации для более сложных функций, а f(x) мы рассмотрим как удобный учебный пример.
3. Напишите на Питоне функцию, вычисляющую значение f(x) по известному x. Будьте внимательны: не забывайте про то, что по умолчанию в питоне целые числа делятся нацело, и о том, что функции sin и exp нужно импортировать из модуля math.
4. Изучите примеры использования scipy.optimize.minimize в документации Scipy (см. "Материалы")
5. Попробуйте найти минимум, используя стандартные параметры в функции scipy.optimize.minimize (т.е. задав только функцию и начальное приближение). Попробуйте менять начальное приближение и изучить, меняется ли результат.
6. Укажите в scipy.optimize.minimize в качестве метода BFGS (один из самых точных в большинстве случаев градиентных методов оптимизации), запустите из начального приближения x=2. Градиент функции при этом указывать не нужно – он будет оценен численно. Полученное значение функции в точке минимума - ваш первый ответ по заданию 1, его надо записать с точностью до 2 знака после запятой.
7. Теперь измените начальное приближение на x=30. Значение функции в точке минимума - ваш второй ответ по заданию 1, его надо записать через пробел после первого, с точностью до 2 знака после запятой.
8. Стоит обдумать полученный результат. Почему ответ отличается в зависимости от начального приближения? Если нарисовать график функции (например, как это делалось в видео, где мы знакомились с Numpy, Scipy и Matplotlib), можно увидеть, в какие именно минимумы мы попали. В самом деле, градиентные методы обычно не решают задачу глобальной оптимизации, поэтому результаты работы ожидаемые и вполне корректные.

**Задача 2. Глобальная оптимизация**

1. Теперь попробуем применить к той же функции f(x) метод глобальной оптимизации — дифференциальную эволюцию.
2. Изучите документацию и примеры использования функции scipy.optimize.differential\_evolution.
3. Обратите внимание, что границы значений аргументов функции представляют собой список кортежей (list, в который помещены объекты типа tuple). Даже если у вас функция одного аргумента, возьмите границы его значений в квадратные скобки, чтобы передавать в этом параметре список из одного кортежа, т.к. в реализации scipy.optimize.differential\_evolution длина этого списка используется чтобы определить количество аргументов функции.
4. Запустите поиск минимума функции f(x) с помощью дифференциальной эволюции на промежутке [1, 30]. Полученное значение функции в точке минимума - ответ в задаче 2. Запишите его с точностью до второго знака после запятой. В этой задаче ответ - только одно число.
5. Заметьте, дифференциальная эволюция справилась с задачей поиска глобального минимума на отрезке, т.к. по своему устройству она предполагает борьбу с попаданием в локальные минимумы.
6. Сравните количество итераций, потребовавшихся BFGS для нахождения минимума при хорошем начальном приближении, с количеством итераций, потребовавшихся дифференциальной эволюции. При повторных запусках дифференциальной эволюции количество итераций будет меняться, но в этом примере, скорее всего, оно всегда будет сравнимым с количеством итераций BFGS. Однако в дифференциальной эволюции за одну итерацию требуется выполнить гораздо больше действий, чем в BFGS. Например, можно обратить внимание на количество вычислений значения функции (nfev) и увидеть, что у BFGS оно значительно меньше. Кроме того, время работы дифференциальной эволюции очень быстро растет с увеличением числа аргументов функции.

Задача 3. Минимизация негладкой функции

1. Теперь рассмотрим функцию h(x) = int(f(x)) на том же отрезке [1, 30], т.е. теперь каждое значение f(x) приводится к типу int и функция принимает только целые значения.
2. Такая функция будет негладкой и даже разрывной, а ее график будет иметь ступенчатый вид. Убедитесь в этом, построив график h(x) с помощью matplotlib.
3. Попробуйте найти минимум функции h(x) с помощью BFGS, взяв в качестве начального приближения x=30. Получившееся значение функции – ваш первый ответ в этой задаче.
4. Теперь попробуйте найти минимум h(x) на отрезке [1, 30] с помощью дифференциальной эволюции. Значение функции h(x) в точке минимума – это ваш второй ответ в этом задании. Запишите его через пробел после предыдущего.
5. Обратите внимание на то, что полученные ответы различаются. Это ожидаемый результат, ведь BFGS использует градиент (в одномерном случае – производную) и явно не пригоден для минимизации рассмотренной нами разрывной функции. Попробуйте понять, почему минимум, найденный BFGS, именно такой (возможно в этом вам поможет выбор разных начальных приближений).

Выполнив это задание, вы увидели на практике, чем поиск минимума функции отличается от глобальной оптимизации, и когда может быть полезно применить вместо градиентного метода оптимизации метод, не использующий градиент. Кроме того, вы попрактиковались в использовании библиотеки SciPy для решения оптимизационных задач, и теперь знаете, насколько это просто и удобно.