最优化方法上机报告 无约束优化算法

米科润 19 信计二班 201905755824

June 10, 2021

目录

1	共轭梯度法		1
	1.1	线性共轭梯度法	1
	1.2	非线性共轭梯度法	2
2	拟牛	· 顿法	4
	2.1	对称秩 1 算法	4
	2.2	BFGS 算法	6
	2.3	DFP 算法	7
	2.4	Broyden 族算法	9
3	信賴	过域算法	L 0
	3.1	光滑牛顿法求解信赖域子问题	10
	3.2	牛顿型信赖域方法	13
4	最小	○二乘法 1	L 5
	4.1	线性最小二乘问题	15
		4.1.1 法方程 Cholesky 分解法	15
		4.1.2 QR 分解法	16
		4.1.3 SVD 求解亏秩最小二乘	16
	4.2	非线性最小二乘问题	17
		4.2.1 L-M 方法	17

1 共轭梯度法

1.1 线性共轭梯度法

输入: A 是 n 阶对称正定矩阵,b 是 n 维列向量, x_0 是初始点,epsilon 是容许误差,N 是最大迭代次数

输出: k 是迭代次数,x,val 分别是近似最优点和最优值

```
function [k,x,val]=linecg(A,b,x0,epsilon,N)
1
       if nargin < 5, N=1000; end
2
       if nargin <4, epsilon=1.e-5; end
       if nargin <3, x0=zeros(length(b),1); end
       k=0;
       gk=A*x0-b;
       dk = -gk;
       while (k<N)
           temp=A*dk;
           alpha = -gk' * dk/(dk' * temp);
10
           x=x0+alpha*dk;
11
           gk=A*x-b;
12
           betak=gk'*temp/(dk'*temp);
13
           dk=-gk+betak*dk;
14
            if (norm(gk) < epsilon), break; end
15
           x0=x;
16
           k=k+1;
17
       end
18
       val=0.5*x'*A*x-b'*x;
19
       end
```

结果展示:

求解无约束优化问题 $\min_{x \in P^n} f(x) = \frac{1}{2} x^{\mathrm{T}} A x - b^{\mathrm{T}} x$

其中
$$A = \begin{pmatrix} 4 & -1 & & & \\ -1 & 4 & -1 & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 4 & -1 \\ & & & -1 & 4 \end{pmatrix}$$
 , $B = \begin{pmatrix} 3 \\ 2 \\ \vdots \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix}$

创建运行文件 test1.m

```
A=zeros (100);
       A(1,1:2) = [4,-1];
       A(100,99:100) = [-1,4];
3
       xx = [-1, 4, -1];
       for i = 2:99
            A(i, i-1: i+1)=xx;
       end
       B=2.*ones(100,1);
       B(1) = 3; B(100) = 3;
       x0=zeros(100,1);
10
       epsilon=1e-5;
11
       N=20;
12
       [k, x, val] = linecg(A, B, x0, epsilon, N);
13
        disp('k='); disp(k); disp('val='), disp(val);
14
```

结果如下

```
k=
10
val=
-101.0000
```

图 1: 线性共轭梯度法结果

1.2 非线性共轭梯度法

基于 Armijo 非精确线搜索的重开始 FR 非线性共轭梯度法

输入: fun,gfun 分别是目标函数及其梯度, x_0 是初始点, epsilon 是容许误差,N 是最大迭代次数

```
function [k,x,val] = frcg(fun,gfun,x0,epsilon,N)
if nargin < 5, N=1000; end
if nargin < 4, epsilon=1.e-5; end
beta=0.6; sigma=0.4;
n=length(x0); k=0;</pre>
```

```
while (k<N)
6
             gk=feval(gfun,x0);
             itern=k-(n+1)*floor(k/(n+1));
             itern=itern+1;
             if(itern == 1)
10
                  dk = -gk;
11
             else
12
                  betak = (gk '*gk) / (g0 '*g0);
13
                  dk=-gk+betak*d0; gd=gk'*dk;
14
                  if (gd \ge 0.0), dk = -gk; end
15
             end
16
             if (norm(gk)<epsilon), break; end
17
             m=0; mk=0;
18
             \frac{\text{while}}{\text{m}} (m<20)
19
                  if (feval (fun, x0+beta^m*dk)...
20
                            <feval(fun,x0)+sigma*beta^m*gk'*dk)</pre>
21
                       mk=m; break;
22
                  end
23
                  m=m+1;
             end
25
             x=x0+beta^mk*dk;
26
             g0=gk; d0=dk;
27
             x0=x; k=k+1;
        end
        val = feval(fun, x);
        end
31
```

结果展示:

求解无约束优化问题 $\min_{x \in R^2} f(x) = 2x_1^2 + x_2^2 - 2x_1x_2 - 2x_2$ 编写目标函数 fun1.m 和梯度 gfun1.m

```
\begin{array}{ll} & \text{function } f{=}\text{fun1}(x) \\ & \text{f=}2{*}x(1)^2{+}x(2)^2{-}2{*}x(1){*}x(2){-}2{*}x(2)\,; \\ & \text{end} \end{array}
```

```
\begin{array}{lll} & & function & gf = gfun1(x) \\ & & gf = [4*x(1)-2*x(2);2*x(2)-2*x(1)-2]; \\ & & end \end{array}
```

命令窗口输入:

```
1 >> x0=[0.0;0.0];
2 >> [k,x,val]=frcg('fun1','gfun1',x0)
```

结果:

k =
 12

x =
 1.0000
 2.0000

va1 =
 -2.0000

图 2: 非线性共轭梯度法结果

2 拟牛顿法

2.1 对称秩 1 算法

输入: fun,gfun 分别是目标函数及其梯度, x_0 是初始点, epsilon 是容许误差,N 是最大迭代次数

输出: k 是迭代次数, x,val 分别是近似最优点和最优值

```
function [k,x,val] = sr1(fun,gfun,x0,epsilon,N)
if nargin <5, N=1000; end
if nargin <4, epsilon=1.e-5; end
beta=0.55; sigma=0.4;
n=length(x0); Hk=eye(n); k=0;
while(k<N)</pre>
```

```
gk=feval(gfun,x0);
7
             dk = -Hk * gk;
             if(norm(gk)<epsilon), break; end</pre>
             m=0; mk=0;
10
             \frac{\text{while}}{\text{m}} (m<20)
11
                  if(feval(fun,x0+beta^m*dk) \le feval(fun,x0)...
12
                 +sigma*beta^m*gk'*dk)
13
                      mk=m; break;
14
                  end
15
                 m=m+1;
16
             end
17
             x=x0+beta^mk*dk;
18
             sk=x-x0; yk=feval(gfun,x)-gk;
19
             Hk=Hk+(sk-Hk*yk)*(sk-Hk*yk)'/((sk-Hk*yk)'*yk);
20
             k=k+1; x0=x;
21
        end
22
        val = feval(fun, x0);
23
        end
24
```

结果展示:

```
求解无约束优化问题 \min_{x \in R^2} f(x) = 2(x_1 - x_2^2)^2 + (x_2 - 2)^2 编写 fun1.m 和 gfun1.m
```

```
function f=fun1(x)

f=2*(x(1)-x(2)^2)^2+(x(2)-2)^2;

end
```

```
\begin{array}{ll} & & \text{function } & \text{gf=gfun1}(x) \\ & & \text{gf=[4*(x(1)-x(2)^2);-8*x(2)*(x(1)-x(2)^2)+2*(x(2)-2)];} \\ & & \text{end} \end{array}
```

命令窗口输入:

k =
12
x =
4.0000
2.0000
val =
3.2595e-16

图 3: 对称秩 1 法结果

2.2 BFGS 算法

输入: fun,gfun 分别是目标函数及其梯度, x_0 是初始点,varargin 是输入的可变参数变量,简单调用 BFGS 是可以忽略

输出: k 是迭代次数,x,val 分别是近似最优点和最优值

```
function [k,x,val] = bfgs(fun,gfun,x0,varargin)
       N=1000;
2
        epsilon=1.e-5;
3
        beta=0.55; sigma=0.4;
       n=length(x0); Bk=eye(n);
       k=0;
        while (k<N)
            gk=feval(gfun,x0,varargin(:));
            if(norm(gk)<epsilon), break; end</pre>
            dk = -Bk \setminus gk;
10
            m=0; mk=0;
11
            \frac{\text{while}}{\text{m}} (m<20)
12
                 newf=feval(fun,x0+beta^m*dk,varargin{:});
13
                 oldf=feval(fun,x0,varargin{:});
14
                 if (newf≤oldf+sigma*beta^m*gk'*dk)
15
                      mk=m; break;
16
                 end
17
18
                 m=m+1;
            end
19
            x=x0+beta^mk*dk;
20
            sk=x-x0;
```

```
yk=feval(gfun,x,varargin{:})-gk;
22
            if(yk'*sk>0)
23
            Bk=Bk-(Bk*sk*sk'*Bk)/(sk'*Bk*sk)+(yk*yk')/(yk'*sk);
24
            end
25
            k=k+1;
26
            x0=x;
27
       end
28
        val = feval(fun, x0, varargin\{:\});
29
       end
30
```

在对称秩 1 算法问题的基础上, 命令窗口输入

```
1 >> x0=[1.0;1.0];
2 >> [k,x,val]=bfgs('fun1','gfun1',x0)
```

x =

4.0000
2.0000

val =

6.0956e-14

图 4: BFGS 算法结果

2.3 DFP 算法

输入: fun,gfun 分别是目标函数及其梯度, x_0 是初始点, epsilon 是容许误差,N 是最大迭代次数

输出: k 是迭代次数, x,val 分别是近似最优点和最优值

```
function [k,x,val] = dfp(fun,gfun,x0,epsilon,N)
if nargin < 5, N=1000; end
if nargin < 4, epsilon=1.e-5; end
beta=0.55; sigma=0.4;
n=length(x0); Hk=eye(n); k=0;</pre>
```

```
while (k<N)
6
             gk=feval(gfun,x0);
             if(norm(gk)<epsilon), break; end</pre>
            dk=-Hk*gk;
            m=0; mk=0;
10
             \frac{\text{while}}{\text{m}} (m<20)
11
                  if(feval(fun,x0+beta^m*dk) \le feval(fun,x0)...
12
                 +sigma*beta^m*gk'*dk)
13
                 mk=m; break;
14
            end
15
            m=m+1;
16
            end
17
            x=x0+beta^mk*dk;
18
            sk=x-x0; yk=feval(gfun,x)-gk;
19
             if(sk'*yk>0)
20
            Hk=Hk-(Hk*yk*yk'*Hk)/(yk'*Hk*yk)+(sk*sk')/(sk'*yk);
21
            end
22
            k=k+1; x0=x;
23
        end
24
        val=feval (fun, x0);
25
        end
26
```

在对称秩 1 算法问题的基础上, 命令窗口输入

```
\begin{array}{lll} & >> & x0 = [1.0\,; 1.0\,]\,;\,e\,p\,s\,i\,l\,o\,n = 1e\,-\,5\,; N = 20\,;\\ & >> & [\,k\,, x\,, v\,a\,l\,]\,\,=\,\,dfp\,(\,\,'\,f\,u\,n\,1\,\,'\,\,,\,'\,g\,f\,u\,n\,1\,\,'\,\,, x0\,\,,\,e\,p\,s\,i\,l\,o\,n\,\,, N) \end{array}
```

```
k = 9

x = 4.0000
2.0000

val = 2.0346e-11
```

图 5: DFP 算法结果

2.4 Broyden 族算法

输入: fun,gfun 分别是目标函数及其梯度, x_0 是初始点, epsilon 是容许误差,N 是最大迭代次数

输出: k 是迭代次数, x,val 分别是近似最优点和最优值

```
function [k,x,val] = broyden(fun,gfun,x0,epsilon,N)
        if nargin <5, N=1000; end
2
        if nargin <4, epsilon=1.e-5; end
        beta=0.55; sigma=0.4; phi=0.5;
       n=length(x0); Hk=eye(n); k=0;
        while (k<N)
            gk=feval(gfun,x0);
            if (norm(gk) < epsilon), break; end
             \cdot dk = -Hk * gk;
            m=0; mk=0;
10
            \frac{\text{while}}{\text{m}} (m<20)
11
                 if (feval(fun, x0+beta^m*dk) \le feval(fun, x0)...
12
                 +sigma*beta^m*gk'*dk)
                      mk=m; break;
14
                 end
                 m=m+1;
            end
17
            x=x0+beta^mk*dk; sk=x-x0;
            yk = feval(gfun, x) - gk; Hy = Hk*yk;
19
            sy=sk'*yk; yHy=yk'*Hk*yk;
20
            if(sy < 0.2 * yHy)
21
                 theta=0.8*yHy/(yHy-sy);
22
                 sk = theta * sk + (1 - theta) * Hy;
23
                 sy=0.2*yHy;
24
            end
25
            vk = sqrt(yHy) *(sk/sy - Hy/yHy);
26
            Hk=Hk-(Hy*Hy')/yHy+(sk*sk')/sy+phi*vk*vk';
27
            x0=x; k=k+1;
28
       end
29
        val = feval(fun, x0);
30
31
```

在对称秩 1 算法问题的基础上, 命令窗口输入

```
k =
10

x =
4.0000
2.0000

va1 =
1.6903e-14
```

图 6: Broyden 算法结果

3 信赖域算法

3.1 光滑牛顿法求解信赖域子问题

输入: f_k 是 x_k 处的目标函数值, g_k 是 x_k 处的梯度, B_k 是第 k 次近似 Hesse 阵, Δ_k 是当前信赖域半径

输出: d,val 分别是子问题的最优点和最优值,lam 是乘子值,i 是迭代次数

```
function [d, val, lam, i] = trustq(fk, gk, Bk, \Delta k)
        n=length(gk); beta=0.6; sigma=0.2;
2
        mu0=0.05; lam0=0.05; gamma=0.05;
        d0=ones(n,1); z0=[mu0,lam0,d0']';
        zbar = [mu0, zeros(1, n+1)]';
        i = 0;
        z=z0; mu=mu0; lam=lam0; d=d0;
        while (i \le 150)
            H=dah(mu, lam, d, gk, Bk, \Delta k);
             if(norm(H) \le 1.e - 8)
10
                 break;
            end
12
            J=JacobiH(mu,lam,d,Bk,\Delta k);
13
```

```
b=psi(mu, lam, d, gk, Bk, \Delta k, gamma)*zbar-H;
14
             dz=J \setminus b;
15
             dmu=dz(1); dlam=dz(2); dd=dz(3:n+2);
16
             m=0; mi=0;
17
              \frac{\text{while}}{\text{m}} (\text{m} < 20)
18
                   t1=beta^m;
19
                   Hnew=dah(mu+t1*dmu,lam+t1*dlam,d+t1*dd,...
20
                             gk, Bk, \Delta k);
21
                   if(norm(Hnew) \le (1 - sigma * (1 - gamma * mu0) * beta^m) \dots
22
                        *norm(H))
23
                        mi=m; break;
24
                   end
25
                  m=m+1;
26
              end
27
              alpha=beta^mi;
28
             mu=mu+alpha*dmu;
29
             lam=lam+alpha*dlam;
30
             d=d+alpha*dd;
31
              i=i+1;
32
        end
33
         val = fk + gk' * d + 0.5 * d' * Bk*d;
34
        end
35
        %%
36
         function p=phi(mu, a, b)
37
        p=a+b-sqrt((a-b)^2+4*mu^2);
        end
39
        %%
         function H=dah (mu, lam, d, gk, Bk, \Delta k)
41
        n=length(d);
42
        H=zeros(n+2,1);
43
        H(1)=mu;
44
        H(2)=phi(mu,lam, \Delta k^2-norm(d)^2);
45
        H(3:n+2)=(Bk+lam*eye(n))*d+gk;
46
        end
47
        %%
48
         function J=JacobiH (mu, lam, d, Bk, \Delta k)
49
        n = length(d);
50
        J=zeros(n+2,n+2);
51
         t2=sqrt((lam+norm(d)^2-\Delta k^2)^2+4*mu^2);
52
        pmu=-4*mu/t2;
53
```

```
thetak = (lam + norm(d)^2 - \Delta k^2) / t2;
54
        J = [1, 0, zeros(1,n);
55
        pmu, 1-\text{thetak}, -2*(1+\text{thetak})*d';
56
         zeros(n,1), d, Bk+lam*eye(n);
57
        end
58
        %%
59
        function si=psi(mu, lam, d, gk, Bk, \Delta k, gamma)
60
        H=dah(mu, lam, d, gk, Bk, \Delta k);
61
         si=gamma*norm(H)*min(1,norm(H));
62
        end
63
```

结果可视化:

求解信赖域子问题最优解 $\min_{||d||_2 \le \Delta_k} f(x) = -5 + g_k^{\mathrm{T}} d + \frac{1}{2} d^{\mathrm{T}} B_k d$ 式中: $g_k = \begin{pmatrix} 400 \\ -200 \end{pmatrix}$, $B_k = \begin{pmatrix} 1202 & -400 \\ -400 & 200 \end{pmatrix}$, $\Delta_k = 5$ 命令窗口输入:

```
d =
    -0.0000
    1.0000

val =
    -105

lam =
    5.4329e-16

i =
    5
```

图 7: 光滑牛顿算法求解信赖域子问题结果

3.2 牛顿型信赖域方法

x₀ 是初始点,epsilon 是容许误差

输出: k 是迭代次数, x,val 分别是近似极小点和近似极小值

```
function [k, x, val] = trustm(x0, epsilon)
         n=length(x0); eta1=0.1; eta2=0.75;
         tau1=0.5; tau2=2.0;
         \Delta=1; dtabar=2.0;
         x=x0; Bk=Hess(x); k=0;
          while (k<50)
               fk = fun(x);
               gk=gfun(x);
               if (norm(gk)<epsilon)</pre>
                     break;
               end
               [d, val, lam, i] = trustq(fk, gk, Bk, \Delta);
               \Delta q = fk - val;
13
               \Delta f=fun(x)-fun(x+d);
               rk=\Delta f/\Delta q;
15
               if(rk \le eta1)
16
                    \Delta = tau1 * \Delta;
17
               else if (rk \ge eta2 \& norm(d) = \Delta)
18
                           \Delta = \min(\tan 2 * \Delta, \operatorname{dtabar});
19
                     else
20
                           \Delta = \Delta;
21
                     end
22
               end
23
               if (rk>eta1)
24
                     x=x+d;
25
                     Bk=Hess(x);
26
               end
27
               k=k+1;
28
         end
29
          val = fun(x);
30
31
         end
```

求解无约束优化问题 $\min_{x \in R^2} f(x) = 100(x_1^2 - x_2)^2 + (x_1 - 1)^2$ 编写 fun.m,gfun.m,Hess.m

```
%%
1
       function f=fun1(x)
        f = 100*(x(1)^2-x(2))^2+(x(1)-1)^2;
3
       \quad \text{end} \quad
       %%
5
       function gf=gfun1(x)
       gf = [400*x(1)*(x(1)^2-x(2))+2*(x(1)-1); -200*(x(1)^2-x(2))];
       end
       %%
9
       function He=Hess1(x)
10
       He = [1200*x(1)^2-400*x(2)+2, -400*x(1);
11
       -400*x(1), 200 ];
12
       end
13
```

结果可视化: 命令窗口输入

```
1 >> x0=[0.0;0.0]; epsilon=1e-6;
2 >> [k,x,val] = trustm(x0, epsilon)
```

```
k =

14

x =

1.0000
1.0000

va1 =

3.4655e-17
```

图 8: 牛顿型信赖域算法结果

4 最小二乘法

4.1 线性最小二乘问题

4.1.1 法方程 Cholesky 分解法

```
1     function [x,res]=nels(A,b)
2     B=A'*A; f=A'*b;
3     L=chol(B,'lower');
4     y=L\f; x=L'\y;
5     res=norm(b-A*x);
6     end
```

求解超定方程组 Ax = b, 其中

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 3 & 4 & 5 \\ 4 & 3 & 2 & 1 \\ 4 & 5 & 6 & 7 \\ 9 & 5 & 7 & 2 \\ 4 & 2 & 5 & 3 \end{pmatrix}, x = \begin{pmatrix} x1 \\ x2 \\ x3 \\ x4 \end{pmatrix}, b = \begin{pmatrix} 20 \\ 22 \\ 35 \\ 42 \\ 50 \end{pmatrix}$$

命令窗口输入:

x =

45.4308
-45.1654
-30.9423
37.7731

res =

0.5883

图 9: Cholesky 分解结果

4.1.2 QR 分解法

```
1 function [x, res]=qrls(A,b)
2 [Q,R]=qr(A); f=Q'*b;
3 x=R\f; res=norm(b-A*x);
4 end
```

求解 Cholesky 中的超定方程组

命令窗口输入:

```
x =

45.4308
-45.1654
-30.9423
37.7731

res =

0.5883
```

图 10: QR 分解结果

4.1.3 SVD 求解亏秩最小二乘

求解超定方程组 Ax = b, 其中

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 1 & 4 & 5 & 6 \\ 1 & 5 & 6 & 7 \\ 1 & 8 & 9 & 0 \\ 1 & 11 & 12 & 13 \end{pmatrix}, x = \begin{pmatrix} x1 \\ x2 \\ x3 \\ x4 \end{pmatrix}, b = \begin{pmatrix} 11 \\ 13 \\ 15 \\ 18 \\ 20 \end{pmatrix}$$

运行可得结果

x =
2.7533
-2.4133
0.3400
3.0933
res =

图 11: SVD 分解结果

4.2 非线性最小二乘问题

4.2.1 L-M 方法

求解非线性方程组 F(x)=0,可适用于未知数个数与方程的个数不相等情形输入: F_k , JF_k 分别是求 F(xk) 及 F'(xk) 的函数, x_0 是初始点,epsilon 是容许误差,N 是最大迭代次数

输出: k 是迭代次数, x, val 分别是近似解和 $0.5*||F(xk)||^2$ 的值

```
function [k,x,val] = lmm(Fk,JFk,x0,epsilon,N)

if nargin <5, N=1000; end

if nargin <4, epsilon=1.e-5; end

beta=0.55; sigma=0.4;

n=length(x0);

muk=norm(feval(Fk,x0));

k=0;

while (k<N)

fk=feval(Fk,x0);</pre>
```

```
jfk=feval(JFk,x0);
10
               gk \! = \! jfk ' \! * fk \; ; \; dk \! = \! - \! (jfk ' \! * jfk \! + \! muk \! * \! eye (n)) \backslash gk \; ;
11
               if (norm(gk)<epsilon), break; end
12
              m=0; mk=0;
13
               \frac{\text{while}}{\text{m}} (m<20)
14
                    fnew=0.5*norm(feval(Fk,x0+beta^m*dk))^2;
15
                     fold=0.5*norm(feval(Fk,x0))^2;
16
                     if (fnew<fold+sigma*beta^m*gk'*dk)</pre>
17
                          mk=m; break;
18
                    end
19
                    m=m+1;
20
               end
21
               x0=x0+beta^mk*dk;
22
               muk=norm(feval(Fk,x0));
23
               k=k+1;
24
         end
25
         x=x0;
26
         val=0.5*muk^2;
27
         end
```

结果可视化:编写 Fk.m 和 JFK.m

```
%%
       function F=Fk(x)
2
       n=length(x); F=zeros(n,1);
        for i=1:n-1
            F(i)=x(i)*x(i+1)-1;
       end
       F(n)=x(1)*x(n)-1;
       %%
       function JF=JFk(x)
       n=length(x); JF=zeros(n,n);
10
        for i=1:n-1
11
            for j=1:n
12
                 if j==i
13
14
                     JF(i, j)=x(j+1);
                 else if j==i+1
15
                     JF(i, j)=x(j-1);
16
                     _{\rm else}
17
```

```
\begin{array}{lll} {}_{18} & {}_{JF(\,i\;,\,j\,)\,=0;} \\ {}_{19} & {}_{end} \\ {}_{20} & {}_{end} \\ {}_{21} & {}_{end} \\ {}_{22} & {}_{end} \\ {}_{23} & {}_{JF(\,n\,,1\,)=x\,(n\,)\,;} \ {}_{JF(\,n\,,n\,)=x\,(1\,)\,;} \end{array}
```

命令窗口输入:

图 12: LM 方法结果