Домашняя работа №8

Головин Вячеслав Сергеевич (ВШЭ, МОАД, 5 курс)

15 апреля 2022 г.

[1]:
```
%matplotlib inline

import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

plt.rc('figure', dpi=300)
```

Как и в прошлом домашнем задании, будем рассматривать две функции:

1. квадратичная функция

$$f(x_1, x_2) = 100\,(x_1 - x_2)^2 + 5 \sum_{j=2}^{n} (1 - x_j)^2\,;$$

2. функция Розенброка

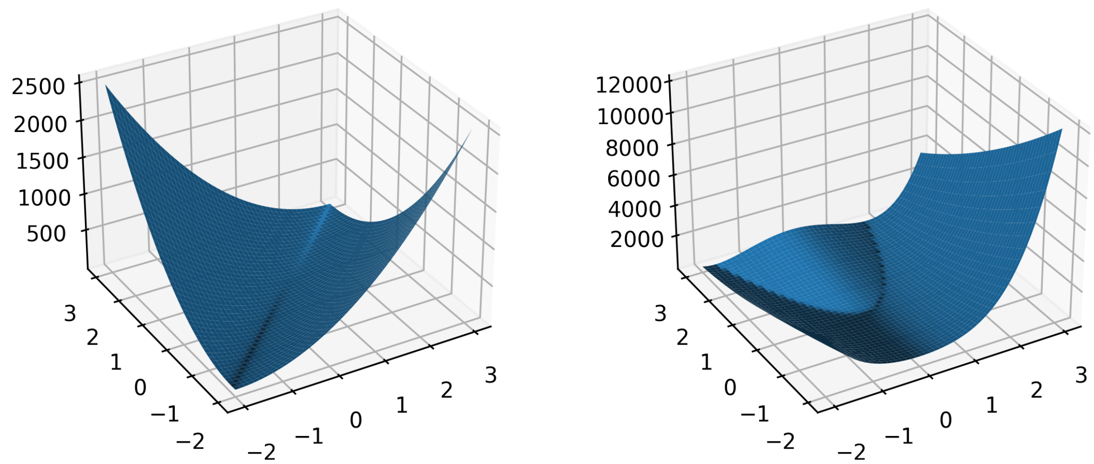
$$f(x_1, x_2) = 100\left(x_2 - x_1^2\right)^2 + 5\,(1 - x_1)^2\,.$$

[2]:
```
def quadratic(*args):
    return (100 * (args[0] - args[1])**2
            + 5 * sum((1 - xi)**2 for xi in args[1:]))

def quadratic_derivatives(*args):
    derivatives = [
        200 * (args[0] - args[1]),
        -200 * (args[0] - args[1]) - 10 * (1 - args[1])
    ]
    return derivatives + [-10 * (1 - xi) for xi in args[2:]]

def rosenbrock(x1, x2):
    return 100 * (x2 - x1**2)**2 + 5 * (1 - x1)**2

def rosenbrock_derivatives(x1, x2):
    t = x2 - x1**2
    df_dx1 = -400 * x1 * t + 5 * (x1 - 1)
    df_dx2 = 200 * t
    return [df_dx1, df_dx2]
```

Построим их графики:

```
[3]: mesh = np.meshgrid(np.linspace(-2, 3), np.linspace(-2, 3))
     fig = plt.figure(figsize=(9, 4))
     ax = fig.add_subplot(121, projection='3d', azim=-120)
     ax.plot_surface(*mesh, quadratic(*mesh))
     ax2 = fig.add_subplot(122, projection='3d', azim=-120)
     ax2.plot_surface(*mesh, rosenbrock(*mesh))
```

```
[3]: <mpl_toolkits.mplot3d.art3d.Poly3DCollection at 0x7efbea10c0a0>
```



Реализуем 3 квазиньютоновских метода: - метод Бройдена (одноранговая коррекция), - метод Давидона-Флетчера-Пауэлла, - метод Бройдена-Флетчера-Гольдфарба-Шенно.

В этих методах обновление текущего решения x_k осуществляется по правилу

$$\vec{x}_k = \vec{x}_k - hH_k^{-1}\nabla f(\vec{x}_k),$$

где H_k – текущая аппроксимация Гессиана $\nabla\nabla f(\vec{x}_k)$. Эта аппроксимация, в свою очередь, обновляется на каждой итерации с помощью векторов $\vec{\delta}_k = \vec{x}_{k+1} - \vec{x}_k$ и $\vec{\gamma}_k = \nabla f(\vec{x}_{k+1}) - \nabla f(\vec{x}_k)$.

Как и в прошлой работе, значение коэффициента h может выбираться одним из 3 способов. Соответствующие функции представлены ниже.

[4]:
```python
def golden_section_search(f, a, b, atol=None):
    """
    Найти минимум функции `f` на интервале [`a`, `b`] с точностью `atol`
    методом золотого сечения. Точность по умолчанию `1e-4 * (b - a)`.
    """
    # точность по умолчанию
    if atol is None:
        atol = (b - a) * 1e-4
    # коэффициент для разбиения отрезка
    phi = (np.sqrt(5) - 1) / 2

    # начальное разбиение
    c = b - (b - a) * phi
    f_c = f(c)
    d, f_d = None, None

    while (b - a) > atol:
        # новая точка
        if c is None:
            c = b - (b - a) * phi
            f_c = f(c)
        else:
            assert d is None
            d = a + (b - a) * phi
            f_d = f(d)

        # выбор нового интервала
        if f_c < f_d:
            b, d = d, c
            f_d = f_c
            c = None
        else:
            a, c = c, d
            f_c = f_d
            d = None

    return a + (b - a) / 2
```

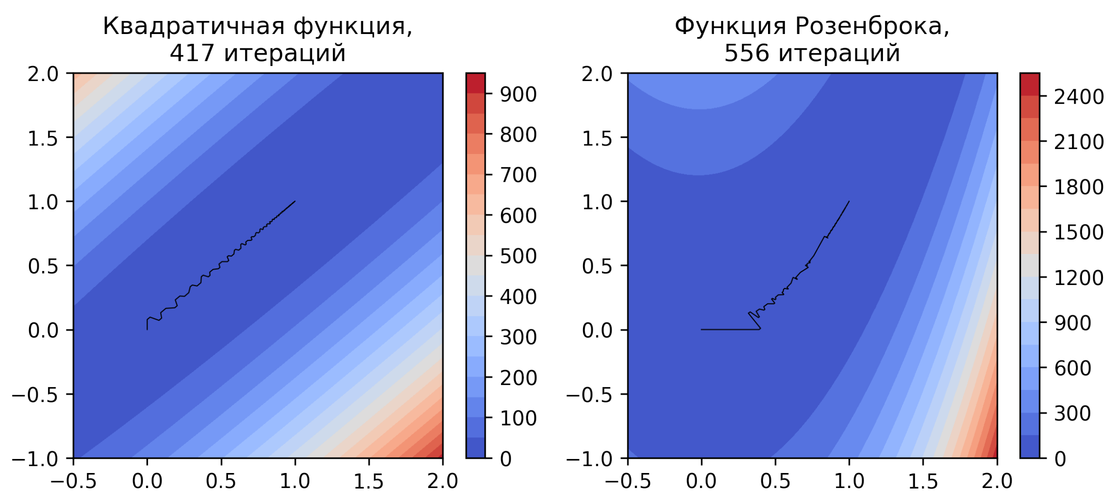
[5]:
```
def choose_h(f, x, grad, h_method):
    if h_method == 'min':
        # поиск h из условия минимума
        h = 1.0
        f_x = f(*x)
        while True:
            h = golden_section_search(
                lambda h: f(*(x_i - h * grad_x_i
                            for x_i, grad_x_i in zip(x, grad))),
                a=0,
                b=h
            )
            if f(*(x - h * grad)) < f_x:
                break
    elif isinstance(h_method, (int, float)):
        # постоянное значение h
        h = h_method
    else:
        # поиск h через двойное неравенство
        assert len(h_method) == 2
        alpha = h_method[0]
        beta = h_method[1]
        h_min, h_max = 0, 1
        grad_norm = np.linalg.norm(grad)
        f_x = f(*x)
        h = 1

        # двоичный поиск
        while True:
            decrease = f_x - f(*(x - grad * h))
            dot_product = grad_norm**2 * h
            if alpha * dot_product > decrease:
                h_max = h
            elif beta * dot_product < decrease:
                h_min = h
            else:
                break
            h = (h_min + h_max) / 2

    return h
```

1 Метод Бройдена

[6]:
```
def broyden(f, fdot, x0, h_method=1e-3, grad_min=1e-4, restart_period=1,
            maxiter=10000, full_output=True):
    # инициализация
    n = len(x0)                       # размерность пространства
    x = np.array(x0, dtype='float')   # текущее решение
    H = np.eye(n)                     # (аппроксимация Гессиана)^-1
    grad = np.array(fdot(*x))         # градиент
    solutions = [x.copy()]            # все решения
    num_iterations = 0                # число итераций после рестарта

    while np.linalg.norm(grad) >= grad_min:
        # рестарт
        if num_iterations == n * restart_period:
            H = np.eye(n)
            num_iterations = 0

        h = choose_h(f, x, grad, h_method)

        # обновляем решение
        delta = -h * np.dot(H, grad)
        x += delta
        solutions.append(x.copy())
        g_new = np.array(fdot(*x))
        gamma = g_new - grad
        grad = g_new

        # обновляем H
        residual = delta - np.dot(H, gamma)
        H += np.outer(residual, residual) / np.dot(residual, gamma)
        num_iterations += 1

        # проверяем полное число итераций
        if len(solutions) >= maxiter:
            raise Exception(
                f'Решение не сошлось после {maxiter} итераций.')

    if full_output:
        return solutions
    return x
```

[7]:
```
mesh = np.meshgrid(np.linspace(-0.5, 2), np.linspace(-1, 2))
x0 = [0.0, 0.0]

fig, [ax1, ax2] = plt.subplots(ncols=2)
fig.set_size_inches(9, 3.5)

sol = broyden(quadratic, quadratic_derivatives, x0, grad_min=1e-4,
              h_method=(0.1, 0.9), full_output=True)
cn = ax1.contourf(*mesh, quadratic(*mesh), levels=20, cmap=plt.cm.coolwarm)
sol = np.array(sol)
ax1.plot(sol[:, 0], sol[:, 1], 'k-', lw=0.5)
fig.colorbar(cn, ax=ax1)
ax1.set_title(f'Квадратичная функция,\n{len(sol)} итераций')

sol = broyden(rosenbrock, rosenbrock_derivatives, x0, grad_min=1e-4,
              h_method=(0.1, 0.9), full_output=True)
cn = ax2.contourf(*mesh, rosenbrock(*mesh), levels=20, cmap=plt.cm.coolwarm)
sol = np.array(sol)
ax2.plot(sol[:, 0], sol[:, 1], 'k-', lw=0.5)
fig.colorbar(cn, ax=ax2)
ax2.set_title(f'Функция Розенброка,\n{len(sol)} итераций')
```

[7]:
```
Text(0.5, 1.0, 'Функция Розенброка,\n556 итераций')
```

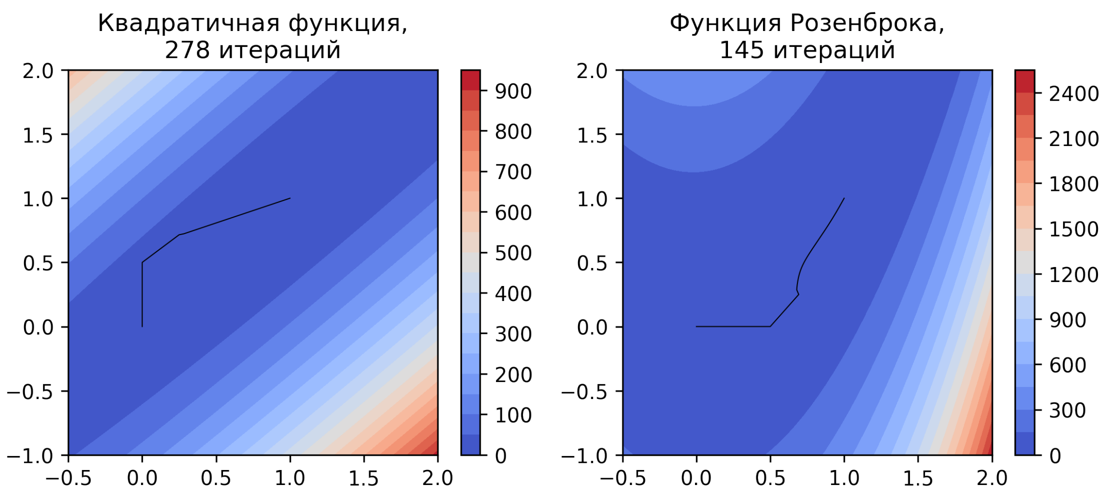


2 Метод Давидона-Флетчера-Пауэлла,

[8]:
```python
def dfp(f, fdot, x0, h_method=1.0, grad_min=1e-4, maxiter=10000,
        full_output=True):
    # инициализация
    n = len(x0)                         # размерность пространства
    x = np.array(x0, dtype='float')     # текущее решение
    H = np.eye(n)                       # (аппроксимация Гессиана)^-1
    grad = np.array(fdot(*x))           # градиент
    solutions = [x.copy()]              # все решения

    while np.linalg.norm(grad) >= grad_min:
        h = choose_h(f, x, grad, h_method)

        # обновляем решение
        delta = -h * np.dot(H, grad)
        x += delta
        solutions.append(x.copy())
        g_new = np.array(fdot(*x))
        gamma = g_new - grad
        grad = g_new

        # обновляем H
        u = np.dot(H, gamma)
        H += (1 / np.dot(gamma, delta) * np.outer(delta, delta)
              - 1 / np.dot(u, gamma) * np.outer(np.dot(H, gamma), u))

        # проверяем полное число итераций
        if len(solutions) >= maxiter:
            raise Exception(
                f'Решение не сошлось после {maxiter} итераций.')

    if full_output:
        return solutions
    return x
```

[9]:
```
fig, [ax1, ax2] = plt.subplots(ncols=2)
fig.set_size_inches(9, 3.5)

sol = dfp(quadratic, quadratic_derivatives, x0, grad_min=1e-4,
          h_method=0.05, full_output=True)
cn = ax1.contourf(*mesh, quadratic(*mesh), levels=20, cmap=plt.cm.coolwarm)
sol = np.array(sol)
ax1.plot(sol[:, 0], sol[:, 1], 'k-', lw=0.5)
fig.colorbar(cn, ax=ax1)
ax1.set_title(f'Квадратичная функция,\n{len(sol)} итераций')

sol = dfp(rosenbrock, rosenbrock_derivatives, x0, grad_min=1e-4,
          h_method=0.1, full_output=True)
cn = ax2.contourf(*mesh, rosenbrock(*mesh), levels=20, cmap=plt.cm.coolwarm)
sol = np.array(sol)
ax2.plot(sol[:, 0], sol[:, 1], 'k-', lw=0.5)
fig.colorbar(cn, ax=ax2)
ax2.set_title(f'Функция Розенброка,\n{len(sol)} итераций')
```

[9]:
```
Text(0.5, 1.0, 'Функция Розенброка,\n145 итераций')
```



3 Метод Бройдена-Флетчера-Гольдфарба-Шенно

[10]:
```
def bfgs(f, fdot, x0, h_method=1.0, grad_min=1e-4, maxiter=10000,
         full_output=True):
    # инициализация
    n = len(x0)                       # размерность пространства
    x = np.array(x0, dtype='float')   # текущее решение
    H = np.eye(n)                     # (аппроксимация Гессиана)^-1
    grad = np.array(fdot(*x))         # градиент
    solutions = [x.copy()]            # все решения

    while np.linalg.norm(grad) >= grad_min:
        h = choose_h(f, x, grad, h_method)

        # обновляем решение
        delta = -h * np.dot(H, grad)
        x += delta
        solutions.append(x.copy())
        g_new = np.array(fdot(*x))
        gamma = g_new - grad
        grad = g_new

        # обновляем H
        u = np.dot(H, gamma)
        m = np.dot(u, gamma)
        G = np.outer(u, delta)
        H += (1 / m * (G + G.T)
              - 1 / m * (1 + np.dot(gamma, delta) / m) * np.outer(u, u))

        # проверяем полное число итераций
        if len(solutions) >= maxiter:
            raise Exception(
                f'Решение не сошлось после {maxiter} итераций.')

    if full_output:
        return solutions
    return x
```

[11]:
```
fig, [ax1, ax2] = plt.subplots(ncols=2)
fig.set_size_inches(9, 3.5)

sol = bfgs(quadratic, quadratic_derivatives, x0, grad_min=1e-4,
           h_method=0.1, full_output=True)
cn = ax1.contourf(*mesh, quadratic(*mesh), levels=20, cmap=plt.cm.coolwarm)
sol = np.array(sol)
ax1.plot(sol[:, 0], sol[:, 1], 'k-', lw=0.5)
fig.colorbar(cn, ax=ax1)
ax1.set_title(f'Квадратичная функция,\n{len(sol)} итераций')

sol = bfgs(rosenbrock, rosenbrock_derivatives, x0, grad_min=1e-4,
           h_method=0.1, full_output=True)
cn = ax2.contourf(*mesh, rosenbrock(*mesh), levels=20, cmap=plt.cm.coolwarm)
sol = np.array(sol)
ax2.plot(sol[:, 0], sol[:, 1], 'k-', lw=0.5)
fig.colorbar(cn, ax=ax2)
ax2.set_title(f'Функция Розенброка,\n{len(sol)} итераций')
```

[11]:
```
Text(0.5, 1.0, 'Функция Розенброка,\n559 итераций')
```