最优化方法上机实验课内容安排

1、常用最优化方法软件介绍

用最优化方法解决实际计算问题，需要用计算机编程来实现，现有的最优化软件分为商业软件与自由软件。下面介绍现在常用的软件包。

（1）MATLAB 是矩阵实验室“Matrix Laboratory”的简称，是美国 Math Works 公司出品的商业数学软件。该软件具有数值计算、符号运算、数据可视化、数据图形文字统一处理和建模仿真可视化等功能。特别地，MATLAB 有数十种工具箱，其中包括优化、图像处理、信号处理等工具箱，成为了高校和很多企事业单位的常用软件之一。

（2）NEOS Wiki 是美国威斯康星大学麦迪逊分校开发的网站，其地址为“http://www.mcs.anl.gov/otc/Guide”。在该网站，可以在线求解最优化问题，获得各种最优化软件的网址、最优化问题的案例和检验函数。

2、MATLAB 基本命令和优化工具箱（初步了解一下）

（1）MATLAB 命令窗口和基本命令

（2）MATLAB 绘图功能

（3）M 文件

（4）优化工具箱（Optimization Toolbox)

1）线性规划问题 linprog

2）foptions 函数

3）非线性规划问题：有约束一元函数的最小值 fminbnd、无约束多元函数最小值 fminsearch、有约束的多元函数的最小值 fmincon、二次规划 quadprog、半无限约束优化问题的最小值 fseminf、极小极大问题 fminimax、多目标规划问题 fgoalattain、最小二乘问题（约束线性最小二乘 lsqlin、非线性数据拟合 lsqcurvefit、非线性最小二乘 lsqnonlin、非负线性最小二乘 lsqnonneg）、非线性方程组求解（非线性方程的解 fzero、非线性方程组的解 fsolve）。

3、算例

（1）编写梯度法和信赖域算法的程序。求解

$f(x)=(x_1-2)^4+(x_1-2x_2)^2$ 的极小点，初始点为 $x_0=(0,3)^T$ 。

（2）编写基本牛顿法程序。求解问题

$$\min f(x)=0.5x_1^2(\frac{x_1^2}{6}+1)+x_2\arg\tan x_2-0.5\ln(x_2^2+1),$$

初始点分别取 $x^{(0)}=(1,0.7)^T$ 和 $x^{(0)}=(1,2)^T$ ，输出迭代信息 $\{x^{(k)}\}$ 和 $\{f_k\}$ ，并进行分析。

（3）牛顿型方法的数值比较。 编写下列程序：

1）线搜索程序。包含精确线搜索准则和不同的非精确线搜索准则以及不同的线搜索求步长的方法。

2）阻尼牛顿法和修正牛顿法的程序。

3）对称秩 1（SR1）校正算法、BFGS 算法、DFP 算法的程序。

对最优化问题

$$\min \sum_{i=1}^{m} r_i^2(x),$$

选择不同的规模，即取不同的 n 或 m，利用编好的程序进行计算，其中 $r_i(x)$ 如下：

（a）Watson 函数

$$r_i(x) = \sum_{j=2}^{n} (j-1) x_j t_i^{j-2} - (\sum_{j=1}^{n} x_j t_i^{j-1})^2 - 1$$

其中 $t_i = i/29, 1 \le i \le 29, r_{30}(x) = x_1, r_{31} = x_2 - x_1^2 - 1, 2 \le n \le 31, m = 31.$ 初始点

$x^{(0)} = (0, \cdots, 0)^T$ 。

（b）Discrete boundary value 函数

$$r_i(x) = 2x_i - x_{i-1} - x_{i+1} + h^2 (x_i + t_i + 1)^3 / 2,$$

其中 $h = 1/(n+1), t_i = ih, x_0 = x_{n+1} = 0, m = n,$ 初始点 $x^{(0)} = (t_1(t_1 - 1), \cdots, t_n(t_n - 1))^T$ 。

通过计算，可以进行关于线搜索的不同搜索准则、不同插值方法之间的比较；也可以通过输出的信息，开展不同牛顿型算法有效性的比较，比如算法的迭代次数、函数的调用次数、导数调用次数和 CPU 时间等等，数据结果可以用图表进行展示。

（3）梯度型算法的比较。对下面的优化问题，编程比较最速下降算法、共轭梯度算法的有效性：

$$\min f(x) = 4x_1^2 + 4x_2^2 - 4x_1 x_2 - 12x_2，取初始点 x^{(0)} = (-0.5, 1)^T 。$$

（5）非线性最小二乘问题的求解算法的比较。编写 GN 算法、LM 算法求解以下问题，比较两种算法的有效性。

（a)

$$\min f(x)=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{5} r_i(x)^2,$$

其中

$$r_1(x)=x_1^2+x_2^2+x_3^2-1,\quad r_2(x)=x_1+x_2+x_3-1,$$
$$r_3(x)=x_1^2+x_2^2+(x_3-2)^2-1,\quad r_4(x)=x_1+x_2-x_3+1,$$
$$r_5(x)=x_1^3+3x_2^2+(5x_3-x_1+1)^2-36t,$$

t 是参数, 可取 $t=0.5,\ 1,\ 5$ 等. 注意 $t=1$时, $x^*=(0,0,1)^T$ 是全局极小点, 这时问题为零残量, 比较不同参数的计算效果.

(b) 扩展 Rosenbrock 问题：

$$\min f(x)=\sum_{i=1}^{m} r_i^2(x),$$

其中$r_{2i-1}(x)=10(x_{2i}-x_{2i-1}^2), r_{2i}(x)=1-x_{2i-1}, x\in R^n, n$为偶数，且$m=n$。函数$f(x)$的极小点为$x^*=(1,\cdots,1)^T, f^*=0$。初始点$x^{(0)}=(x_1^{(0)},\cdots,x_n^{(0)})^T$, 其中$x_{2j-1}^{(0)}=-1.2, x_{2j}^{(0)}=1$。可采用非精确线搜索，相关参数取常见的情形即可。

（6）约束优化问题的罚函数算法的比较。编程用内点法（只需求解不等式约束优化问题）、外点法、乘子法求解以下优化问题，分析各种算法的有效性。

（a）

$$\min f(x)=\ln(1+x_1^{\ 2})-x_2$$
$$s.t.(1+x_1^{\ 2})^2+x_2^{\ 2}-4=0$$

初始点$x^{(0)}=(2,2)^{\mathrm{T}}$为非可行点，最优解为$x^*=(0,\sqrt{3}), f$（$x^*$）$=-\sqrt{3}$。

（b）

$$\min f(x)=-x_1x_2x_3$$
$$s.t.-x_1^{\ 2}-2x_2^{\ 2}-4x_3^{\ 2}+48\geq 0$$

初始点$x^{(0)}=(1,1,1)^{\mathrm{T}}$为可行点，最优解为

$$x^*=（a,b,c)^{\mathrm{T}},(a,-b,-c)^{\mathrm{T}},(-a,b,-c)^{\mathrm{T}},(-a,-b,c)^{\mathrm{T}}, f(x^*)=-16\sqrt{2}$$

其中$a=4, b=2\sqrt{2}, c=2$。

（c）

$$
\begin{aligned}
&\min (x_1-1)^2+(x_1-x_2)^2+(x_2-x_3)^4,\\
&s.t. x_1(1+{x_2}^2)+{x_3}^4-4-3\sqrt{2}=0\\
&-10\le x_i\le 10, i=1,2,3.
\end{aligned}
$$

初始点 $x^{(0)}=(2,2,2)^{\mathrm{T}}$ 为可行点，最优解为

$$x^*=(1.104859024,1.196674194,1.535262257)^{\mathrm{T}}, f(x^*)=0.03256820025$$ 。