Домашняя работа №8

Головин Вячеслав Сергеевич (ВШЭ, МОАД, 5 курс)

25 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

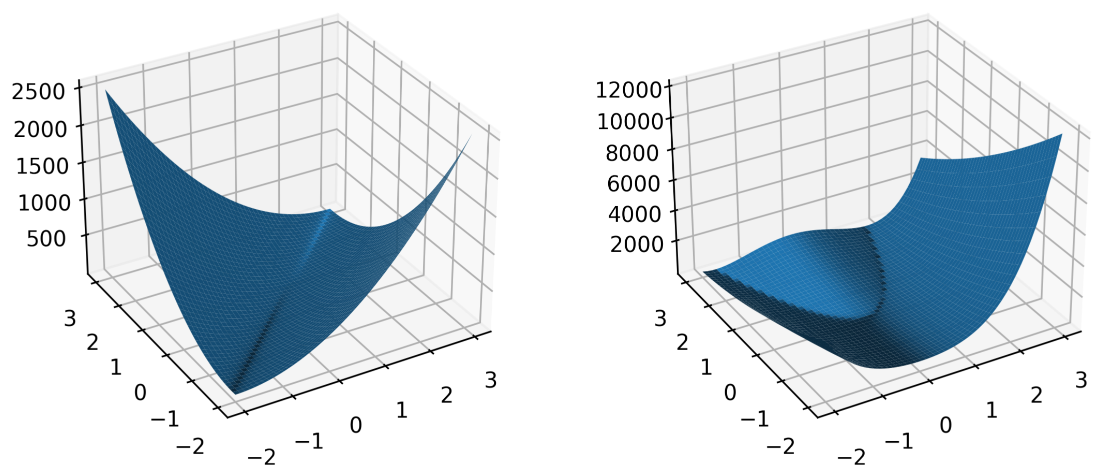
$$f(x_1, x_2) = 100\left(x_2 - x_1^2\right)^2 + 5\,(1 - x_1)^2\,.$$

[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 0x7f15050c2e20>`



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]:

```python
def choose_h(f, x, grad, h_method, atol=None):
    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,
                atol=atol
            )
            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
        if atol is None:
            atol = 1e-4
        while h_max - h_min > atol:
            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
```

[6]:

```
# вспомогательные функции для построения графиков
def init_figure():
    fig, [ax1, ax2] = plt.subplots(ncols=2)
    fig.set_size_inches(9, 3.5)
    ax1.set_title('Квадратичная функция')
    ax2.set_title('Функция Розенброка')
    return fig, [ax1, ax2]

def plot_path(x, func, fig, ax, offset=1.1):
    assert x.shape[1] == 2
    x1_min = min(np.floor(x[:, 0].min() * offset), -0.5)
    x1_max = max(np.ceil(x[:, 0].max() * offset), 2.0)
    x2_min = min(np.floor(x[:, 1].min() * offset), -0.5)
    x2_max = max(np.ceil(x[:, 1].max()) * offset, 2.0)
    mesh = np.meshgrid(np.linspace(x1_min, x1_max),
                       np.linspace(x2_min, x2_max))
    cn = ax.contourf(*mesh, func(*mesh), levels=20, cmap=plt.cm.coolwarm)
    ax.plot(x[:, 0], x[:, 1], 'k.-', lw=0.5, ms=3)
    fig.colorbar(cn, ax=ax)
    return ax
```

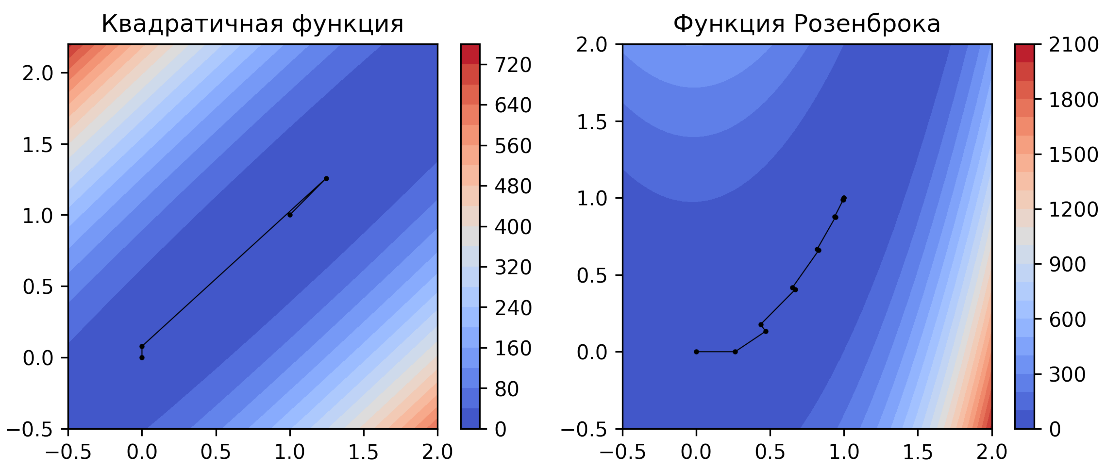
1 Метод Бройдена

[7]:
```
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

        delta = np.dot(H, grad)
        h = choose_h(f, x, delta, h_method)

        # обновляем решение
        delta *= -h
        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
```

[8]:
```
fig, [ax1, ax2] = init_figure()

sol = broyden(quadratic, quadratic_derivatives, [0, 0],
```

```
              h_method=(0.1, 0.9), grad_min=1e-3, restart_period=2,␣
 ↪full_output=True)
print('Квадратичная функция, n = 2:')
print(f'x = {sol[-1]}')
print(f'число итераций: {len(sol) - 1}')
ax1 = plot_path(np.array(sol), quadratic, fig, ax1)

sol = broyden(quadratic, quadratic_derivatives, [0] * 5,
              h_method=1, grad_min=1e-3, restart_period=2, full_output=True)
print('\nКвадратичная функция, n = 5:')
print(f'x = {sol[-1]}')
print(f'число итераций: {len(sol) - 1}')

sol = broyden(rosenbrock, rosenbrock_derivatives, [0, 0],
              h_method='min', grad_min=1e-3, restart_period=1, full_output=True)
print('\nФункция Розенброка:')
print(f'x = {sol[-1]}')
print(f'число итераций: {len(sol) - 1}')
ax2 = plot_path(np.array(sol), rosenbrock, fig, ax2)
```

```
Квадратичная функция, n = 2:
x = [1. 1.]
число итераций: 3

Квадратичная функция, n = 5:
x = [1. 1. 1. 1. 1.]
число итераций: 4

Функция Розенброка:
x = [0.99999623 0.99999263]
число итераций: 13
```



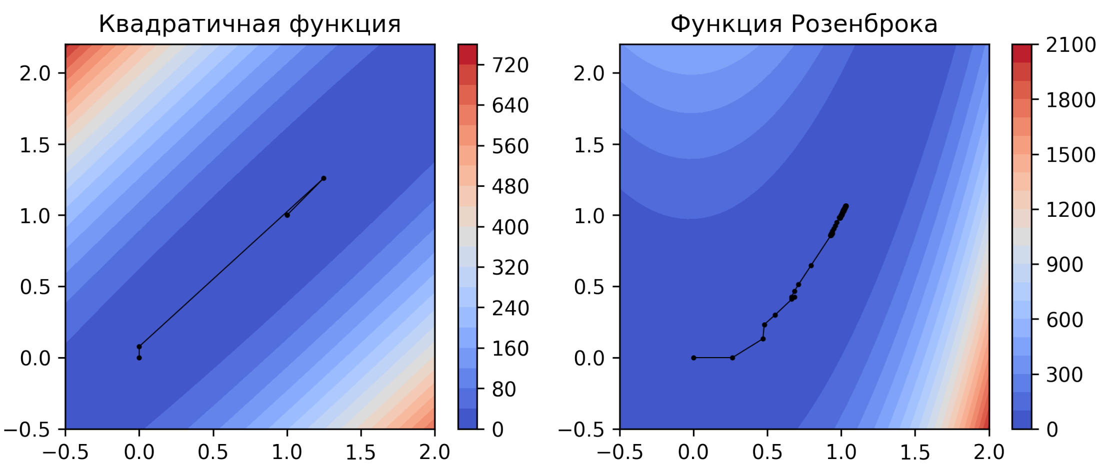
2 Метод Давидона-Флетчера-Пауэлла

[9]:
```
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:
        delta = np.dot(H, grad)
        h = choose_h(f, x, delta, h_method)

        # обновляем решение
        delta *= -h
        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
```

[10]:
```
fig, [ax1, ax2] = init_figure()

sol = dfp(quadratic, quadratic_derivatives, [0, 0],
          h_method=(0.1, 0.9), grad_min=1e-3, full_output=True)
print('\nКвадратичная функция, n = 2:')
print(f'x = {sol[-1]}')
print(f'число итераций: {len(sol) - 1}')
ax1 = plot_path(np.array(sol), quadratic, fig, ax1)

sol = dfp(quadratic, quadratic_derivatives, [0] * 5,
```

```
          h_method=(0.1, 0.9), grad_min=1e-3, full_output=True)
print('\nКвадратичная функция, n = 5:')
print(f'x = {sol[-1]}')
print(f'число итераций: {len(sol) - 1}')

sol = dfp(rosenbrock, rosenbrock_derivatives, [0, 0],
          h_method='min', grad_min=1e-3, full_output=True)
print('\nФункция Розенброка:')
print(f'x = {sol[-1]}')
print(f'число итераций: {len(sol) - 1}')
ax2 = plot_path(np.array(sol), rosenbrock, fig, ax2)
```

```
Квадратичная функция, n = 2:
x = [0.99999999 0.99999999]
число итераций: 4

Квадратичная функция, n = 5:
x = [0.99999986 0.99999985 1.00000005 1.00000005 1.00000005]
число итераций: 5

Функция Розенброка:
x = [0.99996286 0.99992478]
число итераций: 70
```



3 Метод Бройдена-Флетчера-Гольдфарба-Шенно

[11]:
```
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:
        delta = np.dot(H, grad)
        h = choose_h(f, x, delta, h_method)

        # обновляем решение
        delta *= -h
        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(delta, gamma)
        G = np.outer(u, delta)
        H += ((m + np.dot(gamma, u)) / m**2 * np.outer(delta, delta)
              - (G + G.T) / m)

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

    if full_output:
        return solutions
    return x
```

[12]:
```
fig, [ax1, ax2] = init_figure()

sol = bfgs(quadratic, quadratic_derivatives, [0, 0],
           h_method=(0.1, 0.9), grad_min=1e-3, full_output=True)
print('\nКвадратичная функция, n = 2:')
print(f'x = {sol[-1]}')
print(f'число итераций: {len(sol) - 1}')
ax1 = plot_path(np.array(sol), quadratic, fig, ax1)
```

```
sol = bfgs(quadratic, quadratic_derivatives, [0] * 5,
           h_method=(0.1, 0.9), grad_min=1e-3, full_output=True)
print('\nКвадратичная функция, n = 5:')
print(f'x = {sol[-1]}')
print(f'число итераций: {len(sol) - 1}')

sol = bfgs(rosenbrock, rosenbrock_derivatives, [0, 0],
           h_method='min', grad_min=1e-3, full_output=True)
print('\nФункция Розенброка:')
print(f'x = {sol[-1]}')
print(f'число итераций: {len(sol) - 1}')
ax2 = plot_path(np.array(sol), rosenbrock, fig, ax2)
```

```
Квадратичная функция, n = 2:
x = [0.99999985 0.99999991]
число итераций: 4

Квадратичная функция, n = 5:
x = [0.99999086 0.99999027 1.00000828 1.00000828 1.00000828]
число итераций: 7

Функция Розенброка:
x = [1.0000002  1.00000049]
число итераций: 16
```