北京工业大学研究生创新教育系列著作

最优化：理论、计算与应用

薛 毅 编著

科学出版社

北京工业大学研究生创新教育系列著作

最优化：理论、计算与应用

薛　毅　编著

科 学 出 版 社

北　京

内 容 简 介

本书包括最优化理论、计算和应用三个方面的内容, 共 6 章, 分别是最优化问题概述、一维搜索与信赖域方法、无约束最优化方法、非线性方程与最小二乘问题、线性规划、约束最优化方法.

将最优化的理论、计算和应用结合在一起是本书最大的特点, 其目的是让学习者掌握求解最优化问题的基本理论, 理解相关算法的设计思想, 了解最优化问题的求解过程, 学会使用 MATLAB 软件(优化工具箱中的函数)计算最优化问题.

本书可作为数学专业本科生、研究生以及工科研究生公共课“最优化方法”或“数值优化”课程的教材或教学参考书, 也可作为科技工作者和工程技术人员学习最优化理论与计算的参考用书.

图书在版编目(CIP)数据

最优化：理论、计算与应用/薛毅编著. —北京：科学出版社, 2019. 2
ISBN 978-7-03-060523-8

Ⅰ. ①最… Ⅱ. ①薛… Ⅲ. ①最佳化－教材 Ⅳ. ①O224

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2019) 第 023591 号

责任编辑：李 欣 李香叶 / 责任校对：彭珍珍
责任印制：吴兆东 / 封面设计：陈 敬

科学出版社 出版
北京东黄城根北街 16 号
邮政编码: 100717
http://www.sciencep.com

北京中石油彩色印刷有限责任公司 印刷
科学出版社发行 各地新华书店经销
*
2019 年 2 月第 一 版 开本: 720 × 1000 B5
2019 年 2 月第一次印刷 印张: 22 3/4
字数: 459 000

定价: 128.00 元

(如有印装质量问题, 我社负责调换)

前　言

本书包含最优化理论、计算和应用三个方面的内容, 为什么选择这三个方面的内容呢? 首先, 在目前的教材中, 全部包含这三个方面的书不多. 其次, 在编者的教学实践中发现: 有的学生将最优化作为纯数学内容来学, 这当然没有什么不对的, 它本身就是一门数学课程, 但这类学生往往不擅长计算, 使用数学软件求解最优化问题都不会; 还有的学生将最优化理论作为计算机的内容来学, 会使用数学软件进行求解, 但出现问题后不知如何处理, 这是因为这部分学生没有很好地掌握最优化理论, 不理解求解最优化问题的算法是如何设计的.

求解最优化问题, 特别是非线性最优化问题, 实际上是相当复杂的, 即使是使用昂贵的数学软件, 也不能保证求出全部最优化问题的解, 有时需要根据问题的特点, 借助你对算法的了解, 适当地调整参数或选择适合问题的算法, 才能得到你所需要的结果. 没有相关的优化理论是无从下手的.

本书介绍的应用只是众多最优化问题应用中很小的一部分, 是想起到抛砖引玉的作用, 通过简单的最优化问题的求解过程来展示如何使用数学软件完成相关的计算. 实际上, 不单单是最优化问题的应用, 其理论与计算方面的内容也是相当丰富的, 不可能在一部教材中完成, 因此, 这里也只能介绍最优化理论与计算中最基本的部分.

本书仅给出最优化问题最基本定理的证明, 并使用大量的篇幅对相关算法给出直观的解释, 比如, 尽可能地配上图形对算法可能遇到的问题加以说明. 而对一些复杂的定理, 本书只给出相应的结论, 例如, 只给出算法的超线性收敛性的结论, 而略去复杂的证明过程. 本书的重点是基本理论, 所以书中没有包含近些年来最优化理论的新成果, 如果读者需要查看这方面内容, 请阅读相关教材或专著.

作为最优化方面的教材, 本书也不例外地包含线性规划方面的内容, 但这部分的理论内容较少, 只介绍了最基本的单线性形和对偶单纯形算法及相关的定理, 这部分内容的重点是线性规划问题的应用, 特别是增加了图论方面的应用, 并没有介绍诸如椭球算法或 Karmarkar 等内点算法. 不是这部分内容不重要, 而是本书的重点是基本理论, 对于大规模优化问题的计算, 将交给数学软件来完成.

本书使用 MATLAB 软件完成优化问题的计算, 这里包括两个方面的内容, 一是按照算法, 编写相应的 MATLAB 程序, 其目的是复习和巩固每一章中介绍的相关算法. 二是 MATLAB 优化工具箱中相关函数的介绍, 读者可以利用这些函数求解较为复杂的优化问题.

本书共 6 章. 第 1 章, 最优化问题概述. 介绍最优化问题的分类、最优化问题的最优性条件, 以及 MATLAB 优化工具箱. 第 2 章, 一维搜索与信赖域方法. 介绍 0.618 法、两点二次插值方法作为精确一维搜索方法的代表和非精确一维搜索算法; 介绍信赖域方法的结构, 以及求解信赖域子问题的 dogleg 算法; 介绍求解一维极小化问题函数的使用, 以及一维最优化问题的应用. 第 3 章, 无约束最优化方法. 介绍求解无约束最优化问题的最速下降法、共轭梯度法、Newton 法、拟 Newton 法和信赖域算法, 以及相关定理的证明和算法的收敛性质; 介绍求解无约束最优化问题的函数, 以及无约束最优化问题的应用. 第 4 章, 非线性方程与最小二乘问题. 介绍求解非线性方程组的 Newton 法和拟 Newton 法、求解超定方程组 Gauss-Newton 法、Levenberg-Marquardt 方法和拟 Newton 法; 介绍求解非线性方程与最小二乘问题的优化函数, 以及这两类问题的应用. 第 5 章, 线性规划. 介绍求解线性规划问题的单纯形法和对偶单纯形法、线性规划的理论和对偶定理、求解线性规划 (包括整数规划) 的函数, 以及线性规划的应用. 第 6 章, 约束最优化方法. 介绍求解二次规划问题的算法, 如有效集法. 求解一般约束问题的罚函数法和序列二次规划方法; 介绍求解二次规划、一般约束问题的优化函数, 以及约束最优化问题的应用.

本书的全部程序均通过计算检验, 书中的程序已在 MATLAB R2014a 环境下运行通过, 倘若读者使用的 MATLAB 软件的版本低于此版本, 基本上也不会影响到书中程序的运行, 除少数函数 (如求解整数线性规划的函数) 外. 如果读者需要书中的自编程序 (包括例题和习题数据), 可发邮件至 xueyi@bjut.edu.cn, 向作者索取.

由于编者水平所限, 可能在内容的取材、结构的编排以及课程的讲法上存在着不妥之处, 希望使用本书的老师、同学以及同行专家和其他读者提出批评与建议.

在本书出版之际, 谨向对本书提供过帮助的各位老师和专家表示感谢, 同时感谢科学出版社编辑为本书的出版做的大量工作.

编 者
2018 年 2 月
于北京工业大学

目　录

第 1 章　最优化问题概述

最优化就是在众多方案中寻找最好的方案与方法的学科, 是运筹学的重要组成部分, 在自然科学、社会科学、生产实际、工程设计和现代管理中有着重要的应用价值. 例如, 在工程中如何选择最优参数, 使得既满足设计要求, 又做到成本最低; 在投资项目中, 如何进行组合使得到的收益最大或风险最小; 在运输网络中, 如何安排使得总运费最少, 或者具有最大的运力, 或者是使两地距离最短. 这类问题是普遍存在的, 这就需要根据实际问题建立数学模型, 并进行求解.

1.1　最优化问题的数学模型与分类

最优化是决策科学和物理系统分析中的重要工具, 在介绍最优化问题的求解之前, 需要建立最优化问题的数学模型, 例如, 什么是需要处理的变量, 什么是目标函数, 变量受到哪些约束限制等.

最优化问题的数学模型的一般表达式为

$$\min \ f(x), x \in \mathbb{R}^n, \tag{1.1}$$

$$\text{s.t.} \ \ c_i(x) = 0, \ i \in \mathcal{E}, \tag{1.2}$$

$$c_i(x) \geqslant 0, \ i \in \mathcal{I}, \tag{1.3}$$

称 x 为未知参数. 称 $f(x)$ 为目标函数, 用 min 表示求极小, 当然, 也可用 max 表示求极大. s.t. 是单词 subject to 的缩写, 意思为“受 $\cdots$ 限制”, 即约束. 称 $c_i(x)$ 为约束函数, 用 $\mathcal{E}$ 表示等式约束指标集, $\mathcal{I}$ 表示不等式约束指标集, 因此, $c_i(x) = 0 \ (i \in \mathcal{E})$ 表示等式约束, $c_i(x) \geqslant 0 \ (i \in \mathcal{I})$ 表示不等式约束.

最优化问题的分类是十分重要的, 因为不同类型的最优化问题, 需要用到不同的算法求解.

按照约束条件进行划分, 最优化问题可以分成无约束最优化问题和约束最优化问题. 所谓无约束最优化问题就是没有约束条件 (1.2)–(1.3), 即

$$\min \ f(x), \quad x \in \mathbb{R}^n. \tag{1.4}$$

而约束最优化问题就是问题 (1.1)–(1.3).

按照函数的性质划分, 如果目标函数 $f(x)$ 和约束函数 $c_i(x)$ 均为线性函数, 则称为线性规划问题; 如果在目标函数和约束函数中至少一个函数是非线性的, 则称为非线性规划问题. 如果目标函数 $f(x)$ 为二次函数, 约束函数 $c_i(x)$ 为线性函数, 则称为二次规划问题.

按照变量的性质划分, 如果变量的取值均为整数, 则称为纯整数规划, 如果部分变量取值为整数, 则称为混合整数规划.

还有更细的划分, 如几何规划、网络优化、组合优化等.

1.2　最优化问题

最优化问题有多种, 有无约束最优化问题和约束最优化问题; 有线性规划和二次规划. 下面分别予以介绍.

1.2.1　无约束最优化问题

无约束最优化问题就是变量无限制, 非线性最小二乘问题是一类典型的无约束最优化问题.

例 1.1(非线性最小二乘问题)　一位医院管理人员想建立一个模型, 对重伤患者出院后的长期恢复情况进行预测. 自变量是患者住院的天数 (t), 因变量是患者出院后长期恢复的预后指数 (y), 指数的数值越大表示预后效果越好. 为此, 研究了 15 个患者的数据, 这些数据列在表 1.1 中. 根据经验, 患者住院的天数 (t) 和预后指数 (y) 应满足非线性模型

$$y = \phi(x;t) = x_1 + x_2 \exp(x_3 t).$$

试用最小二乘方法建立估计参数 x_1, x_2 和 x_3 的数学模型.

表 1.1　关于重伤患者的数据

病例号	住院天数	预后指数	病例号	住院天数	预后指数
1	2	54	9	34	18
2	5	50	10	38	13
3	7	45	11	45	8
4	10	37	12	52	11
5	14	35	13	53	8
6	19	25	14	60	4
7	26	20	15	65	6
8	31	16			

解　令 $x = (x_1, x_2, x_3)^{\mathrm{T}}$, 确定 x, 使得 $\phi(x;t_i)$ 尽可能靠近 y_i, 定义残差

$$r_i(x) = y_i - \phi(x;t_i) = y_i - x_1 - x_2 \exp(x_3 t_i), \quad i = 1, 2, \cdots, 15,$$

则最小二乘问题为

$$\min\ f(x)=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{15}r_i^2(x)=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{15}\left[y_i-x_1-x_2\exp(x_3t_i)\right]^2.$$

对于一般情况, 设 $x\in\mathbb{R}^n$, 当 $r_i(x),\ i=1,2,\cdots,m\ (m\geqslant n)$ 为非线性函数, 则称问题

$$\min\ f(x)=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}r_i^2(x),\quad x\in\mathbb{R}^n \tag{1.5}$$

为非线性最小二乘问题.

无约束最优化问题的一般表达式为

$$\min\ f(x),\quad x\in\mathbb{R}^n. \tag{1.6}$$

1.2.2 线性规划问题

对于最优化问题 (1.1)–(1.3), 如果目标函数 $f(x)$ 和约束函数 $c_i(x)$ $(i\in\mathcal{E}\cup\mathcal{I})$ 是线性函数, 则问题就简化成线性规划问题. 下面看一个例子.

例 1.2 (食谱问题) 现有 n 种食物, 共包含 m 种营养, 其中每单位的第 j 种食物含有第 i 种营养 a_{ij} 个单位. 假设第 i 种营养的需求量至少为 b_i 个单位, 第 j 食物的单价为 c_j. 那么, 在满足营养需求的情况下, 如何搭配这 n 种食品, 使得费用最低. 试建立相应的数学模型.

解 设 x_j 为第 j 种食物的购买量, 那么, 第 j 种食物所需的费用为 c_jx_j, 总的费用为 $\sum\limits_{j=1}^{n}c_jx_j$. 因此, 目标函数为

$$\min\quad z=\sum_{j=1}^{n}c_jx_j.$$

因为 a_{ij} 为每单位的第 j 种食物含有第 i 种营养的量, 所以 $a_{ij}x_j$ 就是第 j 种食物含有第 i 种营养的量, $\sum\limits_{j=1}^{n}a_{ij}x_j$ 就是全部 n 种食物含有第 i 种营养的总量, 它不少于需求量 b_i, 因此, 得到约束

$$\sum_{j=1}^{n}a_{ij}x_j\geqslant b_i,\quad i=1,2,\cdots,m.$$

另外, 每种食物的购买量 x_j 应是非负的, 由此得到食谱问题的数学模型

$$\min \quad z=\sum_{j=1}^{n} c_j x_j, \tag{1.7}$$

$$\text{s.t.} \quad \sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j \geqslant b_i, \quad i=1,2,\cdots,m, \tag{1.8}$$

$$x_j \geqslant 0, \quad j=1,2,\cdots,n. \tag{1.9}$$

线性规划的一般表达式为

$$\min \quad z=c^{\mathrm{T}} x, \tag{1.10}$$

$$\text{s.t.} \quad a_i^{\mathrm{T}} x=b_i,\ i \in \mathcal{E}, \tag{1.11}$$

$$a_i^{\mathrm{T}} x \geqslant b_i,\ i \in \mathcal{I}, \tag{1.12}$$

其中 $a_i\ (i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I})$ 和 c 为 n 维向量.

如果线性规划问题 (1.10)–(1.12) 中的变量 x_j 全部要求是整数解, 则称问题为纯整数线性规划问题. 如果有部分变量取整数, 则称问题为混合整数线性规划问题. 如果变量只取 0 或 1, 则称问题为 0–1 线性规划问题.

1.2.3 二次规划问题

如果目标函数 $f(x)$ 为二次函数, 约束函数为线性函数, 则此类问题称为二次规划问题. 下面通过投资组合模型来建立二次规划问题.

每位投资者都知道风险与利润并存. 为了增加在投资方面的预期利润, 投资者可能要面对较高的风险. 投资理论是研究应该如何建立数学模型, 使投资者在一定的风险下得到最大的利润, 或者是在一定的利润下使风险达到最小.

设有 n 个投资机会, 每一种投资的利润为 $r_i(i=1,2,\cdots,n)$. 在通常的情况下, 利润 r_i 是未知的, 并假设它是服从正态分布的随机变量. 用 $\mu_i=E[r_i]$ 表示其数学期望, 因此, μ_i 为第 i 项投资的平均利润. 用 $\sigma_i^2=E[(r_i-\mu_i)^2]$ 表示利润 r_i 的方差, 方差越大, 其利润的变化范围也就越大. 因此, 可以定义方差为该项投资的风险.

现有一笔资金, 打算对 n 个项目进行投资. 设第 i 个项目投资的百分比为 $x_i(i=1,2,\cdots,n)$, 并假设这笔资金全部用于投资, 即得到 $\sum\limits_{i=1}^{n} x_i=1\ (x_i \geqslant 0, i=1,2,\cdots,n)$. 所以, 相应的投资组合的利润为

$$R=\sum_{i=1}^{n} x_i r_i. \tag{1.13}$$

这样投资组合的平均利润为

$$E(R) = E\left[\sum_{i=1}^{n} x_i r_i\right] = \sum_{i=1}^{n} x_i E[r_i] = \mu^{\mathrm{T}} x.$$

下面考虑投资组合的风险, 也就是方差, 有

$$\begin{aligned}
E\left[(R - E[R])^2\right] &= E\left[\left(\sum_{i=1}^{n} x_i r_i - \sum_{i=1}^{n} x_i \mu_i\right)^2\right] = E\left[\left(\sum_{i=1}^{n} x_i (r_i - \mu_i)\right)^2\right] \\
&= E\left[\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} x_i x_j (r_i - \mu_i)(r_j - \mu_j)\right] \\
&= \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} x_i x_j E[(r_i - \mu_i)(r_j - \mu_j)] = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} \sigma_{ij} x_i x_j,
\end{aligned}$$

其中 $\sigma_{ij} = E[(r_i - \mu_i)(r_j - \mu_j)]$ 为 r_i 与 r_j 的协方差.

令 $x = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^{\mathrm{T}}$, $\Sigma = (\sigma_{ij})_{n\times n}$, 则

$$E\left[(R - E[R])^2\right] = x^{\mathrm{T}} \Sigma x.$$

如果期望预期的平均利润为 μ_0, 而风险越小越好, 这样投资组合问题就是一个二次规划模型

$$\begin{aligned}
\min \quad & \frac{1}{2} x^{\mathrm{T}} \Sigma x, && (1.14)\\
\text{s.t.} \quad & \mu^{\mathrm{T}} x \geqslant \mu_0, && (1.15)\\
& e^{\mathrm{T}} x = 1, && (1.16)\\
& x \geqslant 0, && (1.17)
\end{aligned}$$

其中 $e = (1, 1, \cdots, 1)^{\mathrm{T}}$. 称二次规划 (1.14)–(1.17) 为投资组合问题.

二次规划的一般表达式可以写成

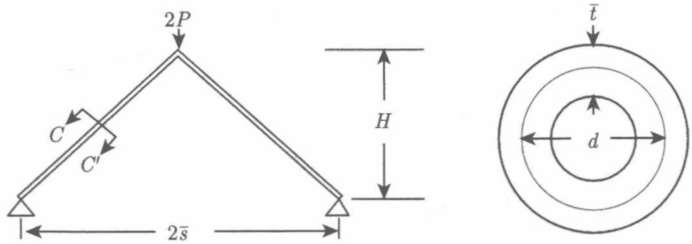
$$\begin{aligned}
\min \quad & \frac{1}{2} x^{\mathrm{T}} G x + r^{\mathrm{T}} x, && (1.18)\\
\text{s.t.} \quad & a_i^{\mathrm{T}} x = b_i,\ i \in \mathcal{E}, && (1.19)\\
& a_i^{\mathrm{T}} x \geqslant b_i,\ i \in \mathcal{I}, && (1.20)
\end{aligned}$$

其中 G 为对称矩阵. 如果 G 为半正定矩阵, 则称问题 (1.18)–(1.20) 为凸二次规划问题.

1.2.4　约束优化问题

线性规划问题和二次规划问题也属于约束优化问题, 这里更确切地说, 是指非线性约束优化问题.

例 1.3 (人字架最优设计问题)　考虑如图 1.1 所示的钢管构造的人字架, 设钢管壁厚 $t=\bar{t}$ 和半跨度 $s=\bar{s}$ 已给定, 试求能承受负荷 $2P$ 的最轻设计. 试建立其数学模型.



(a) 人字架结构　　　　(b) C-C' 截面图

图 1.1　人字架最优设计问题

分析　首先来定性地分析此问题. 壁厚和半跨度一定, 欲求最轻设计, 需要杆短. 这样做必使张角增大, 则负荷 $2P$ 就会在钢管上有很大的张力. 为了能承受这样的应力, 钢管需变粗, 其结果是杆变重.

解　下面进行定量的分析. 给定一组 d 和 H 值后, 可以计算出钢管的截面积 A 和钢管的长度 L, 即

$$A=\frac{1}{4}\pi(D_2^2-D_1^2)=\frac{\pi}{4}(D_2+D_1)(D_2-D_1)=\pi d\bar{t},$$
$$L=(\bar{s}^2+H^2)^{\frac{1}{2}},$$

因此, 钢管的重量为

$$w(d,H)=2\rho\pi d\bar{t}(\bar{s}^2+H^2)^{\frac{1}{2}},$$

其中 ρ 为比重.

下面考虑 d 和 H 受到的限制, 当负荷为 $2P$ 时, 杆受到的压力为

$$\sigma(d,H)=\frac{P}{\pi\bar{t}}\cdot\frac{(\bar{s}^2+H^2)^{\frac{1}{2}}}{Hd}.$$

根据结构力学原理, 对于选定的钢管, 不出现断裂的条件 (屈服条件) 是

$$\sigma(d,H)\leqslant\sigma_y,$$