实验二: 共轭梯度法

2021年7月7日

- 一、实验目的:
 - 1. 熟悉无约束优化问题的共轭梯度法;
 - 2. 熟悉共轭梯度法并编制程序;
 - 3. 培养Matlab编程与上机调试能力。
- 二、实验课时: 4课时
- 三、实验准备
 - 1 复习无约束优化问题的共轭梯度法;
 - 2 熟悉Matlab软件的基本操作。

四、实验内容

课堂上机实验演示:根据共轭梯度法编写程序,求函数

$$\min f(x_1, x_2) = (1 - x_1)^2 + 2(x_2 - x_1^2)^2$$

其中初始点为 $x_0 = (0,0)^T$.

五、实验步骤:

5.0 matlab 准备

- (1) 以函数文件的形式建立目标函数和梯度;
- (2) 黄金分割法程序
- (3) if-else-end, while-end 结构;

中国矿业大学. 数学学院 最优化. 实验二

5.1 共轭梯度法算法描述

```
Algorithm 1 重开始FR 共轭梯度法
  初始化: 选取初始点x_0, 精度\epsilon > 0.
  计算f_0 = f(x_0), \nabla f_0 = \nabla f(x_0);
  if \|\nabla f_0\| \le \epsilon then
     终止
  else
     \diamondsuit \beta_{-1} = 0, d_{-1} = 0. \Xi k := 0.
     while 不终止 do
          d_k = -\nabla f_k + \beta_{k-1} d_{k-1}; 
        计算最优步长\alpha_k, 使得
                                 f(x_k + \alpha_k d_k) = \min_{\alpha > 0} f(x_k + \alpha d_k).
        \diamondsuit x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k.
        计算\nabla f_{k+1} = \nabla f(x_{k+1}).
        if \|\nabla f_{k+1}\| \leq \epsilon then
           x^* = x_{k+1};
           终止循环.
        else
           if k+1 能被n+1 整除 then
              \beta_k = 0;
           else
              \beta_k = \frac{\|\nabla f_{k+1}\|^2}{\|\nabla f_k\|^2};
           end if
           end if
     end while
  end if
  输出: x*.
```

注意到上面算法中, 在一次迭代中只用到 x_k 和 x_{k+1} 两个迭代点. 故而在实际编程中, 为了简便起见, 可以用xold, xnew 表示这两个迭代点,循环更替.

5.2 定义目标函数和梯度函数

和实验一相同. 注意:一般说来,如果函数的梯度比较容易计算,则将其表达式算出来,写成一个函数文件比较好. 格式如下

中国矿业大学: 数学学院 最优化: 实验二

function gf = gradf(x)

$$gf = [\ldots; \ldots];$$

end

如果梯度很难算出表达式,则可用数值微分方法计算,这里不做介绍.

另外, 不建议利用matlab 的符号运算功能计算函数梯度.

5.3 精确搜索.

要求使用实验一所写的黄金分割程序来计算精确步长.为此,可能需要对实验一的程序进行改写.

方法一:构造一个新函数,假设命名为 psi.m

function psix=psi(alp,x,d)
psix=funf(x+alp*d);

end

其中, x 为当前点, d 为搜索方向, funf 为目标函数. 再对alp 进行一维搜索. 取初始 区间为[0,1] 或适当放大点的区间,如[0,2]. 分别用alp1, alp2 和psix1 = psi(alp1, x, d), psix2 = psi(alp2, x, d) 代替原黄金分割程序中的 x_1 , x_2 和 f_1 , f_2 即可.

方法二: 用分别用alp1, alp2 和f(x+alp1d), f(x+alp2d) 代替原黄金分割程序中的 x_1 , x_2 和 f_1 , f_2 .

5.3 循环和选择

同实验一一样,这个实验里需要用到while 语句和if 语句.

五、课堂实验任务

编写函数文件, 实现共轭梯度法, 求函数

$$f(x) = \frac{x_1^4}{4} + \frac{x_2^2}{2} - x_1 x_2 + x_1 - x_2.$$

的极小值,始点分别为 $x^{(0)} = [0,0]^T$ 和 $x^{(0)} = [1.5,1]^T$.

备注:同学们也可以自行选择所要求解的例题,但必须使用共轭梯度法。

在完成课堂实验任务的基础上,同学们可以考虑使用PRP 共轭梯度法或者拟Newton 法求解.

六、实验主要步骤

- 1. 熟悉Matlab中共轭梯度算法的常用命令;
- 2. 编写m文件以创建和保存各函数:
- 3. 运行程序,保存结果:

4. 撰写实验报告。

七、实验报告的撰写要求

- 1. 写出实验课程名称、姓名和学号;
- 2. 写出实验目的及实验内容;
- 3. 写出实验过程及结果(程序代码及数值解),尽量给出其图像;
- 4. 递交实验报告:
 - (1) 课程结束后1周内,实验报告的电子版请发到sonqiang@163.com,标题和附件名称相同,格式如下:实验序号_姓名_学号_实验名称.rar 例:实验2_张某_12345678_共轭梯度法.rar
 - (2) 笔试(结课考试)前,实验报告的纸质版,由班长或者学习委员,按照每位同学收齐,交给任课教师。
- 5. 实验报告格式模板(见文件:实验报告模板.doc)