

优化方法程序库 OPB-1

—原理及使用说明

余俊 周济 主编



机械工业出版社

TP-92
311

优化方法程序库 OPB-1

——原理及使用说明

余俊 周济 主编



机械工业出版社

内 容 提 要

优化方法程序库 OPB-1 主要适用于解决工程优化设计中占主要成分的非线性规划问题, 为在我国推广使用优化设计新技术提供了工具。本书着重介绍了 OPB-1 中采用的各种最优化方法的原理及应用特点, 系统介绍了 OPB 中各种算法程序的结构及使用方法, 并附录了源程序。本书是一本学术参考书和使用指导书, 有利于读者深入学习和灵活应用各种先进而实用的优化设计算法程序。本书适合于从事优化设计的科研工作人员、工程技术人员和高等院校师生阅读。

35458/07

优化方法程序库 OPB-1 ——原理及使用说明

余俊 周济 主编

*

责任编辑: 夏曼苹 版式设计: 冉晓华
封面设计: 刘 代 责任校对: 刘思碚

*

机械工业出版社出版(北京阜成门外百万庄南里一号)

(北京市书刊出版业营业许可证出字第 117 号)

北京市艺辉胶印厂印刷

新华书店北京发行所发行·新华书店经售

*

开本 $787 \times 1092 \frac{1}{16}$ · 印张 $29\frac{1}{2}$ · 字数 739 千字

1989 年 12 月北京第一版·1989 年 12 月北京第一次印刷

印数 00, 001—1325 · 定价: 24.00 元

*

ISBN 7-111-01247-X / TP · 79

序

最优化方法,可以用来大幅度改善产品质量、节省原材料、降低产品成本、提高经济效益,是进行现代化建设的关键技术。近年来,优化方法作为具有重要经济意义和巨大应用潜力的先进技术,引起了人们广泛的注意。但是在我国,由于缺乏先进的、成熟的和通用的优化方法软件,阻碍了优化方法的广泛应用,于是,研制实用而可靠的优化方法软件,作为一项迫切而重要的科研任务,列入了“六五”国家科技攻关计划。华中工学院、合肥工业大学、北京工业学院、北京钢铁学院、内蒙古工学院、原机械工业部计算中心和空军后勤学校参加该研制工作。

经过三年科研攻关,《常用优化方法程序库的研究》于1986年8月通过国家鉴定。鉴定会认为:“OPB-1是我国第一个大型非线性优化方法程序库,达到了国际先进水平,是一项重大的科研成果”,“OPB-1能广泛应用在工程设计和国民经济其它领域,为在我国推广使用优化设计方法提供了强有力的工具。该项成果必将有助于提高我国工程设计水平,产生巨大经济效益。”

为了促进优化方法程序库 OPB-1 的迅速推广应用,我们编写了这本书。本书的编写工作注意了两个重点:

(1)比较深入地介绍了 OPB-1 中采用的各种最优化方法,特别着重讨论了具有最新水平的多种优化算法的原理及应用特点。由于 OPB-1 中包括了序列二次规划法、广义简约梯度法和混合离散优化方法等先进的约束非线性规划算法,而在国内尚缺少对于这些算法的详细论述,因此本书也是一本深入学习最优化理论的学术参考书。

(2)注重实用,系统地介绍了 OPB-1 中各种算法程序的结构、特点及使用方法;同时还制定了考核指标,精选了考题,对全部程序进行统一的考核。这样有利于读者学习使用优化方法程序库 OPB-1。

目前, OPB-1 已在国内广为流传,本书的出版也是为 OPB-1 用户提供一本适宜的使用指南。

本书附录了适用于 IBM-PC 微型计算机的 OPB-1 全部源程序,目的在于促进 OPB-1 在我国的推广应用。编者还备有 OPB-1 软件磁盘(包括源程序、运行文件及考题),需要者可与编者进一步联系。

本书由华中工学院余俊、曾昭华、王惠珍、丁幼琳、周济、王建华、程志毅、戴同、秦敬,合肥工业大学柯尊忠,北京工业学院马宝华,北京钢铁学院陈立周,内蒙古工学院汪萍、侯慕英,原机械工业部计算中心叶尔宁,空军后勤学校张学斌等16位同志共同编写。其中,第一、二、六章由周济编写,第三章由柯尊忠编写,第四章由王惠珍、曾昭华编写,第五章由王建华编写,第七章由程志毅、叶尔宁编写,第八章由张学斌、马宝华编写,第九章由陈立周编写,第十章由丁幼琳、汪萍、侯慕英编写,附录部分由戴同、秦敬编写。余俊和周济负责全书的主编工作。

在我国更好地推广应用优化方法,是我们研究工作的出发点,也是我们研究工作的目的。我们衷心希望本书能为在我国推广应用最优化新技术作出贡献。

编 者
1987.11.

目 录

序

第一章 优化算法和优化软件	(1)
1. 优化方法和优化软件的发展简况	(1)
1.1 优化计算方法概述	(1)
1.2 国际上优化软件的发展简况	(2)
1.3 我国优化方法及软件的研究情况	(3)
2. 研制优化方法程序库的意义及展望	(3)
参考文献一	(4)
第二章 优化方法程序库 OPB-1 概述	(5)
1. 程序库 OPB-1 的总体结构	(5)
2. OPB-1 中主要算法程序的内容及特点	(6)
2.1 常用优化方法程序包 DOP-2	(6)
2.2 约束变尺度法程序 CVM01	(7)
2.3 序列二次规划算法程序 MARQ	(7)
2.4 广义简约梯度法程序 GRG-2 及其改进型 GRG-C	(8)
2.5 混合罚函数法程序 MPOP	(8)
2.6 混合离散变量优化程序 MDOD	(8)
3. 优化方法程序库 OPB 的特点及发展趋势	(9)
4. 关于使用优化方法程序库 OPB-1 的几点说明	(10)
4.1 OPB-1 规定的数学模型标准格式	(10)
4.2 编写主程序 MAIN	(11)
4.3 编写函数子程序 FNT	(12)
参考文献二	(12)
第三章 微型计算机的优化方法程序库 MOPB-1 和 PC-OPB-1	(13)
1. 概述	(13)
2. 微型计算机优化方法程序库 MOPB-1 的内容及总体结构	(13)
2.1 硬件环境	(13)
2.2 MOPB-1 的内容及总体结构	(13)
2.3 总控程序 CONTR 及主程序 MAIN	(14)
2.4 优化方法程序包	(15)
3. 优化方法程序库 MOPB-1 的功能及特点	(15)
3.1 MOPB-1 的功能	(15)
3.2 MOPB-1 的特点	(16)
4. 微型计算机优化方法程序库 PC-OPB-1 简介	(16)

参考文献三	(17)
第四章 常用优化方法程序包 DOP-2.....	(18)
1.程序包 DOP-2 的组成、结构和特点	(18)
1.1 程序包 DOP-2 的组成及结构.....	(18)
1.2 程序包 DOP-2 的主要特点.....	(20)
2.常用约束最优化算法	(21)
2.1 外点罚函数法及程序 EXPEN.....	(21)
2.2 内点罚函数法及程序 IPENAL	(25)
2.3 增广 Lagrange 乘子法及程序 MULPEN	(28)
2.4 可行方向法及程序 FEAS	(30)
3.常用无约束最优化算法	(33)
3.1 共轭方向法及程序 CONDIR	(34)
3.2 DFP 变尺度法及程序 DFPM	(36)
3.3 BFGS 变尺度法	(38)
3.4 最速下降法及程序 STEEP	(39)
3.5 共轭梯度法及程序 CONGRA	(40)
4.一维搜索	(41)
4.1 黄金分割法及程序 GOLD	(41)
4.2 二次插值法及程序 QUAD	(42)
4.3 搜索区间的确定(及程序 RANGE).....	(43)
5.公用子程序的功能说明	(43)
5.1 函数子程序及梯度子程序	(43)
5.2 检验约束条件子程序 CONSTR	(43)
5.3 可行初始点子程序 START	(43)
6.程序包 DOP-2 的使用说明	(44)
6.1 程序包 DOP-2 的输入信息.....	(44)
6.2 程序包 DOP-2 的输出信息.....	(46)
参考文献四	(48)
第五章 约束变尺度法及程序 CVM01	(49)
1.概述	(49)
1.1 程序 CVM01 的发展概况	(49)
1.2 程序 CVM01 的特点及适用范围	(49)
2.程序 CVM01 的算法原理	(50)
2.1 二次规划子问题 QP 的形成	(50)
2.2 Powell 算法的基本原理	(53)
2.3 监控技术及其应用	(57)
2.4 其他改进措施	(61)
2.5 程序 CVM01 的算法步骤	(63)
2.6 程序 CVM01 的数值结果分析及应用	(67)

3.程序 CVM01 的分析	(70)
3.1 程序 CVM01 的结构及特点	(70)
3.2 主要标识符的说明	(71)
3.3 主要子程序的功能及分析	(73)
4.程序 CVM01 的使用说明	(75)
4.1 输入信息的说明	(75)
4.2 输出信息的说明	(77)
4.3 计算实例	(79)
参考文献五	(82)
第六章 序列二次规划算法及程序 MARQ	(83)
1.概述	(83)
2.程序 MARQ 的算法原理	(83)
2.1 Biggs 型二次逼近法的数学原理	(83)
2.2 程序 MARQ 的计算方法	(86)
2.3 Lagrange 函数 Hesse 矩阵逆阵的近似与逼近	(87)
2.4 不精确一维搜索	(89)
2.5 起作用约束集与单调性分析技术	(90)
3.MARQ 程序分析	(93)
3.1 程序结构	(93)
3.2 主要子程序分析	(95)
4.程序 MARQ 的使用说明	(96)
4.1 输入信息说明	(96)
4.2 运行实例	(97)
参考文献六	(97)
第七章 广义简约梯度法及程序 GRG-2 和 GRG-C	(98)
1.概述	(98)
1.1 程序 GRG-2 和 GRG-C 的发展概况	(98)
1.2 程序 GRG-2 的特点及应用情况	(98)
1.3 程序 GRG-C 的特点	(99)
2.程序 GRG-2 的算法原理	(100)
2.1 广义简约梯度法的数学原理	(100)
2.2 程序 GRG-2 的算法设计	(112)
3.程序 GRG-C 采用的改进措施	(122)
3.1 单调性分析技术的应用	(122)
3.2 专家系统思想的应用	(125)
3.3 人机对话的处理方式	(127)
4.程序 GRG-2 和 GRG-C 的结构分析	(128)
4.1 总体算法流程	(128)
4.2 程序的总体结构	(131)

4.3 主要子程序的功能及分析	(132)
4.4 GRG-2 和 GRG-C 程序的主要标识符	(141)
5.程序 GRG-2 和 GRG-C 的使用说明	(144)
5.1 存储需求	(145)
5.2 数据准备及输入信息	(145)
5.3 输出信息的说明及其处理	(153)
5.4 应用举例	(157)
参考文献七	(161)
第八章 混合罚函数法及程序 MPOP	(162)
1.概述	(162)
1.1 程序 MPOP 的发展过程	(162)
1.2 程序 MPOP 的特点	(162)
2.程序 MPOP 的算法原理及其算法	(163)
2.1 混合罚函数法	(163)
2.2 罚因子初始值 $r^{(0)}$ 的选取	(164)
2.3 收敛准则	(165)
2.4 混合罚函数法的计算步骤	(166)
2.5 寻找可行点的方法	(166)
2.6 序列无约束极小化过程中初始点的外推	(169)
2.7 一维搜索的四点三次插值方法	(170)
3.程序 MPOP 的分析	(174)
3.1 总体结构	(174)
3.2 主要子程序的分析	(176)
3.3 主要标识符说明	(193)
4.程序 MPOP 的使用说明	(197)
4.1 用户提供的子程序	(197)
4.2 人机对话输入数据的方法	(198)
4.3 卡片输入数据	(204)
4.4 解题举例	(204)
4.5 输出信息说明	(205)
参考文献八	(209)
第九章 约束非线性混合离散变量优化方法及程序 MDOD	(210)
1.概述	(210)
1.1 研究混合离散变量优化方法的意义	(210)
1.2 程序 MDOD 的发展	(211)
1.3 程序 MDOD 的特点及应用	(213)
2.混合离散变量优化设计方法的基本概念	(214)
2.1 混合离散变量优化设计的数学模型	(214)
2.2 离散设计变量及离散设计空间	(214)

2.3 连续变量的离散化	(216)
2.4 混合离散变量问题的最优解	(217)
3.程序 MDOD 的算法原理	(219)
3.1 基本理论	(219)
3.2 程序 MDOD 算法的构造	(226)
4.程序 MDOD 的分析	(234)
4.1 程序 MDOD 的总体结构	(234)
4.2 主要标识符说明	(234)
4.3 主要子程序说明	(235)
4.4 程序的考核及评价	(237)
5.程序 MDOD 的使用说明	(241)
5.1 程序 MDOD 的功能	(241)
5.2 调用程序 MDOD 的规则	(243)
5.3 输入数据和输出说明	(244)
5.4 应用举例	(245)
参考文献九	(247)
第十章 优化方法程序库的考核及评价	(249)
1.概述	(249)
1.1 考核的目的及意义	(249)
1.2 程序库 OPB 考核的基本情况	(250)
2.评价准则	(250)
2.1 几种评价准则与评价方法	(250)
2.2 可靠性评价指标的确定	(252)
2.3 有效性评价指标的确定	(254)
3.考题的选择	(256)
3.1 考题选择的原则	(256)
3.2 考题的分类原则	(257)
3.3 无约束优化考题的特性分析	(258)
3.4 有约束优化考题的特性分析	(258)
4.考核结果及分析	(276)
4.1 无约束优化方法的考核结果及分析	(276)
4.2 有约束优化方法的考核结果及分析	(278)
参考文献十	(281)
附录 I 微型计算机常用优化方法程序库 PC-OPB-1 使用说明	(282)
1.概述	(282)
1.1 前言	(282)
1.2 常用优化方法程序包 OPB-1 的总体结构	(282)
1.3 基本调用方法	(282)
1.4 运行前准备工作	(283)

1.5 运行操作步骤	(285)
2.数学规划算法程序包 DOP 使用说明	(285)
2.1 结构	(285)
2.2 输出信息的基本内容	(286)
2.3 外罚函数程序 EXPEN 的操作及运行实例	(286)
2.4 增广乘子法 MulpEN 操作及运行实例	(287)
3.约束变尺度法程序包 CVM01 使用说明	(288)
3.1 算法原理	(288)
3.2 操作及运行实例	(288)
4.拟牛顿乘子法程序 QNM01 使用说明	(290)
4.1 算法原理	(290)
4.2 操作说明	(290)
5.序列二次规划法程序 MARQ 使用说明	(292)
5.1 算法原理	(292)
5.2 操作说明及考题实例	(292)
6.广义简约梯度法程序 GRG-C 使用说明	(294)
6.1 算法原理	(294)
6.2 编写主程序和函数子程序的说明	(294)
6.3 操作说明	(294)
7.混合罚函数法程序 MPOP 使用说明	(296)
7.1 算法原理	(296)
7.2 操作说明	(296)
8.混合离散变量规划程序 MDOD 使用说明	(299)
8.1 算法原理	(299)
8.2 用户准备工作	(299)
8.3 操作与运行实例	(301)
附录 II 本课题主要研制人员名单	(303)
附录 III 微型计算机优化方法程序库 PC-OPB-1 源程序	(304)
1.DOP 源程序	(304)
2.CVM01 源程序	(329)
3.MARQ 源程序	(354)
4.GRG-C 源程序	(366)
5.MPOP 源程序	(410)
6.MDOD 源程序	(449)

第一章 优化算法和优化软件

1. 优化方法和优化软件的发展简况

人们在**进行各种设计工作时**，总是力求从各种可能方案中选择最优方案，这就是优化设计的基本思想。当然，我们讨论的优化设计是一种现代设计方法，建立在最优化数学理论和现代计算技术的基础之上，其任务在于运用计算机自动确定设计的最优方案。

优化技术应用的前提在于先进的优化计算方法和优秀的计算机软件。算法是软件的理论基础，而软件则是算法的实践保证。两者的研究都是极为重要的，都是本书论述的重点。

在本书开始的时候，有必要回顾一下优化方法和优化软件的发展情况。

1.1 优化计算方法概述

工程优化设计问题一般地可以表示为数学规划问题，其数学模型为：

$$\text{极小化目标函数} \quad \min f(\mathbf{x}) \quad \mathbf{x} \in E^n \quad (1-1)$$

$$\text{满足于等式约束条件} \quad s.t. h_j(\mathbf{x}) = 0 \quad j = 1, 2, \dots, m, \quad (1-2)$$

$$\text{满足于不等式约束条件} \quad g_j(\mathbf{x}) \leq 0 \quad j = m+1, m+2, \dots, p \quad (1-3)$$

这里，设计变量 $\mathbf{x} \in E^n$ 表示 $\mathbf{x}$ 为一个 n 维向量 $(x_1, x_2, \dots, x_n)^T$ 。

优化的过程可以描述成为：在满足 m 个等式约束条件 (1-2) 和 $p-m$ 个不等式约束条件 (1-3) 的前提下，不断地调整设计变量 $\mathbf{x}$ ，最终实现目标函数 $f(\mathbf{x})$ 的极小化。

在上述优化数学模型中，当不包含任何约束条件时，为无约束极值问题；当目标函数及各个约束条件均为设计变量的线性函数时，就构成了线性规划问题。无约束极值问题和线性规划问题，是数学规划的两个重要的特殊类型。它们在理论上和算法上都相当成熟，不仅在实际上有着广泛的直接应用，而且也是解决约束非线性规划问题的基础。

实际上，工程优化设计问题绝大多数属于约束非线性规划范畴，因而本书讨论的优化方法及软件，都是属于这个范畴。

求解约束非线性规划的各种数值优化算法的基本思想，都是构造一系列比较简单的子问题，这一系列子问题的最优解最终逼近原问题的最优解。各种算法之间的主要区别，就是构造子问题的方法不同，即构造什么样的子问题？怎样构造子问题？根据构造子问题的类型，各种算法大致可以分为三种类型：

(1) 构造线性规划子问题——容许方向法

这类算法最原始的想法 (SLP 序列线性规划法) 是逐次构造线性规划子问题，因而采用单纯形法求解子问题。对于非线性约束条件，这种算法收敛很慢，甚至于不能收敛。为了克服 SLP 的缺点，陆续提出了许多不同的算法。如：小步梯度法、割平面法、投影梯度法、简约梯度法等等。在这些算法中，广义简约梯度法 GRG 是最为先进的一种。根据多次国际上权威性的考核分析，一致认为 GRG 是目前求解一般非线性规划问题的最有效方法之一。

(2) 构造无约束极值子问题——惩罚函数法

算法的基本思想是构造无约束极值子问题。60 年代，惩罚函数法已趋成熟。这种算法将

约束条件以惩罚项的形式和目标函数共同构成罚函数, 构成无约束优化子问题。当惩罚因子 $r^{(k)}$ 趋于无穷, 子问题的解 $\mathbf{x}^{(k)}$ 趋向于原问题的最优解 $\mathbf{x}^*$ 。算法可分为外点罚函数法、内点罚函数法及混合罚函数法。惩罚函数法的特点是算法简单, 容易推广, 因而在国内外得到了广泛的应用。惩罚函数法的缺点是收敛速度较慢, 特别是当惩罚因子趋向无穷时, 构造的罚函数子问题不可避免地发生病态, 收敛发生困难。

1969 年提出的增广乘子法, 引入了 **Lagrange** 乘子 λ , 算法中当 λ 趋向于 λ^* 时, $\mathbf{x}^{(k)} \rightarrow \mathbf{x}^*$ 。这样, 惩罚因子 $r^{(k)}$ 只需趋向于某一固定值, 不必趋向于无穷。于是使新构造的无约束子问题的病态性大为减轻, 进而使收敛速度有所提高。对惩罚函数法的另一种改进方案引导出精确罚函数法。增广乘子法和精确罚函数法, 被列为求解约束非线性优化问题的最有效方法之一。

(3) 构造二次规划子问题——序列二次规划法或约束变尺度法

自 70 年代以来, 这种算法得到很大发展, 基本上可以分为两类。两类算法都是将原问题转化为一系列二次规划子问题, 以这些子问题的解, 构成了本次迭代步的搜索方向 $\mathbf{d}^{(k)}$, 沿方向 $\mathbf{d}^{(k)}$ 寻优的结果, 最终逼近原问题的最优点, 故都可称为序列二次规划法; 两类算法又都是利用拟牛顿法(变尺度法)近似构造海色矩阵, 以建立二次规划子问题, 故又可称为约束变尺度法(拟牛顿法)。两类算法各有特点: 前者是从分析罚函数极小点的轨迹出发推导出来的, 算法采用了起作用约束集的策略, 因而建立的是等式约束二次规划子问题, 这种问题存在解析解; 后者是从牛顿法求解最优性条件出发推导出来的, 建立的二次规划子问题包含全部不等式约束, 因而需要数值解法。这两种算法, 被认为是目前最先进的非线性规划计算方法。

除了上述三种类型基本的算法以外, 80 年代还发展了许多先进的优化技术, 如: 确定步长的监控技术和确定起作用约束条件集的单调性分析技术等。这些技术可以改善各种算法的收敛性质。

由于常用优化方法程序库 OPB 中包含了上述各种具有先进水平的优化算法和优化技术, 本书将对这些算法和技术进行比较深入的论述。

1.2 国际上优化软件的发展简况

优化方法软件是最优化方法和优化设计实践之间的桥梁, 对于最优化方法的推广和应用起着关键性的作用, 因而越来越受到人们的重视。

早期的最优化程序没有单独存在, 往往是针对某项问题而特别编制的, 质量一般不高。后来, 陆续出现了专门的最优化方法程序, 可以供人们在优化设计中使用。这类程序具有一定的共享性, 使广大工程技术人员节省了大量的时间, 因而受到了热烈的欢迎。然而, 一般而言, 这类程序存在两个严重缺点: 一是可靠性差; 二是通用性差, 给使用者带来很大的困难。

70 年代以来, 国外对最优化软件非常重视, 研制了一批最优化方法程序, 最优化方法的软件发展非常迅速。这些程序的主要特点在于质量高, 可靠性好。这些优化程序主要以两种形式存在:

(1) 大型数学软件库的一部分。国外近来研制了许多综合性的大型数学软件库, 库中一般包括部分优化程序。如: 美国的 IMSL 库, 共有 500 多种计算方法程序。这个库包含的优化程序不多, 而且缺乏最重要的约束非线性规划算法程序。又如英国的 NAG 库, 包含了 35 个有关最优化方法的程序。NAG 程序的特点是考虑到了各种用户的需要, 对熟练的用户和没有经验的用户提供不同的程序。实际上, 程序库 NAG 在约束非线性规划方面相当薄弱。再如英

国的 HARWELL 库, 包含了许多最优化程序, 这些程序大都是一些访问学者在 HARWELL 访问时编制的, 内容比较丰富, 算法比较先进。就优化部分而言, HARWELL 的水平很高。该库的缺点是: 各个程序之间没有联系, 也没有统一说明文件, 用户使用不方便。另外, 美国斯坦福大学国家物理实验室研制的优化程序库 NPL 在算法和软件两个方面都居于先进水平, 这个库由一组优化工作者经过长期持续的工作逐渐发展成功, 而且还在不断更新版本, 因而一直保持着领先地位。

(2) 常用优化方法程序包。这类软件一般都具有很高的软件水平, 可靠性好, 稳定性好, 服务功能完善, 易于学习和使用。这类软件受到用户的欢迎, 促进了最优化方法的推广应用。例如, CMIN16 是先进且成熟的惩罚函数法程序包; GRG-2 是先进且成熟的广义简约梯度法程序包; NLP 是成熟的增广乘子法程序包; ORQP/XROP 是成熟的序列二次规划法程序包; VMCWD 是成熟的约束变尺度法程序包。由于实际优化问题是非常复杂的, 而目前尚未有一种算法能解决全部各种类型的非线性规划问题, 因此, 这些单个的优化方法程序包往往适用于某些类型的优化问题。

1.3 我国优化方法及软件的研究情况

我国在优化方法方面的研究工作起步并不迟, 但由于各方面的原因, 进展较慢, 目前距离国际先进水平尚有一定的差距。另一方面, 优化方法在我国各行各业中的应用还是比较广泛的, 优化软件的研制速度也是比较快的。

1978 年以后, 加快了优化方法及优化软件的研究工作步伐。1982 年 9 月在兰州召开的全国第一次优化设计经验交流会, 检阅了全国各单位这方面的成果, 虽然论文内容多属于初步的应用, 但说明发展是迅速的。1983 年 5 月在屯溪召开了全国优化设计程序交流会, 很多单位无偿地提供了自己研制的优化程序, 得到了与会同志的好评。但是这些程序编制的水平不一, 规格不统一, 不便于推广及使用。当时, 在全国范围内, 存在着严重的低水平重复劳动的现象。

针对这种情况, 《常用优化方法程序库的研究》列入了“六五”国家科技攻关计划。经过三年的科研攻关, 内容完备且水平先进的优化方法软件库 OPB-1 研制成功了。OPB-1 的研制成功, 标志着我国优化软件的研制工作达到了国际先进水平, 为在我国推广应用优化技术提供了良好的基础和先进的手段。

2. 研制优化方法程序库的意义及展望

工程优化设计, 包括两个方面的内容: 一是将工程实际问题抽象成为优化设计的数学模型; 二是应用最优化数值方法求解这个数学模型。工程优化设计的数学模型, 是设计问题的数学表现形式, 反映了设计问题中各主要因素间内在联系的数学关系。因此, 从工程实际问题中抽象出正确的数学模型, 是工程优化设计的关键, 也是工程设计人员进行优化设计的主要任务。至于求解这个数学模型的优化方法, 则是工程设计的一种工具, 属于计算数学和应用数学的范畴。研制优化方法程序库的主要目的, 就是为了提供一个先进且实用的工具。工程设计者们只要懂得优化算法的基本原理和优化软件的使用方法, 就可以得心应手地使用这个工具去解决工程优化设计问题。这样, 工程设计者们就能够集中精力去解决优化数学模型的主要任务, 使工程优化设计达到更高的水平。

为工程优化设计工作者提供优良的工具,以利于在我国推广应用优化新技术,这是研制优化方法程序库 OPB-1 的出发点,也是研制工作的目的。本着这个宗旨,OPB-1 中集中了目前国际上最先进的各种优化算法,收集了各种优秀的优化软件,达到了先进和实用两个目标。目前,OPB-1 在国内已有成百上千的用户,开始推广应用。实际运用的结果进一步说明了研制优化方法程序库的重大意义。

在研制 OPB-1 的过程中,为了赶上世界先进水平,引进和自行研制了约束变尺度法、序列二次规划法、广义简约梯度法、离散变量优化方法等代表最新水平的优化方法软件。这些工作使我国优化方法及其软件的研制工作提高到了新的水平,因而也具有重要的学术价值。

优化方法程序库 OPB-1 仍然存在着许多不足之处。无论是从算法的完整性、软件的先进性及程序库的成熟性等哪方面来看,都还存在可以进一步改进的地方。同时,进一步改善 OPB 的服务功能,也是在国内推广应用优化技术的需要。另一方面,目前在国际上,优化方法的研究和应用得到了普遍的重视,优化软件的研制工作发展很快,软件更新的速度非常迅速。只有对 OPB 进行不断地更新和改进,才可能继续保持先进水平。

优化方法的广泛实际应用对优化方法程序库提出了更高的要求,促进了优化软件的更新工作。目前,OPB-1 用户们的意见和要求已反馈到我们这里,对于更新版本 OPB-2 的研制工作起到了重大作用。

参考文献一

- (1) D.M.希梅尔布劳著,张义桑等译,《实用非线性规划》,科学出版社,1981
- (2) R.L.福克斯著,张建中、褚梅芳译,《工程设计的优化方法》,科学出版社,1981
- (3) D.G.Luenberger 著,夏尊铨等译,《线性与非线性规划引论》,科学出版社,1980
- (4) 席少霖、赵凤治:《最优化计算方法》,上海科技出版社,1983
- (5) 余俊、廖道训:《最优化方法及其应用》华中工学院出版社,1984
- (6) K.Schittkowski:《Nonlinear Programming Codes: Information, Tests, Performance》,Springer-Verlag, 1980
- (7) P.E.Gill, W.Murray, M.H.Wright:《Practical Optimization》, Academic Press, 1981
- (8) R.Fletcher:《Mathematical Programming-The State of the Art》, Springer-Verlag, 1983
- (9) G.V.Reklatis, A.Ravindran, K.M.Ragsdell:《Engineering Optimization-Methods and Applications》, John Wiley & Sons, 1983

第二章 优化方法程序库 OPB-1 概述

1. 程序库 OPB-1 的总体结构

OPB-1 是一个非线性规划优化方法程序库，主要用于解决工程优化设计中占主要成分的非线性规划问题，也能解决线性规划问题及无约束极值问题。

OPB-1 包括了五个相互独立的子程序包，其中含有 10 种非线性规划算法程序。OPB-1 的总体结构如图 2-1 所示。

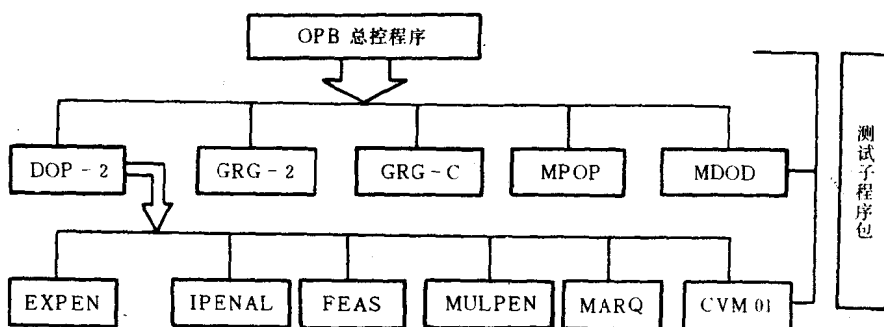


图 2-1 OPB-1 的总体结构

五个非线性规划子程序包分别为：

DOP-2 常用优化方法程序包

GRG-2 广义简约梯度法程序

MDOD 混合离散变量的直接搜索程序。

GRG-C GRG-2 的改进程序

MPOP 混合罚函数法程序

其中，DOP-2 包含了六种非线性规划算法程序：

EXPEN 外点罚函数法程序

IPENAL 内点罚函数法程序

FEAS 可行方向法程序

MULPEN 增广乘子法程序

MARQ 序列二次规划算法程序

CVM01 约束变尺度法程序

各子程序包中又包含了多种无约束极值算法程序和线性规划子程序。

这十个非线性规划算法程序各有特点，各有所长，结合在一起形成了内容完整的优化方法程序库。各算法程序也可以独立成包，分块单独使用；还可以作为子程序纳入其它实用软件系统，以完成设计中优化部分的工作。这样，可以灵活地适应不同用户的使用条件。

OPB-1 在总体结构和各程序内部都采用了模块化技术。优化运行程序由三部分组成：

优化运行程序 = 主程序 + 优化方法子程序 + 优化模型函数子程序

优化方法子程序在 OPB-1 中调用，用户需要编写主程序和优化模型函数子程序。

为了提高程序库的实用性，OPB-1 中基本实现了三个统一：

(1) 用户提供的函数子程序及输入输出数据形式统一；

(2) 各算法程序的技术文件和使用手册的格式统一；

(3) 考题及考核标准统一。

三统一的目的在于方便用户，使用户易于熟悉、掌握和使用各算法程序。用户在选用不同的优化方法时，只需要对某些控制参数赋不同的数值即可。这样，对于进行工程优化设计是十分有利的。

OPB-1 共有 FORTRAN 程序语句 14399 条。目前，OPB-1 已在国内多种大中小型计算机上运行，例如大中型计算机 IBM4341、HONEYWELL DPS 8/52；小型计算机 VAX11/730；微型计算机 MC68000、IBM-PC 等。为了适应微型计算机特点，IBM-PC 机适用的 PC-OPB-1 程序库进行了修改和删减，还含有 FORTRAN 语句 8000 条左右。

无论是适用于大中型计算机的版本，还是适用于微型计算机的各种版本，OPB-1 都配置了专用的库管理系统，其目的在于对程序库进行科学的管理。

例如在 DPS 8/52 计算机上，OPB-1 以 LIBRARY/OPB 的名字存入系统程序库内。全部算法程序以子程序的目标文件（随机文件）的形式存放于库内，由专用菜单进行管理，可以方便地对库中的文件调用、运行、增删和更新。

又如在 MC68000 微型计算机中，采用了用 UNIX 命令语言编成的总控程序 CONTR 进行管理，将各子程序块作为变量，在输入时进行选择运行。并可以通过 CONTR 程序一次完成算法程序的编译、连接、运行及输出等多项任务。

各种版本的 OPB-1 都配备有人机对话式的使用指南程序 HELP，介绍程序库的内容、特点及使用方法，可根据用户的需要，具体指导用户正确使用每个算法程序。

2. OPB-1 中主要算法程序的内容及特点

2.1 常用优化方法程序包 DOP-2

DOP-2 程序包结构上可以分为四个层次：

第一层次是六种约束非线性规划优化方法：外点罚函数法 EXPEN，内点罚函数法 IPENAL，可行方向法 FEAS，增广乘子法 MulpEN，序列二次规划算法 MARQ 和约束变尺度法 CVM01。

第二层次是五种无约束极值优化方法：共轭方向法 CONDIR，最速下降法 STEEP，共轭梯度法 CONGRA；变尺度法 DFP 和 BFGS。

第三层次是两种一维搜索方法：黄金分割法 GOLD，二次插值法 QUAD。

第四层次是若干公用子程序块，如求梯度的子程序等。

DOP-2 共包括 51 个子程序块，全部采用模块化结构，组合性能好，用户只需输入不同的组合选择参数，即可选择使用各个层次上的不同方法程序块。

外点罚函数法和内点罚函数法是 60 年代流行的优化算法，至今仍在我国广为使用。其特点是算法和程序简单易行，收敛性尚好。当罚因子趋向于无穷（或零）时，外罚函数（内罚函数）子问题不可避免地出现病态现象，这就是这两类算法程序收敛速度慢和精确度差的原因。

增广乘子法程序与 EXPEN 非常相似，区别在于构造的子问题有所不同。MulpEN 的子问题中，除了与外罚函数相同的部分外，还增加了一项，即 Lagrange 乘子的估算值。这样，惩罚因子仍是一个递增的数列，但其极值不是无穷大，而是某个充分大的正数，避免了外罚函数法中可能出现的病态现象。增广乘子法程序 MulpEN 的可靠性较好，收敛速度较快，缺

点是对运行参数比较敏感。

可行方向法程序 FEAS 的基本思想,是在迭代点构造线性规划子问题,以求得该点的搜索方向。要求这个方向既使目标函数下降,又满足约束条件,即可行下降方向。该程序对于非线性程度较弱的约束极值问题效果一般较好,但对非线性程度强的约束极值问题可能会有困难。这类方法目前已不大有人使用。

DOP-2 中的上述内容将在本书第四章详细论述。序列二次规划法程序 MARQ 和约束变尺度法程序 CVM01,是具有先进水平的非线性规划算法程序,将分别在第六章和第五章中讨论。

2.2 约束变尺度法程序 CVM01

Powell 型约束变尺度法形成于 70 年代末期,是目前国际上最先进的非线性规划算法之一。CVM01 在算法上对 Powell 约束变尺度法进行了改进,是 OPB-1 中最优秀的算法程序之一。CVM01 的基本思路是:对优化问题〔式(1-1)~(1-3)〕产生 Lagrange 函数,利用这个函数在每个迭代点构造一个带不等式约束条件的二次规划子问题。这个子问题不易求解析解,只有借助于数值方法求得其极值解。每次迭代的二次规划子问题的极值解,作为该次迭代的搜索方向。采用不精确一维搜索可以确定搜索步长因子,产生新的迭代点。一系列这样的迭代点最终逼近原问题的解。CVM01 的改进工作主要在三个方面:

(1) 运用监控技术改进确定搜索步长的策略,克服了沿弯曲的约束边界搜索的低效率或不收敛现象,改善了约束变尺度法收敛性质。

(2) 单调性分析技术的引进,改善了基于投影梯度法的二次规划子程序的功能。

(3) 采用 BFGS 公式加参数调整形成的 Hesse 矩阵修正方法,避免了 Hesse 矩阵的奇异状态。

CVM01 的优点是算法先进、解题效率高,在对程序库进行考核时,CVM01 是平均函数调用次数最少的算法程序。CVM01 的另一个优点是可靠性好,对于运行参数选择的依赖性很小,深受用户欢迎。

2.3 序列二次规划算法程序 MARQ

Biggs 型序列二次规划法亦形成于 70 年代末期,是目前国际上另一个最先进的非线性规划算法。MARQ 是在 Biggs 算法的基础上的一种改进型算法程序。

MARQ 的基本思路是:在每个迭代点,运用单调性分析技术确定起作用约束集合;然后,将优化问题〔式(1-1)~(1-3)〕在该点构造一个带惩罚项的等式约束二次规划子问题。这个子问题具有解析解,这个解析极值解就是该次迭代的搜索方向,沿此方向进行不精确一维搜索,得到新的迭代点。由于利用了包含目标函数与约束条件的二阶导数的 Hesse 矩阵的信息,算法的收敛速度大为提高。由于惩罚因子不必趋于无穷大,从而在逼近原问题的解时,避免了 Hesse 矩阵的奇异。

与 CVM01 相比较,MARQ 调用函数的次数较多。其原因在于,CVM01 构造的二次规划子问题包括了全部不等式约束条件的信息,而 MARQ 的子问题则只包括了局部上起作用的约束条件,损失了一部分信息。然而,由于 MARQ 不必用数值方法解二次规划子问题,因而在多数情况下解题运行时间比 CVM01 少。单调性分析技术用以判断起作用约束集合,使迭代过程简化,且能大踏步地向最优优点逼近,有助于提高算法的效率。MARQ 的另一个特点是短小精巧,仅有 400 多条语句,便于使用和移植。它的缺点是对运行参数的选择比较敏感,软