

6 Metóda združených gradientov a kvázinewtonovské metódy

6.1 Metóda Fletchera a Reevesa. Naprogramujte metódu združených gradientov Fletchera a Reevesa pre náhodnú kvadratickú funkciu. To znamená, že v účelovej funkcii

$$Q(x) = \frac{1}{2}x^T Gx + h^T x$$

budú kladne definitná, symetrická $n \times n$ matica G a n -rozmerný vektor h náhodne vygenerované. Štartovací bod x^0 určite tiež náhodne. Pozorujte, ako závisí potrebný počet iterácií od rozmeru úlohy n .

Poznámka: Pre ľubovoľnú štvorcovú maticu A je matica $AA^T + I$ kladne definitná.

6.2 Kvázinewtonovské metódy pre náhodnú kvadratickú funkciu. Naprogramujte kvázinewtonovskú metódu pre náhodnú kvadratickú funkciu. Použite

(a) DFP metódu s korekčnou maticou

$$\Delta H_{DFP} = \frac{pp^T}{p^T y} - \frac{Hyy^T H}{y^T Hy},$$

(b) BFGS metódu s korekčnou maticou

$$\Delta H_{BFGS} = \left(1 + \frac{y^T Hy}{p^T y}\right) \frac{pp^T}{p^T y} - \frac{Hyp^T + py^T H}{p^T y},$$

(c) SR1 metódu s korekčnou maticou

$$\Delta H_{SR1} = \frac{(p - Hy)(p - Hy)^T}{y^T(p - Hy)}.$$

Pozorujte, ako závisí potrebný počet iterácií od rozmeru úlohy n .

6.3 Kvázinewtonovské metódy s približne optimálnym krokom. Naprogramujte kvázinewtonovskú metódu pre niektorú z funkcií

$$\begin{aligned} f_1(x_1, x_2) &= x_2^4 + (x_1 - 2)^2(5 + x_2^2) - 2x_1x_2 + 9x_1 - 5x_2, & x^0 &= (-3, 3)^T, \\ f_2(x_1, x_2) &= e^{x_1+3x_2-0.1} + e^{x_1-3x_2-0.1} + e^{-x_1-0.1}, & x^0 &= (-1, 1)^T. \end{aligned}$$

Použite (a) DFP metódu, (b) BFGS metódu, (c) SR1 metódu.

Dĺžku kroku voľte približne optimálne pomocou *backtrackingu*. Rozhodnite sa, či programu zadáte potrebné derivácie, alebo použijete ich numerické aproximácie. Porovnajme rýchlosť konvergencie s Newtonovou metódou, ktorú ste pre rovnaké funkcie programovali na minulom cvičení.

6.4 Kvázinewtonovské metódy s optimálnym krokom. Upravte programy z príkladu 6.3 tak, aby volili optimálnu dĺžku kroku. Využite niektorú z metód minimalizácie funkcie jednej premennej, ktoré ste programovali na druhom cvičení, alebo použite metódu zlatého rezu vo funkcii zrez (f, a, b). Porovnajme rýchlosť konvergencie s programom s približne optimálnym krokom z príkladu 6.3.