最优化方法

邹 海

中国最优设计管理研究会

一九八五年二月

目　　录

最优化方法

第一节 方法

一、极值有理法

设函数 $f(X)$ 在 $[a, b]$ 内单峰㊀（或下凹），$f(X)$ 由实验或计算给出实验点 X_i 的函数值 f_i，已知初始实验点 X_0，X_1 和 X_2。则函数 $f(X)$ 的极值点 X 的计算公式为

$$X = b_0 - y_0/(b_1 - y_1/(b_2 - \cdots - y_{i-1}/b_i)\cdots), \quad (1)$$

式中

$$b_0 = X_0;$$

$$b_i = -(X_i Q_{i-2} - P_{i-2})(y_i - y_{i-1})/(X_i Q_{i-1} - P_{i-1});$$

而

$$P_i = b_i P_{i-1} + (y - y_{i-1}) P_{i-2};$$

$$Q_i = b_i Q_{i-1} + (y - y_{i-1}) Q_{i-2};$$

$$P_{-1} = 1; \quad P_0 = b_0;$$

$$Q_{-1} = 0; \quad Q_0 = 1;$$

$$y = \Delta f / \Delta X;$$

$$y_i = (f(X_i + \Delta X) - f(X_i)) / \Delta X;$$

ΔX 为一个很小的增量，一般取 $\Delta X = (b - a)/100$，而

$$X_i = b_0 - y_0/(b_1 - y_1/(b_2 - y_2/(b_3 - \cdots - y_{i-1}/b_i)\cdots))。$$

证明：因为函数 $f(X)$ 的极值点 X 为其导数方程

$$df(X)/dX = 0 \quad (2)$$

的解。由于函数 $f(X)$ 的表达式是未知的，所以用差分方程

㊀单峰是指其差分 $\Delta f / \Delta X$，在 $[a, b]$ 内由正变负並单调下降。

$$\Delta f(X)/\Delta X = y(X) = 0 \tag{3}$$

近似地表示函数 $f(X)$ 的导数方程。

为了解方程(3)，设函数

$$\Phi(y) = b_0 + (y - y_0)/(b_1 + (y - y_1)/b_2 + \cdots$$
$$\cdots (y - y_{n-1})/b_n) \cdots),$$

且在点 y_i 取值，$\Phi(y_i) = X_i$。

根据 $\Phi(y)$ 的渐近递推关系式，

$$\Phi(y) = (b_i P_{i-1} + (y - y_{i-1}) P_{i-2})/(b_i Q_{i-1}$$
$$+ (y - y_{i-1}) Q_{i-2})$$

得出方程

$$(b_i P_{i-1} + (y_i - y_{i-1}) P_{i-2})/(b_i Q_{i-1}$$
$$+ (y_i - y_{i-1}) Q_{i-2}) Q_{i-2}) = X_i,$$

从此方程中解出未知系数，有

$$b_0 = X_0,$$
$$b_i = -(X_i Q_{i-2} - P_{i-2})(y_i - y_{i-1})/(X_i Q_{i-1}$$
$$- P_{i-1})$$

因为方程(3)的解 X，使 $y(X) = 0$，故令 y 为 0 代入 $\Phi(y)$ 中，得出公式

$$X = b_0 - y_0/(b_1 - y_1/(b_2 - \cdots - y_{i-1}/b_i) \cdots),$$

故公式(1)成立。

因为方程(3)的解是方程(2)的近似解 $\bar{X}'$，须加 $\Delta X/2$ 修正。所以函数 $f(X)$ 在 $[a, b]$ 的极值点 X 为

$$X = \bar{X}' + \Delta \bar{X}/2 \quad 。$$

若$f(X')<f(X)$时，则X为极大值点，否则X为函数$f(X)$在〔a，b〕内的极小值点。

在工业生产中，应用公式(1)可以进行优选，函数$f(X)$表示进行优选的对象，X表示进行优选的单因素。

在开始做实验时，可以根据过去实验的经验，先给出二个初始实验点X_0，X_1或给出三个初始实验点X_0，X_1和X_2。初始点的选取只要求在优选范围〔a，b〕内就可以了。

然后，在每个实验点附近做二次实验，即在点X_0和$(X_0+\Delta X)$上作实验，得出测试的$f(X_0)$和$f(X_0+\Delta X)$，算出$y_0=(f(X_0+\Delta X)-f(X_0))/\Delta X$。同样在点$X_1$和$(X_1+\Delta X)$作二次实验求出$y_1$。同样再求出$y_2$。

把点(y_0, X_0)，(y_1, X_1)和(y_2, X_2)代入公式(1)，得出新的实验点X_3，再在X_3和$(X_3+\Delta X)$作二次实验，求出y_3。若$|y_3|<\varepsilon$，ε为实验精度，则$(X_3+\Delta X/2)$为所求的优选值，否则再把(y_3, X_3)代入公式(1)，继续计算，得出新的实验点X_4，一直实验直到$|y_i|\leq\varepsilon$为止。

一般情况，优选4、5次，作8次或10次实验，就能满足精度10^{-3}。

特殊情况，作出X_7时，若$|y_7|>\varepsilon$，则X^*_7为所求的极值点。否则继续实验。

例一、设进行优选的对象$f(X)$为$f(X)=\sin(0.5+X)$，对单因素X进行优选，求$\max f(X)$。

解：首先对X方向，以一定的步长H进行分隔，在$X_i=X_0+iH$点上作实验，测出f_i，若（$f_{i-1}-f_{i-2}$）与（f_i-f_{i-1}）异号时，表示在〔X_{i-2}，X_i〕内有极值，故设$a=X_{i-2}$，$b=X_i$。

若（$f_{i-1}-f_{i-2}$）与（f_i-f_{i-1}）同号时，继续分隔。

其次，应用极值有理法，对f(X)在〔a，b〕内进行优选。

当初始点X_0，X_1和X_2分别为0·5，1和1 5时，其计算结果如下：

n	X_n	$\Delta f/\Delta X_n$	由公式(1)X_n	b_n
0	0·5	0·539039290	0·5	0·5
1	1·0	$0·692408_{10^{-1}}$	1·07369208	−0·939596873
2	1·5	−0·417510157	1·07222344	28·7125129
3	1·07222344	$-0·292711_{10^{-2}}$	1·07075440	−0·021678168
4	1·06925440	$0·419216_{10^{-4}}$	1·07079632	−28·4879192

在例一中，优选5次，对f(X)进行1 0次实验，求出精度为10^{-3}的极大值点X＝1·07079632

在同样的精度要求下，应用黄金分割法须做4 0次实验，得出极大值点X＝1·07079591。

加果用黄金分割法也做1 0次实验时，得出f(X)在〔a，b〕内的极大值点X＝1·05044886，与精确的极大值点X＝1·07079632比较，只有二位有效数字，精度为10^{-2}。

如果用黄金分割法做21次实验时，得出$f(X)$在〔a，b〕内的极大值点$X=1.07092110$，准确小数点后3位。

如果继续做31次实验时，得出$X=1.07079653$，准确到小数点后第6位。

在极值有理法计算中，X_n的数值已加入$\Delta X/2$。

例二、设对目标函数$f(X)=-(X^3-3X^2+4X-3)^2$，在区间〔0·3〕内进行优选。

解：首先选取初始实验点X_0，X_1和XX_2，分别为2·30345774，2·80345774和3·30345774时，经过8次优选，访问函数$f(X)$16次，求出最优值点$X=1.68232698933$，其计算结果如下：

n	X_n	$\Delta f/\Delta X_n$	由公式(8)X_n	b_n
1	2·30345774	−30·8162213	2·30345774	2·30345774
2	2·80345774	−143·852221	2·16714621	−226·071998
3	3·30345774	−458·564344	2·07329232	1·56048280
4	2·07329282	−11·7269099	1·84595388	−701·034116
5	1·84595388	−2·36460397	1·71902311	0·159781594
6	1·71902711	−0·476540840	1·68376474	−128·516115
7	1·68376474	$-0.279089_{10}{-1}$	1·68136019	0·074212401
8	1·68136019	$-0.112199_{10}{-3}$	1·68135042	−99·3118490

在计算中，X的增量$\Delta X = 2\times 0\cdot 976525\times 10^{-3}$，所以函数 f(X) 在〔0，3〕内的极大值点为$X = X_s + \Delta X/2 = 1\cdot 68135042 + 0\cdot 976525\times 10^{-3} = 1\cdot 68232698$

精确到小数点后第7位。

在〔0，3〕内，对$f(X) = -(X^3 - 3X^2 + 4X - 3)^2$，用黄金分割法进行优选，经过40次实验，其计算结果如下：

n	X_n	f_n	a_n	b_n
0	1·19998060	−0·627298414	0·00000000	3·14159000
1	1·94160939	−0·602900848	0·00000000	3·14159000
2	2·39996120	−0·988305767	1·19998060	3·14159000
3	1·65833240	−0·00317479	1·19998060	2·39996120
4	1·48325759	−0·163121832	1·19998060	1·94160939
5	1·76653458	$-0\cdot 470592_{10}{}^{-1}$	1·48325759	1·94160939
6	1·59145977	$-0\cdot 406558_{10}{}^{-1}$	1·48325759	1·76653458
7	1·69966196	$-0\cdot 177791_{10}{}^{-2}$	1·59145977	1·76653458

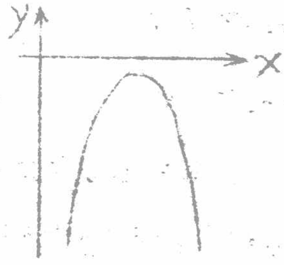
n	X_n	f_n	a_n	b_n
8	1·72520503	$-0{\cdot}113649_{10}-1$	1·65833240	1·76653458
9	1·68387547	$-0{\cdot}137955_{10}-4$	1·65833240	1·72520503
10	1·67411889	$-0{\cdot}381695_{10}-3$	1·65833240	1·69966196
11	1·68990537	$-0{\cdot}334130_{10}-3$	1·67411889	1·69966196
12	1·68014879	$-0{\cdot}271$[illegible]$_{10}-4$	1·67411889	1·68990537
13	1·68617869	$-0{\cdot}85745$[illegible]$_{10}-4$	1·68014879	1·68990537
14	1·68245201	$-0{\cdot}386349_{10}-7$	1·68014879	1·68617869
15	1·68157225	$-0{\cdot}327486_{10}-5$	1·68014879	1·68387547
16	1·68299572	$-0{\cdot}256553_{10}-5$	1·68157225	1·68387547
17	1·68211597	$-0{\cdot}257660_{10}-6$	1·68157225	1·68299572
18	1·68256969	$-0{\cdot}633078_{10}-6$	1·68211597	1·68299572
19	1·68232365	$-0{\cdot}988592_{10}-10$	1·68211597	1·68265969
20	1·68224432	$-0{\cdot}400211_{10}-7$	1·68211597	1·68245201
21	1·68237268	$-0{\cdot}115701_{10}-10$	1·68224432	1·68245201

n	X_n	f_n	a_n	b_n
22	1.68229335	-0.681639_{10}^{-8}	1.68224432	1.68237268
24	1.68231208	-0.141986_{10}^{-8}	1.68229335	1.68234238
25	1.68233080	-0.518493_{10}^{-10}	1.68231202	1.68234238
26	1.68233522	-0.316677_{10}^{-9}	1.68232365	1.68234238
30	1.68232743	-0.798191_{10}^{-12}	1.68232638	1.68232911
31	1.68232847	-0.258501_{10}^{-11}	1.68232743	1.68232911
34	1.68232792	-0.826407_{10}^{-13}	1.68232767	1.68232807
36	1.68232786	-0.219320_{10}^{-13}	1.68232777	1.68232792
38	1.68232779	-0.584927_{10}^{-15}	1.68232777	1.68232782
40	1.68232780	-0.148707_{10}^{-16}	1.68232779	1.68232781

用黄金分割法作16次实验时，得最好点为X＝1.68299572，精确度为10^{-3}。而用割值有理法作16次实验时，得出X＝1.68222698，精确度为10^{-7}。若用黄金分割法达到10^{-8}的精确度要作40次实验。

从函数f(X)的图形不难看出，f(X)的值均取负值，有一个最大值点，X＝1·68232。

在优选中，当优选到第11次时，X＝1·68，具有3位有效数字。继续优选，当优选到第24次时，X＝1·6823，具有5位有效数字。实验次数增加13次，精度提高两位。



f(X)的图形

继续用黄金分割法进行优选，当优选到第40次时，X＝1·6823278，准确到小数点后第7位。

上述的计算表明，从24次到40次，增加了16次实验，精度提高两位。

此例计算表明，极值有理法比黄金分割法以较少的实验次数达到了高精度的要求，适合于科研理论计算中使用和有数量概念的一切实验。

二、二维极值有理法

设函数f(X，y)在区域R_2上单峰（或下凹），函数f(X，y)的值由实验或计算给出，已知初始实验点为(X_0，y_0)，(X_1，y_1)和(X_2，y_2)时，则函数f(X，y)在R_2上的极值点(X，y)的计算公式为

$$X = a_0 - h_0 / (a_1 - h_1 / a_2 - \cdots - h_{n-1} / a_n) \cdots), \quad (1)$$

式中

$a_0 = x_0$；

$a_i = -(X_i Q_{i-2} - P_{i-2})(h_i - h_{i-1}) / (X_i Q_{i-1} - P_{i-1})$;

而

$P_i = a_i P_{i-1} + (h - h_{i-1}) P_{i-2}$;

$Q_i = a_i Q_{i-1} + (h - h_{i-1}) Q_{i-2}$;

$P_{-1} = 1$;　　$P_0 = a_0$;

$Q_{-1} = 0$;　　$Q_0 = 1$。

$h = \Delta f / \Delta X$;　$h_i = \Delta f / \Delta X_i$。

X_0，X_1和X_2为初值，当y为某固定值时，则

$X_1 = a_0 - h_0 / (a_1 - h_1 / (a_2 - \cdots - h_{i-1} / a_i) \cdots)$。

当X由公式(1)求出后，把X固定在最优值，再对y方向进行优选，则y方向的最优值的计算公式为，

$y = b_0 - h_0 / (b_1 - h_1 / (b_2 - \cdots - h_{n-1} / b_n) \cdots)$，　(2)

式中

$b_0 = y_0$;

$b_i = -(y_i Q_{i-2} - P_{i-2})(h_i - h_{i-1}) / (y_i Q_{i-1} - P_{i-1})$;

而

$P_i = b_i P_{i-1} + (h - h_{i-1}) P_{i-2}$;

$Q_i = b_i Q_{i-1} + (h - h_{i-1}) Q_{i-2}$;

$\overline{P}_{-1} = 1$;　　$\overline{P}_0 = b_0$;

$\overline{Q}_{-1} = 0$;　　$\overline{Q}_0 = 1$。

$\overline{h} = \Delta f / \Delta y$;　$h_i = \Delta f / \Delta y_i$。

y_0，y_1 和 y_2 为初始实验点，而

$$y_i=b_0-h_0/(b_0-h_1/(b_2-\cdots-h_{i-1}/b_i)\cdots)。$$

证明：因为已知 $f(X, y)$ 在 R_2 上单峰，所以函数 $f(X, y)$ 在 R_2 上有极值点，而极值点 (X, y) 为方程组

$$\partial f/\partial X=F_1(X, y)=0; \qquad (3)$$

$$\partial f/\partial y=F_2(X, y)=0$$

的解。

若 y 固定时，则 $f(X, y)$ 变成只含 X 的函数 $f(X, y_0)$，于是 $f(X, y_0)$ 的极值点 X 为方程

$$\partial f/\partial X=F_1(X, y_0)=0 \qquad (4)$$

的解，$F_1(X, y_0)$ 为 X 方向的差分方程。

为了解方程(4)，设 $F_1(X, y_0)$ 的反函数为

$$\Phi(h)=a_0+(h-h_0)/(a_1+(h-h_1)/(a_2+\cdots+(h-h_{n-1})/a_n)\cdots)$$

并使 $\Phi(h_i)=X_i$，再利用 $\Phi(h)$ 的渐近递推关系式，可得方程

$$(a_iP_{i-1}+(h_i-h_{i-1})P_{i-2})/(a_iQ_{i-1}+(h_i-h_{i-1})Q_{i-1})=X_i$$

由此方程中，解出未知系数 a_i，有

$$a_0=X_0 \quad ,$$

$$a_i = -(X_i Q_{i-2} - P_{i-2})(h_i - h_{i-1}) / (X_i Q_{i-1} - P_{i-1})。$$

令 $h=0$，代入 $\varphi(h)$ 中，得出X的计算公式为

$$X = a_0 - h_0/(a_1 - h_1/(a_2 - \cdots - h_{n-1}/a_n)\cdots)。$$

当y固定时，把点 (X_0, h_0)，(X_1, h_1) 和 (X_2, h_2) 代入公式(1)，得出 X_3，若 $F_1(X_3, y_0)=0$，则 X_3 为方程(4)的解，否则有 (X_3, h_3) 代入公式(1)，求出 X_4，一直求出满足 $F_1(X, y_0)=0$ 的解X为止。故公式(1)成立。

同样，把由公式(1)求出的X固定，于是函数 $f(X, y)$ 变为只含有y的函数，再微分得方程。

$$\partial f/\partial y = F_2(X_0, y) = 0。\qquad (5)$$

显然，方程(5)的解为当X固定时，函数 $f(X, y)$ 在y向方上的极值点，而 $F_2(X_0, y)$ 为y方向的差分方程。

为了解方程(5)，设 $F_2(X_0, y)$ 的反函数为

$$\Phi(h) = b_0 + (h-h_0)/(b_1 + (h-h_1)/(b_2 + \cdots + (h-h_{n-1})/b_n)\cdots),$$

並使 $\Phi(h_i)=y_i$，又根据 $\Phi(h)$ 的渐近递推关系式，可得方程

$$(b_i P_{i-1} + (h_i - h_{i-1})P_{i-2})/(b_i Q_{i-1} + (h_i - h_{i-1})Q_{i-2}) = y_i,$$

由此方程中，解出未知系数 b_i，有

$b_0 = y_0$,

$b_i = -(y_i \overline{Q}_{i-2} - \overline{P}_{i-2})(\overline{h}_i - \overline{h}_{i-1}) / (y_i Q_{i-1} - \overline{P}_{i-1})$。

再令 $h = 0$，代入 $\Phi(h)$ 中，得出 y 的计算公式为

$$y = b_0 - h_0 / (b_1 - h_1 / (b_2 - \cdots - h_{n-1} / b_n) \cdots)$$。

计算时，把 $(\overline{h}_0, y_0)$，(h_1, y_1) 和 (h_2, y_2) 代入公式(2)，得出 y_3，若 $F_2(X_0, y_3) = 0$，则 y_3 为方程(5)的解，不然，把 (h_3, y_3) 代入公式(2)，求出 y_4，若 $F_2(X_0, y_4)$ 为 0，则 y_4 为解，否则继续求出 y_5，一直满足方程(5)为止。

因为在开始进行优选时，y 的极值点是未知的，所以先固定 $y = y_0$，对 X 进行优选，由公式(1)得出的 X 记为 X_0，再固定 $X = X_0$，对 y 进行优选，由公式(3)得出 y 记为 y_0。

同样，再求出 X_1 和 y_1，若

$$|X_1 - X_0| < \varepsilon \text{ 和 } |y_1 - y_0| < \varepsilon$$

成立，或若

$$|F_1(X_1, y_1)| < \varepsilon \text{ 和 } |F_2(X_1, y_1)| < \varepsilon$$

成立，则 (X_1, y_1) 为 $f(X, y)$ 在 R_2 上的极值点，否则继续优选。

又因为 X 和 y 为

$F_1(X, y) = 0$;

$F_2(X, y) = 0$

的解，所以方程

$$\partial f / \partial X = 0;$$

$$\partial f / \partial y = 0$$

的解，应用 $\Delta X/2$ 和 $\Delta y/2$ 修正，即

$$X = X_1 + \Delta X / 2,$$

$$y = y_1 + \Delta y / 2,$$

式中，ΔX 和 Δy 分别为 X 和 y 方向上的增量。

例一，应用二维极值有理法，对目标函数 $f(X, y) = \sin(0.25+X)\sin(0.5+y)$，在区域 R_2 ($0 \leq X \leq \pi$, $0 \leq y \leq \pi$) 上上进行优选。

解：显然，$f(X, y)$ 在 R_2 上是单峰的，故满足二维极值有理法法的条件。

在用二维极值有理法进行优选时，在 X 方向经过 5 次优选，得出 $f(X, y_0)$ 在 X 方向上的优选值 $X = 1.32079632$。

然后，固定 X 值，再对 y 方向进行 5 次优选，得出 $f(X_0, y)$ 在 y 方向上的优选值 $y = 1.07079632$，其计算结果如下：

n	X_n	$\Delta f/\Delta X_n$	公式(1) X_n	a_n
0	1·07079365	0·946933406	1·07079365	1·07079365
1	1·57079365	−0·247874431	1·32031820	−0·989615675
2	2·07079365	−0·681993970	1·31167655	−7·15326598
3	1·31187655	$-0·843139_{10}^{-2}$	1·32039749	$0·85721110^{-3}$
4	1·32039749	$-0·894572_{10}^{-4}$	1·32030004	8·70818909

因为在进行对X优选时，X的初始实验点分别为 X_0=1·07079365，X_1=1·57079365，X_2=2·07079365，ΔX=0·00099256，所以X=1·32030004+0·00049628=1·32079632。

固定X值，再对y进行优选，取y方向的三个初始实验点分别为 y_0=1·07079365，y_1=1·57079365 和 y_2=2·07079365时，其计算结果如下：

n	y_n	$\Delta f/\Delta y_n$	公式(2) y_n	b_n
0	1·07079365	$-0·485602_{10}^{-3}$	1·07079365	1·07079365
1	1·57079365	−0·479851625	1·07028714	−0·958732046
2	1·07079365	−0·841733226	1·07035794	−3·08025177
3	1·07035704	$-0·490058_{10}^{-4}$	1·07030804	$-0·984062_{10}^{-1}$
4	1·07030004	$0·372529_{10}^{-3}$	1·07030004	−2·00420611
5	1·07030004	$-0·186204_{10}^{-8}$	1·07030004	$0·279038_{10}^{-8}$