**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации**

федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования

**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ ИТМО»**

**Отчет по лабораторной работе №4**

Авторы: Зюзько Роман, Иванов Дмитрий, Пак Руслан

Факультет: ФИТиП

Группы: M32341, М32351

Преподаватель:



Санкт-Петербург 2021

**Цель лабораторной работы**

Реализовать:

* алгоритм Ньютона (классически, с одномерным поиском, с направлением спуска)
* квазиньютоновский метод Давидона-Флетчера-Пауэлла
* квазиньютоновский метод Пауэлла
* метод Марквардта (двумя вариантами)

Исследовать:

* работу методов на двух функциях с заданным начальным приближением
* работу квазиньютоновских методов в сравнении с наилучшим методом Ньютона
* работу метода Марквардта на минимизации многомерной функции Розенброка (𝑛 = 100) в сравнении с наилучшим методом Ньютона

**Функции**

**1.**

2.

3.

**Вычислительные схемы методов**

Методы Ньютона

Метод Ньютона относится к классу итерационных методов. Если целевая функция

дважды дифференцируема в пространстве , то в процессе минимизации можно использовать Гессиан функции.

За счет использования Гессиана повышается скорость сходимости итерационной последовательности. На каждой итерации происходит квадратичная аппроксимация целевой функции в некоторой окрестности точки.

Для текущей точки в итерационном процессе происходит аппроксимация квадратичной функции, однако следующей точку релаксационной последовательности определяется как точка минимума аппроксимирующей квадратичной функции, описанной выше. Аппроксимация основана на формуле Тейлора. Пренебрегая остаточным членом в форме Пеано, запишем формулу Тейлора и обозначим за

Функция имеет одну точку в которой достигается минимум.

Условие минимума:

Тогда точка релаксационной последовательности определяется как:

- направление спуска.

Если положительно определенная, то принято называть ньютоновским направлением спуска.

В классическом варианте

***Классический***

Алгоритм минимизации:

1. Рассчитать градиент функции в точке и рассчитать Гессиан функции в точке

2. Решить систему линейных алгебраических уравнений:

3. Произвести пересчет

4. Минимум найден, если . Это эквивалентно . Иначе, повторить алгоритм с пункта 1.

Классический метод Ньютона не обладает свойством глобальной сходимости, так как если начальная точка достаточно далека от , то метод не сходится.

Имеет квадратичную локальную сходимость при условии того, что Гессиан функции удовлетворяет в окрестности условию Липшица. Таким образом, в малой окрестности метод будет сходится значительно быстрее.

***С одномерным спуском***

Точку минимума можно считать вспомогательным приближением.

xek - вспомогательная точка для построения релаксационной последовательности {xk} Тогда точку релаксационной последовательности можно определить как: xk = xk−1 + αk · (xek − xk−1) = xk−1 + αk · pk, где αk = minα f(xk−1 + α · pk) и pk это направление спуска. Алгоритм минимизации аналогичен классическому, однако xk определяется как: xk = xk−1 + αk · pk Эффективность методы существенно зависит от того, является ли pk направлением спуска. Метод обладает свойством глобальной сходимости.

***С направлением спуска***

Данный метод позволяет избавится от ошибочного выбора направления возрастания функции. Ошибочный выбор связан с точками максимума функции и седловыми точками. В этих случаях необходимо проверять является ли pk направлением спуска. pk - направление спуска, то (pk) T · ∇f(xk) < 0 Если (pk) T · ∇f(xk) < 0, то pk не является направлением спуска. В этом случае следует использовать антиградиент. Тогда зададим pk следующим образом: pk = ( pk,(pk) T · ∇f(xk) < 0 −∇f(xk),(pk) T · ∇f(xk) > 0 Для поиска оптимального ak можно использовать одномерный поиск. Остальные шаги аналогичны предыдущим методам. Метод обладает свойством глобальной сходимости.

***Квазиньютоновские методы***

Квазиньютоновские методы объединяют в себе достоинства метода Ньютона и метода наискорейшего спуска. Они не требуют обращений к Гессиану, однако при этом сохраняется высокая сходимость итерационной последовательности. Общий вид релаксационной последовательности: xk = xk−1 + αk · pk pk - направление спуска. Определяется как: pk = Gk · wk, k ∈ N wk = −∇f(xk−1) - антиградиент функции Gk - положительно определенная матрица порядка (n×n) специального вида для каждого квазиньютоновского метода Вычисление матриц Gk Gk−→∞ −→ H−1 (x∗) - матрица Gk при достаточно больших k должна сходится к обратной матрице Гессе. x∗ точка минимума целевой функции. На первой итерации матрица Gk является единичной, таким образом направление pk равняется антиградиенту. За счет того, что матрица Gk на завершающей стадии поиска близка к H−1 (xk−1) мы можем ожидать высокую сходимость итерационной последовательности, присущую методу Ньютона.

Параметр αk чаще всего выбирается как исчерпывающий спуск в направлении pk, однако возможно задавать ak = 1 или применять дробление шага. Основная идея квазиньютоновских методов заключается в том, что специальная матрица Gk должна быть достаточно близка к H−1 (xk−1) и вычисление происходит за счет аппроксимации H−1 (xk−1). Выбор удачной аппроксимации позволяет существенно сократить объем вычислений по сравнению с обращением к Гессиану, таким образом упрощается процедура построения направления спуска pk. Различные квазиньютоновские методы определяет выбор "поправочной"матрицы 4Gk, используемой для вычисления Gk+1. Квазиньютоновские методы обладают глобальной сходимостью только в случае применения рестартов. Имеют сверхлинейную скорость сходимости, однако если Гессиан функции удовлетворяет условию Липшица, то в результате будет достигнута квадратичная скорость.

***Метод Давидона-Флэтчра-Пауэлла***

Данный метод обладает рядом свойств, опишем их подробнее: 1. Gk сохраняет положительную определенность: если Gk > 0, то и Gk+1 > 0, при условии (4xk) T 4 wk > 0 2. Если Gk симметричная, то и Gk+1 симметричная 3. При минимизации квадратичной функции с положительно определенной матрицей A метод сводится к методу сопряженных направлений. Следовательно, метод дает точное решение не более чем за n итераций. 4. Матрицы Gk вычисленные по методу связаны равенством: Gk · A · pi = pi . При k = n, n векторов pi являются собственными для симметричной матрицы Gn · A, а собственные значения равны единице. Таким образом, Gn оказывается обратной к Гессиану квадратичной функции. 5. Если целевая функция не квадратичная, то метод не позволяет найти минимум за конечное число итераций. Для уменьшения ошибки и вероятности появления линейно зависимых направлений спуска, принято каждые n итераций принимать Gn = I (единичной матрице) 6. Если целевая функция является квадратичной с положительно определенным Гессианом, то метод после n итераций дает:

Алгоритм минимизации: G1 = I - единичная матрица. w1 = −∇f(x0) p1 = w1 α1 = minα f(x0 + αp1) x1 = x0 + α1p1 4x1 = x1 − x0 ∀k > 1 wk = −∇f(xk−1 4wk = wk − wk−1 vk = Gk−1 4 wk Gk = Gk−1 − 4xk−1(4xk−1) T h4wk,4xk−1i − vk(vk) T hvk,4wki pk = Gk · wk αk = minα f(xk−1 + αk · pk xk = xk−1 + αk · pk 4xk = xk − xk−1 Условие остановки: || 4 xk|| < eps Метод крайней чувствителен к точности одномерного поиска.

***Метод Пауэлла***

Метод Пауэлла Аналогичен методу ДФП, однако имеет другое реккурентное соотношение для вычисления матриц Gk