

优化方法与 机械优化设计

黄家驷 编著

华南工学院出版社

TH12
1438

优化方法与机械优化设计

黄家骧 编著

华南工学院出版社

内 容 简 介

随着电子计算机技术的发展,最优化方法已得到广泛的应用。采用最优化方法,可以寻求最优化的决策,以获得最佳的技术方案和经济效益。

本书从工程技术的应用出发,着重阐述最优化方法的基本概念和计算方法。本书后一部分有代表性地介绍若干机械零件、部件以及机构的优化设计方法。书中每一章节都列举例题,有利于对问题的理解;同时每一方法还给出其计算程序框图,为编写算法程序提供方便。

本书可作为高等工业院校机械类高年级学生、研究生的教材或参考书,亦可供机械设计和研究部门的技术人员参考。

优化方法与机械优化设计

黄家骥编著

*

华南工学院出版社出版

(广州 石牌)

*

广东省新华书店发行 华南工学院出版社印刷厂印刷

开本 787×1092 1/16 印张: 15 字数: 330千

1986年6月第一版 1986年6月第一次印刷

印数: 1—3000

书号: 15410·007 定价: 2.40元

前 言

最优化方法是应用数学的一分支。随着工程技术的复杂化、大型化与精密化，经济计划与管理的科学化和综合化，要求寻找最优的决策，以获得最佳的技术方案和经济效益。与此同时，电子计算机的迅速发展，促使最优化的理论和方法得到了丰富和发展，这一应用数学分支已成为一门新兴的学科并且得到广泛的应用。

本书从工程技术的应用出发，着重阐明最优化方法的基本概念和计算方法。内容的阐述力求做到深入浅出，每一算法都列举例题，籍以加深算法的理解和便于自学。每一算法还列出其计算程序框图，以说明其辑逻辑关系，为编写算法程序提供方便。

机械优化设计是建立在最优化方法的基础上，为解决机械设计而开拓出新的设计理论和方法，是计算机辅助设计的一个重要组成部分。

本书后面的章节将阐述有关机械零件、部件与机构的优化设计问题。但是，机械设计涉及的内容颇多，对于不同类型的问题，设计者根据设计条件的要求以及期望的指标，建立出相应的数学模型，引用适当的优化方法，问题便可以获得完满的最优方案。所以，本书只须以典型性的设计方法为前提，有选择地阐明若干机械零件，部件与机构的优化设计，即可以达到举一反三的效果。例如：三角皮带传动优化设计着重于阐明数表与图表的处理方法；螺旋压缩弹簧优化设计着重于介绍计算机逻辑的判断方法；离合器优化设计着重于解决多目标函数的求解方法等等。

在机械优化设计过程中，不可避免地涉及有关专业的基本计算内容，为有利于解决实际问题起见，本书作出了必要的阐述。

书中引用了一些同志的科研成果；并蒙华南工学院熊文修教授审阅，提供了宝贵意见，对此均表示衷心的感谢。

由于作者的理论水平 and 实践经验所限，书中的缺点与错误在所难免，盼望读者提出宝贵意见和指正。

编 者

一九八五年十二月

目 录

第一章 概论	(1)
1-1 优化方法.....	(1)
1-2 数学规划.....	(4)
1-3 凸性.....	(4)
1-4 梯度与海赛矩阵.....	(7)
1-5 最优解的必要充分条件.....	(10)
1-6 迭代方法.....	(18)
第二章 一维搜索	(21)
2-1 牛顿法.....	(21)
2-2 平分法.....	(24)
2-3 .618法.....	(26)
2-4 抛物线法(二次插值法).....	(30)
2-5 三次插值法.....	(32)
第三章 无约束非线性规划	(36)
3-1 梯度法.....	(36)
3-2 牛顿法.....	(39)
3-3 共轭性与共轭方向.....	(43)
3-4 共轭梯度法.....	(48)
3-5 变尺度法(DFP法).....	(50)
3-6 随机方向法.....	(55)
3-7 坐标轮换法.....	(57)
3-8 模式搜索法(Hooke Jeeves法).....	(59)
3-9 方向加速法(Powell法).....	(63)
3-10 单纯形法.....	(69)
第四章 线性规划——单纯形法	(74)
4-1 引言.....	(74)
4-2 线性规划数学模型的标准形式.....	(75)
4-3 基本变量与非基本变量.....	(77)
4-4 基底的转换.....	(79)
4-5 进基变量 x_k 的选择.....	(81)
4-6 离基变量 x_l 的选择.....	(82)
4-7 单纯形法.....	(82)
第五章 有约束非线性规划	(88)
5-1 线性逼近法.....	(88)

5-2	罚函数法 (SUMT 法)	(91)
5-3	梯度投影法 (Rosen 法)	(98)
5-4	可行方向法 (Zoutendijk 法)	(106)
5-5	复合形法	(111)
	小结	(117)
第六章	机械优化设计概论	(119)
6-1	引言	(119)
6-2	机械优化的基本要素	(120)
6-3	整型与离散型的设计变量	(121)
6-4	多目标数学规划	(123)
第七章	数表与线图的程序化	(128)
7-1	数表的程序化	(128)
7-2	线图的程序化	(130)
7-3	函数插值	(131)
7-4	数表的公式化	(134)
第八章	三角皮带传动的优化设计	(142)
第九章	齿轮传动的优化设计	(150)
9-1	按重量最小的齿轮传动比分配优化设计	(150)
9-2	按中心距之和为最小的齿轮优化设计	(153)
第十章	螺旋弹簧的优化设计	(158)
10-1	圆柱螺旋压缩弹簧在优化设计中的设计变量、目标函数与约束条件	(158)
10-2	可行域的分析	(162)
第十一章	凸轮机构的优化设计	(169)
11-1	凸轮机构的计算公式	(169)
11-2	按基圆半径最小的凸轮机构的优化设计	(172)
第十二章	摩擦离合器的优化设计	(177)
12-1	镶块与从动盘的型式及其计算公式	(177)
12-2	长圆形浮动镶块式摩擦离合器的优化设计	(179)
第十三章	机身的优化设计	(183)
13-1	开式压力机机身的优化设计	(183)
13-2	框架机身的优化设计	(188)
第十四章	平面多杆机构的优化设计	(196)
14-1	用分组法求解多杆机构的运动参数	(196)
14-2	用分组法求解多杆机构的作用力	(203)
14-3	平面多杆机构的优化设计	(214)

参考资料

第一章 概 论

1-1 优化方法

优化方法是在工程设计、生产技术、科学试验和计划管理等许多方面，为寻求种种措施以获得最好的结果，经过长期以来的数学归纳与提炼，并随着电子计算机技术的发展而建立起来的一门新学科。目前优化方法一般有两个特点：一、是数值计算方法，而不是分析方法；二、是具有简单逻辑结构的、能进行反复使用同样的算术运算的方法。优化方法的目的是：对于一个给定的问题，在这一问题可能的解中、按某种有效性或可使用性的准则来寻求最好的可能的解。

优化方法有如下几种：

解析法 它是利用微分学和变分法的经典方法，通过寻找使函数 $f(X)$ 对 X 的导数等于零的 X 值，从而得到函数的极值。

数值法 它是利用已有的资料，通过迭代程序来产生最优化问题的更好的解。

图解法 它将求解极大值或极小值的函数作为单变量或多变量函数，画出其图形，函数的极值，在图形上通过直接观察来得到。

实验法 一个函数的极值可通过实际变化过程的直接实验的办法来得到，而不做数学上的运算。

情况研究法 把同一问题的许多典型解进行估计，以确定可能的最好解。

本书的内容就是阐述各种数值法。优化方法包括两部分：

1. 从物理模型构造数学模型

最优化问题的数学模型可表达为：

极小化目标函数 $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ 1-1-1

并且满足于约束条件 $g_i(x_1, x_2, \dots, x_n) \leq 0 \quad i=1, 2, \dots, n$ 所谓目标函数是我们追求的最优指标与自变量间的函数关系式，例如重量关系式、效率关系式、面积关系式。所谓约束条件是自变量间的相互制约关系。

最优化问题的数学模型（即立出目标函数和给出相应的约束条件）的构造因问题而异，十分复杂，没有一定规律可循，往往要由实际工作者和数学工作者共同研讨。

举一个简单的例子来说明，如图 1-1-1 所示的双臂架是由两钢管组成，上端用销连接一起，下端采用铰接方法固定。设两足跨距为 $2a$ ，载荷为 $2Q$ ，现选择架的高度，管厚和管的平均直径，使达到双臂架重量轻的要求。

设 x_1 、 x_2 、和 x_3 分别为管的平均直径、管壁厚度和架的高度。则双臂架重量为

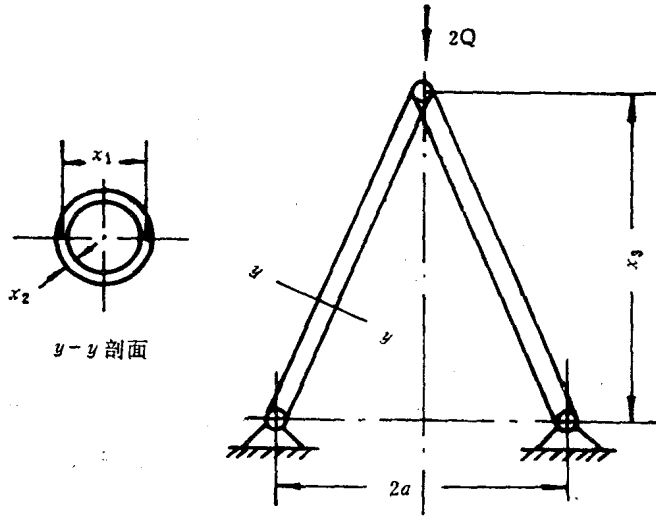


图 1-1-1 双臂架

$$2\pi\gamma x_1 x_2 (a^2 + x_3^2)^{1/2}$$

式中 γ 为钢管的比重。设计问题的约束条件有：

- (1) 由于空间的限制，双臂架高度不得超过 b_1 ，即 $x_3 \leq b_1$
- (2) 管径与管厚之比不得超过 b_2 ，即 $x_1/x_2 \leq b_2$
- (3) 钢管的压应力不得超过钢材的屈服限，即

$$Q(a^2 + x_3^2)^{1/2} \leq b_3 x_1 x_2 x_3$$

其中 b_3 为常数。

- (4) 架的高度，管径和管厚的选择应保证在载荷下不发生失稳，即

$$Q(a^2 + x_3^2)^{3/2} \leq b_4 x_1 x_3 (x_1^2 + x_2^2)$$

其中 b_4 为常数。

于是整个设计问题的数学模型可以表达成：

$$\text{极小化 } x_1 x_2 (a^2 + x_3^2)^{1/2}$$

$$\text{满足于 } x_3 - b_1 \leq 0$$

$$x_1 - b_2 x_2 \leq 0$$

$$Q(a^2 + x_3^2)^{1/2} - b_3 x_1 x_2 x_3 \leq 0$$

$$Q(a^2 + x_3^2)^{3/2} - b_4 x_1 x_3 (x_1^2 + x_2^2) \leq 0$$

$$x_1, x_2, x_3 > 0$$

2. 求解数学模型

这就是在建立数学模型后,利用各式各样的优化方法,在满足约束条件下求解目标函数的极值问题。如果满足(1-1-1)式中每一个不等式约束的点,称为可行点。所有可行点的集合构成一个可行域。在这一可行域内有一个点 X^* 比较其它的可行点 X 都有 $f(X^*) < f(X)$,则称 X^* 点为最优点。对应的目标函数值 $f(X^*)$ 称为最优值, X^* 和 $f(X^*)$ 一起构成一个最优解。如果目标函数不是单峰的(即只有一个极值),而是多峰函数,则存在不同型式的最优解。一个全局最优解代表 $f(X)$ 的最小值,而一个局部最优解则代表 $f(X)$ 在某个矢量 X 附近的最小值。对于全局的局部的极小都有:

$$f(X^*) \leq f(X)$$

但是全局最优解涉及 E^* 中的所有 X ,而局部最优解则涉及一个小区域 δ ,在那里 $\|X - X^*\| < \delta$,

例如,对于一维情况(图1-1-2), $f(X) = X \sin X$ 在区间 $D = (0, 4\pi)$ 上的图形,当 $X_1^* = \frac{7}{2}\pi$ 时, $f(X)$ 取到全局极小值, X^* 就是 $f(X)$ 在区域 D 上的全局极小点,而 $X^* = \frac{3}{2}\pi$,则是 $f(X)$ 的局部极小的。

例如,图1-1-3所画曲线是曲面 $Y = f(x_1, x_2)$ 的等值线,如标记30的曲线,表示平面 $y = 30$ 在曲面 $Y = f(x_1, x_2)$ 上的截口,显然图1-1-3中所对应的点 (x_1^*, x_2^*) 是

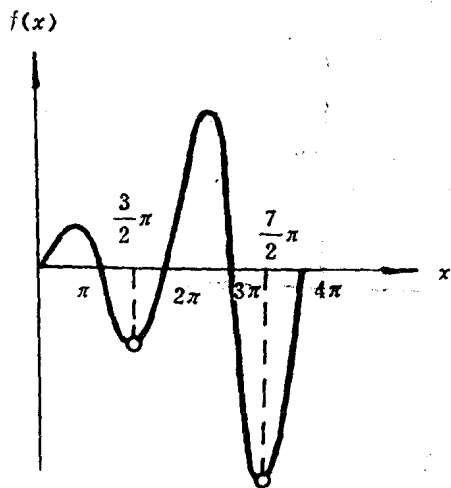


图 1-1-2 一维极小

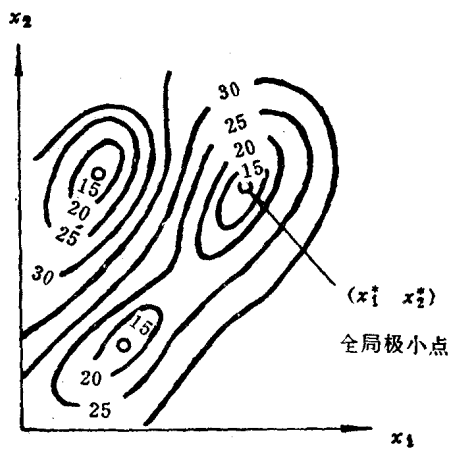


图 1-1-3 二维极小

函数 $f(x_1, x_2)$ 的全局极小点,而标记15和10的点,则为局部极小点。

在往后,虽然着重讨论求目标函数的极小化问题,但在原理上和方法上并不失去普遍性,因为每一个极大化问题,即求解极大化目标函数 $\varphi(X)$ 时,可以用极小化目标函

数 $f(X) = -\tau(X)$ 来代替。当约束条件为 $g_i(X) \geq 0$ 时，可以用约束条件 $g_i(X) = -g_i(X) \leq 0$ 来代替。

1-2 数学规划

由于目标函数及约束条件具有不同性质，数学规划被分为：

线性规划 当 $f(X), g_i(X)$ 均为线性函数时；

二次规划 当 $f(X)$ 为二次函数， $g_i(X)$ 为线性函数时；

非线性规划 只要 $f(X)$ 或 $g_i(X)$ 中有非线性的函数时。自然二次规划也归为非线性规划。

1-3 凸性

凸性和凹性的概念有助于确定在什么条件下一个局部最优解也是一个全局最优解。首先讨论一元函数 $y = f(x)$ 的情况（图 1-3-1）。在曲线上取任意两点 A, B 并作它们的连线 AB ，在连线中取任意点 C ，令

$$BC:AB = \lambda:1 \quad 0 \leq \lambda:1$$

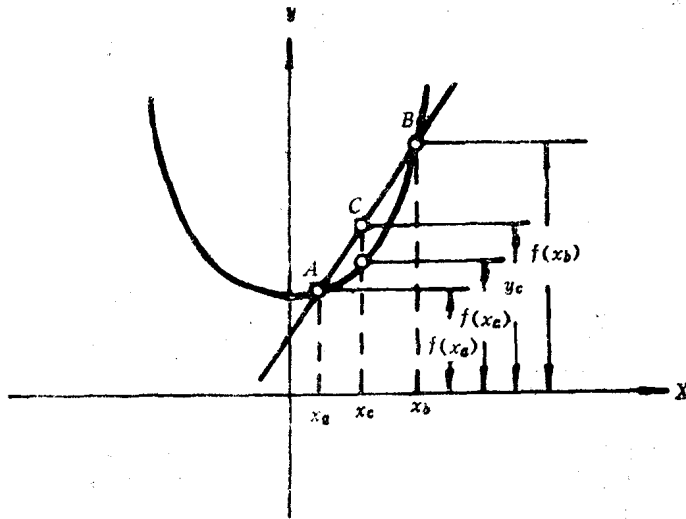


图 1-3-1 凸性

由几何关系不难求得

$$x_c = \lambda x_a + (1 - \lambda) x_b$$

则 C 点的纵坐标为

$$y_c = \lambda f(x_a) + (1 - \lambda) f(x_b)$$

如果 $f(x_c) \leq y_c$

即 $f[\lambda x_a + (1-\lambda)x_b] \leq \lambda f(x_a) + (1-\lambda)f(x_b)$

则代表这一曲线的函数 $f(x)$ 称为凸函数。

以上推理可适用于多元函数。函数 $f(X)$ 称为在区域 R 上的凸函数，如果对于任何两个矢量 $X_1, X_2 \in R$,

$$f[\lambda X_1 + (1-\lambda)X_2] \leq \lambda f(X_1) + (1-\lambda)f(X_2) \quad 1-3-1$$

其中 $0 \leq \lambda \leq 1$

如果去掉 (1-3-1) 或中的等号，则改写成

$$f[\lambda X_1 + (1-\lambda)X_2] < \lambda f(X_1) + (1-\lambda)f(X_2) \quad 1-3-2$$

则称 $f(X)$ 为一个严格凸函数。

如果 (1-3-1) 式的反向不等式成立，即

$$f[\lambda X_1 + (1-\lambda)X_2] \geq \lambda f(X_1) + (1-\lambda)f(X_2), \quad 0 \leq \lambda \leq 1$$

则称函数 $f(X)$ 为凹函数，如果

$$f[\lambda X_1 + (1-\lambda)X_2] > \lambda f(X_1) + (1-\lambda)f(X_2)$$

则称函数 $f(X)$ 为严格凹函数。

线性函数既是凸函数又是凹函数。

一个点集被定义为 n 维空间的一个凸集，如果对点集之中取所有的任意两个点 X_a 和 X_b 来说，连接它们的直线段都会落在这一点集内。二维情况如图 1-3-2 所示

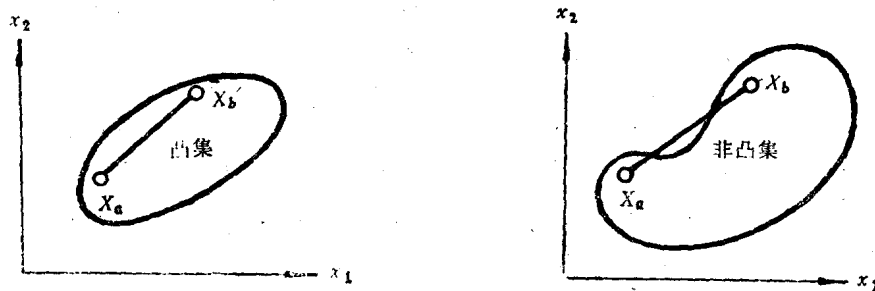


图 1-3-2 凸集与非凸集

根据凸性概念可以得到数学规划的一个重要结果，对于称作凸规划问题的非线性规划问题，有

$$\text{极小化 } (\min) f(X) \quad X \in R^*$$

$$\text{满足于 } (s, t,) g_i(X) \leq 0 \quad i = 1, 2, \dots, m$$

$$X \geq 0$$

这里 $f(X)$ 是凸函数，而且每个不等式约束是凹函数（约束形成一个凸集），可以证明下述的性质成立：局部极小也是全局极小。同样，如果目标函数是凹函数而约束形成一个凸集，则局部极大也是全局极大。下面采用反法法：

设 X^* 是局部极小点，假定它不是全局极小点。取符号：局部极小为 X^* ，全局极小

为 X^{**} , 自然 $X^* \neq X^{**}$ 。连接 X^* , X^{**} 之间的线段, 因为 $f(X)$ 为凸函数, 必然这个线段上的所有点都可以表示为:

$$X = \lambda X^* + (1 - \lambda) X^{**}$$

当 $\lambda = 1$ 时, $X = X^*$;

当 $\lambda = 0$ 时, $X = X^{**}$ 。

所以当 λ 由零变到 1 时, 这个公式给出 X 刚好由 X^{**} 移到 X^* 。

根据 $g_i(X)$ 的凹性, 则有

$$\begin{aligned} g_i(X) &= g_i[\lambda X^* + (1 - \lambda) X^{**}] \\ &\geq \lambda g_i(X^*) + (1 - \lambda) g_i(X^{**}) \\ &\geq 0 \end{aligned}$$

其中 $0 \leq \lambda \leq 1$ 。因而说明所有点的表达式

$$X = \lambda X^* + (1 - \lambda) X^{**}, \quad 0 \leq \lambda \leq 1$$

应当成立。再考虑目标函数的凸性, 则有

$$\begin{aligned} f(X) &= f[\lambda X^* + (1 - \lambda) X^{**}] \\ &\leq \lambda f(X^*) + (1 - \lambda) f(X^{**}) \end{aligned}$$

由于 $f(X^{**}) < f(X^*)$

则 $f(X) < \lambda f(X^*) + (1 - \lambda) f(X^*)$

即 $f(X) < f(X^*)$

这个式子对所有的 λ 都成立。当 λ 取值足够接近 1 时, X 将足够接近 X^* 。因此上式 X^* 为局部极小值有矛盾, 所以 X^* 必是全局极小点的解。

因而对凸规划问题, 只要求出一个局部极小的解, 则它就是全局极小的解, 所以许多讨论都限制在凸规划上。但是对一个具体问题, 它是否为凸规划问题, 有时可以验证, 有时验证也并不容易, 所以一般求出的极小的解往往是局部极小的解。对于很多具有迭代特性的方法, 为了求全局极小的解, 只能从多个初始点出发进行迭代, 然后求出其中最小者。图 1-3-3 表明一个凸规划问题

$$\min f(X) = x_1^2 + x_2^2 - 4x_1 + 4$$

$$s.t. \quad g_1(X) = x_1 - x_2 + 2 \geq 0$$

$$g_2(X) = x_1^2 - x_2 + 1 \geq 0$$

$$g_3(X) = x_1 \geq 0$$

$$g_4(X) = x_2 \geq 0$$

由观察可知: 约束形成一个凸域 (在可行区划有阴线), 因为约束 $g_1(X)$ 、 $g_3(X)$ 和 $g_4(X)$ 是线性函数, 所以是凹性 (也可以说是凸性), 而 $g_2(X)$ 是严格凹函数, 而目标函数 $f(X)$ 是严格凸函数, 则局部最优解也是全局最优解, 即 $X^* = (0.58 \ 1.34)^T$ 的地方, $f(X^*) = 3.80$ 。

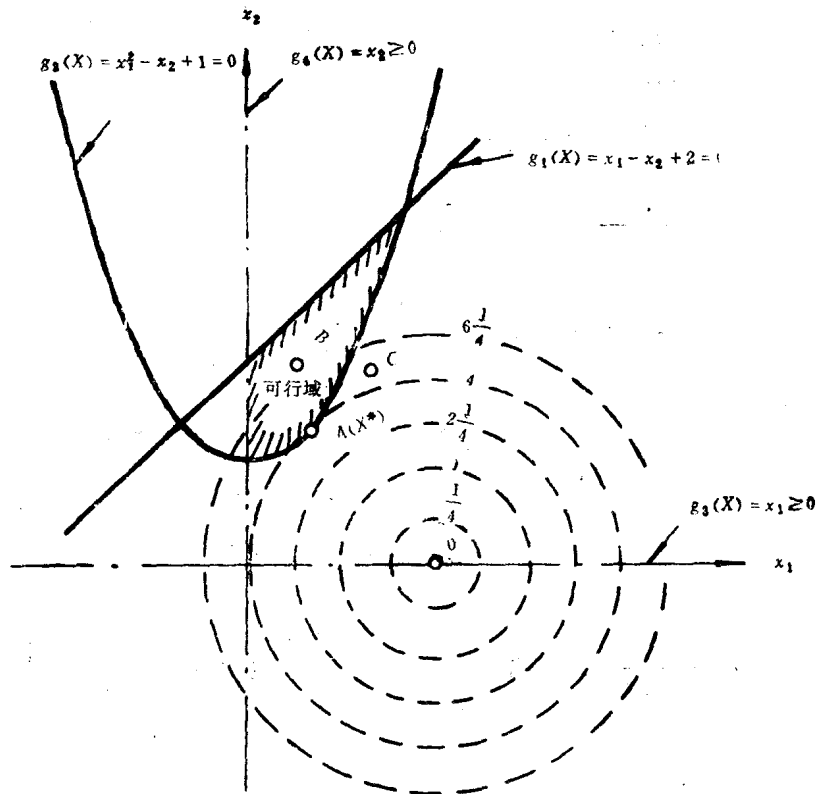


图 1-3-3 凸规划

1-4 梯度与海赛矩阵

如果目标函数 $f(X)$ 是连续可微的，则在某点 X 处对于 x_i 的一阶偏导数称为梯度，令上标 $k(k=0, 1, \dots)$ 表示求梯度处的点，这样在一点 $X^{(k)}$ 处的梯度记为：

$$\nabla f(X^{(k)}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f[X^{(k)}]}{\partial x_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial f[X^{(k)}]}{\partial x_n} \end{pmatrix} \quad 1-4-1$$

下面介绍几种特殊类型函数的梯度公式：

(1) 函数 $b^T X$ 的梯度

因为 $b^T X = b_1 x_1 + b_2 x_2 + \dots + b_n x_n$

式中 b_1, b_2, \dots, b_n 为常矢量 b 的分量，所以

$$\frac{\partial}{\partial x_i} [b^T X] = b_i \quad i = 1, 2, \dots, n$$

从而得公式

$$\nabla b^T X = b \quad 1-4-2$$

(2) 函数 $X^T X$ 的梯度

因为 $X^T X = x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_n^2$

所以 $\frac{\partial}{\partial x_i} [X^T X] = 2x_i, \quad i=1, 2, \dots, n$

从而得公式

$$\nabla [X^T X] = 2x \quad 1-4-3$$

(3) 函数 $X^T H X$ 的梯度, 其中 H 为实对称矩阵,

因为 $X^T H X = \sum_{\substack{i=1 \\ j=1}}^n a_{ij} x_i x_j \quad i, j=1, 2, \dots, n$

所以 $\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_i} [X^T H X] = \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j \quad i, j=1, 2, \dots, n$

因此

$$\frac{1}{2} \nabla [X^T H X] = \begin{pmatrix} \sum_{j=1}^n a_{1j} x_j \\ \vdots \\ \sum_{j=1}^n a_{nj} x_j \end{pmatrix} = H X \quad 1-4-4$$

(4) 一般的二次函数梯度

因为 $f(X) = a + b^T X + \frac{1}{2} X^T H X$

则 $\nabla f(X) = b + H X \quad 1-4-5$

为了解函数 $f(X)$ 沿指定方向 S 的变化率的情况, 过 $x^{(0)}$ 点引矢量 $s^{(0)}$, 此矢量的方向由其正向与坐标系各轴的正向之间的夹角 θ_i 所决定, 见图 1-4-1。函数 $f(X)$ 沿这个方向的变化率就是 $f(X)$ 沿这个方向的方向导数, 其值为:

$$\sum_{i=1}^n \frac{\partial f(X^{(0)})}{\partial x_i} \cos \theta_i = \frac{\partial f(X^{(0)})}{\partial x_1} \cos \theta_1 + \dots + \frac{\partial f(X^{(0)})}{\partial x_n} \cos \theta_n$$

如用矢量表示, 可写成 $[\nabla f(X^{(0)})]^T S$ 。由于

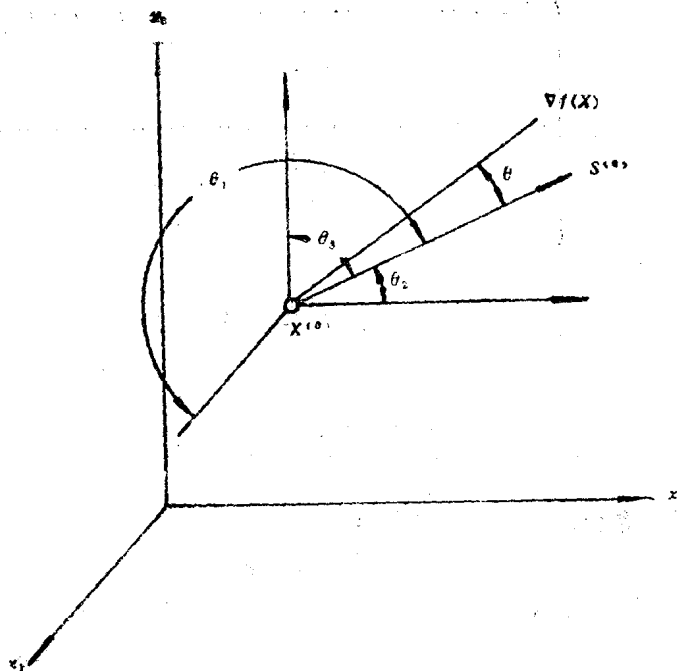


图 1-4-1 函数的变化率

$$\sum_{i=1}^n \cos^2 \theta_i = 1$$

所以 S 为一单位矢量 (即长度为一)。用 θ 表示 $\nabla f(X^{(0)})$ 与 S 正向之间的夹角, 则

$$[\nabla f(X^{(0)})]^T S = \|\nabla f(X^{(0)})\| \cdot \|S\| \cdot \cos \theta = \|\nabla f(X^{(0)})\| \cdot \cos \theta$$

因 $1 > \cos \theta > -1$, 可知 $[\nabla f(X^{(0)})]^T S$ 的最大值为 $\|\nabla f(X^{(0)})\|$, 而其最小值为 $-\|\nabla f(X^{(0)})\|$ 。当 $\theta = 0^\circ$ 时, S 的方向与 $\nabla f(X^{(0)})$ 一致, 当 $\theta = \pi$ 时, 二者方向相反。因此梯度 $\nabla f(X^{(0)})$ 的方向就是在 $X^{(0)}$ 处的函数值 $f(X^{(0)})$ 增加最快的方向, 相反, 负梯度方向就是在 $X^{(0)}$ 处的函数值下降最快的方向。

在有些数学规划方法中, 往往要 $f(X)$ 、 $g_i(X)$ 和 $h_j(X)$ 的一次、二次逼近, 例如, 可用 $X^{(k)}$ 处的截断的泰勒级数来作目标函数 $f(X)$ 的线性逼近, 即

$$f(X) \approx f(X^{(k)}) + \nabla^T f(X^{(k)})(X - X^{(k)}) \quad 1-4-6$$

作 $f(X)$ 的二次逼近, 可略去三阶及更高阶的泰勒级数, 即

$$f(X) = f(X^{(k)}) + \nabla^T f(X^{(k)})(X - X^{(k)}) + \frac{1}{2}(X - X^{(k)}) \nabla^2 f(X^{(k)})(X - X^{(k)}) \quad 1-4-7$$

其中 $\nabla^2 f(X^{(k)})$ 是 $f(X)$ 的海赛 (Hessian) 矩阵 $H(X)$, 即 $f(X)$ 在 $X^{(k)}$ 点的二阶偏导数的方阵,

$$\nabla^2 f(X^{(k)}) = H(X^{(k)}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f(X^{(k)})}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f(X^{(k)})}{\partial x_1 \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f(X^{(k)})}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \frac{\partial^2 f(X^{(k)})}{\partial x_n \partial x_1} & \frac{\partial^2 f(X^{(k)})}{\partial x_n \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f(X^{(k)})}{\partial x_n^2} \end{pmatrix} \quad 1-4-8$$

可简写成 $f(X) \approx f(X^{(k)}) + [\nabla f(X^{(k)})]^T \Delta X + \frac{1}{2} \Delta X^T H \Delta X$, 式中 $\Delta X = X - X^{(k)}$ 。

1-5 最优解的必要充分条件

1. 无约束问题最优解的必要充分条件

首先讨论单变量函数 $f(x)$, 它具有一阶连续导数, 设 x^* 为 $f(x)$ 的一个极小点, 于是当在 x^* 附近的任意一点 x , 恒有

$$f(x) \geq f(x^*)$$

因此, 当 Δx 充分小时, 总有

$$f(x^* + \Delta x) - f(x^*) \geq 0 \quad 1-5-1$$

当 $\Delta x > 0$ 时, 由上式得

$$\frac{f(x^* + \Delta x) - f(x^*)}{\Delta x} \geq 0$$

令 $\Delta x \rightarrow 0$ 取极限, 则得 $f'(x^*) \geq 0$ 1-5-2

又当 $\Delta x < 0$ 时, 由(1-5-1)式得

$$\frac{f(x^* + \Delta x) - f(x^*)}{\Delta x} \leq 0$$

令 $\Delta x \rightarrow 0$ 取极限, 则得 $f'(x^*) \leq 0$ 1-5-3

由(1-5-2)和(1-5-3)式知

$$f'(x^*) = 0 \quad 1-5-4$$

这就是 x^* 为 $f(x)$ 的一个极小点的必要条件。

如果 $f(X)$ 为 n 元函数, 并且具有连续的一阶偏导数。设 $X^* = (x_1^* \ x_2^* \ \cdots \ x_n^*)^T$ 为 $f(X)$ 的极小点, 则有

$$\varphi(x_1) = f(x_1, x_2^*, \dots, x_n^*)$$

如果 $x_1 = x_1^*$ 作为它的一个极小点, 根据前面的讨论, 则有

$$\varphi'(x_1^*) = 0$$

即在 x^* 处

$$\frac{\partial f}{\partial x_1} = 0 \quad 1-5-5$$

同样可证, 在 X^* 处

$$\frac{\partial f}{\partial x_i} = 0 \quad i=1, 2, \dots, n \quad 1-5-6$$

因为 $f(X)$ 在一点 X^* 处的几个一阶偏导数构成一 n 维向量, 即 $f(X)$ 在 X^* 处的梯度

$$\nabla f(X^*) = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n} \right)^T$$

因此 (1-5-5) 和 (1-5-6) 表示

$$\nabla f(X^*) = 0 \quad 1-5-7$$

满足 (1-5-7) 式的点 X^* 称为 $f(X)$ 的稳定点 (驻点)。所以对于 X^* 为 n 维函数 $f(X)$ 的一个极小点的必要条件为其梯度等于零。

上述结论说明, 为了求函数的极小点, 可以先求出它的稳定点, 然后判断其中那些是极小点。因为稳定点中还可能包括极大点, 以及既非极大又非极小的点, 例如:

$$f(x) = x^3$$

有一个稳定点 $x=0$, 显然它不是极小点, 也不是极大点。要判断一个稳定点, 在数学上还需作补充讨论:

假定 $f(X)$ 在 X^* 处具有一阶和二阶的连续偏导数, 则在 X^* 附近, $f(X)$ 可以用泰勒级数表示为:

$$f(X) - f(X^*) = \frac{1}{2} \Delta X^T H \Delta X + \text{高阶无穷小量}$$

要使 X^* 为极小点, 只要在 X^* 附近, 差值 $[f(X) - f(X^*)] \geq 0$, 所以必须

$$[\Delta X]^T H \Delta X \geq 0$$

这一式说明在 X^* 点的二阶偏导数矩阵 H 应为正半定。

由上所述, 可以确定 X^* 为极小的必要条件为:

一次条件: $\nabla f(X^*) = 0$

和二次条件: 海赛矩阵 H 为正半定

如果矩阵 H 为正定, 则一切 $\Delta X \neq 0$ 恒有

$$[\Delta X]^T H \Delta X > 0$$

从而可知, 在 X^* 附近应有

$$f(X) - f(X^*) > 0$$

即

$$f(X) > f(X^*)$$

所以 X^* 点必定是 $f(X)$ 的一个极小点。这样就得到其充分条件为:

$$\Delta f(X^*) = 0$$

和 矩阵 H 为正定。

2. 有约束问题最优解的必要充分条件