高等学校理工科研究生规划教材

实用智能优化方法

PRACTICAL INTELLIGENT ALGORITHM OF OPTIMIZATION

石鸿雁　苏晓明　编著

大连理工大学出版社
DALIAN UNIVERSITY OF TECHNOLOGY PRESS

高等学校理工科研究生规划教材

实用智能优化方法

PRACTICAL INTELLIGENT ALGORITHM OF OPTIMIZATION

石鸿雁　苏晓明　编著

大连理工大学出版社
DALIAN UNIVERSITY OF TECHNOLOGY PRESS

图书在版编目(CIP)数据

实用智能优化方法 / 石鸿雁，苏晓明编著. — 大连 ：
大连理工大学出版社，2009. 12
ISBN 978-7-5611-5246-1

Ⅰ. ①实… Ⅱ. ①石… ②苏… Ⅲ. ①最佳化理论
Ⅳ. ①O224

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2009)第 236363 号

大连理工大学出版社出版
地址：大连市软件园路 80 号　邮政编码：116023
发行：0411-84708842　邮购：0411-84703636　传真：0411-84701466
E-mail：dutp@dutp. cn　URL：http://www. dutp. cn
大连力佳印务有限公司印刷　　大连理工大学出版社发行

幅面尺寸：140mm×203mm　印张：8. 875　字数：218 千字
2009 年 12 月第 1 版　　2009 年 12 月第 1 次印刷

责任编辑：于建辉　　责任校对：骁　杰
封面设计：宋　蕾

ISBN 978-7-5611-5246-1　　定　价：25. 00 元

前言

最优化是从所有可能的方案中,依某种指标选择最合理方案的数学分支。最优化方法是在有限种或无限种可行方案中挑选最优方案,并寻求最优解的计算方法。随着计算机科学的发展和应用,以及实际问题规模的扩大和复杂性的提高,应用最优化方法解决问题的领域不断扩大,最优化理论和方法得到了不断的普及和发展。最优化方法已成为新的工程技术、管理人员必备的基础知识。

本书是编者结合多年从事工科研究生教学的经验和自身所做的现代优化算法方面的科研工作编写而成的,主要介绍最优化方法最基本、最重要、最实用的优化算法,使读者对优化算法有基本的了解,为今后进一步从事最优化的方法、理论和软件应用打下良好的基础。

本书以方法和实用为主,力求通俗易懂,深入浅出,适合自学和教学,同时注重借助计算机编程解决实际问题,如介绍了应用MATLAB优化工具箱求解优化问题的知识。

为使工科研究生在解决实际问题时,不仅掌握经典的优化方法,而且对现代优化方法有一定程度的了解。本书首先介绍了经典优化方法,如一维搜索、无约束最优化问题的梯度方法和直接方法以及约束最优化问题的基本概念、基本理论、基本方法(算法)和特点,然后以专题方式介绍了近年发展起来的智能优化算法,如禁忌搜索算法、混沌优化算法及混合优化方法,这也是本书的独特之

处。

本书以前4章为主，偏重掌握，每章后精选一些习题，并给出参考答案；以第5章为辅，侧重了解，可进行专题介绍，也可以安排读者自学。附录给出了常用的测试函数，以方便读者进行算法方面的研究。

本书既包含了经典优化算法，又包括编者近年来的研究成果。既可作为工科研究生的优化方法教材，也可供工程技术人员和进行算法研究的学者参考。

在本书的编写过程中马智慧、邢冬亚、徐振、苏宇等同学协助审阅了书稿，在此谨致谢意。

限于编者水平，书中难免有不妥和错误之处，恳请同行和读者批评指正。

编　者

2009年12月

目 录

第1章 引 论

在社会经济、工农业生产、工程技术、科学研究以及日常生活中，常常会面临下面的问题：在工程设计中如何选择参数，使设计既满足要求又能降低成本；在资源分配中，怎样的分配方案既能满足各方面的基本要求，又能获得好的经济效益；在生产计划安排中，选择怎样的计划方案才能提高产值和利润；在原料配比问题中，怎样确定各种成分的比例才能提高质量、降低成本等等。在实际问题中无论做什么事，往往有多个方案可供选择，人们总是试图以最小的投入确定并选用可实现最优结果的方案，这就是最优化问题。所谓最优化是指从问题的许多可能的解答中，挑选出依某种指标的最好解答。在解决实际问题的可行方案数量不多时，一个最直接的想法是，找出所有的可行方案，逐一比较，从中挑出最好的可行方案。但是由于问题的复杂性，有时可行方案非常多，甚至可能达到无穷，这就需要最优化方法（Methods of Optimization）。最优化方法是解决最优化问题的一种数值方法。

虽然最优化可以追溯到十分古老的极值问题，然而，它成为一门独立的学科是在 1947 年 Dantzig 提出求解一般线性规划问题的单纯形法之后。如今在电子计算机的推动下，最优化理论与方法在经济计划、工程设计（如自动控制系统的最优设计，电路、滤波网络、电机及电器的设计）、生产管理、交通运输、国防等领域得到了广泛应用，成为新的工程技术、管理人员所必备的基础知识之一。

1.1 最优化问题的引例

要求解一个实际最优化问题，首先要把该问题转化为一个数学问题，即建立数学模型。这是非常重要的一个环节，要建立合适的数学模型，首先必须对实际问题有很好地了解，然后经过分析、研究抓住其主要因素，建立其相互的联系，最后利用相关学科知识和数学知识才能完成；其次对得到的最优化问题进行整理和变换，使之成为易于求解的形式，然后选择或提出解决该问题适当的计算方法；最后编制计算程序并上机计算，同时对得到的计算结果进行分析，以确定其是否符合实际问题。下面举例说明。

【例 1.1】 曲线拟合问题

假设热敏电阻 R 是温度 t 的函数，函数关系如下

$$R=x_1\exp\left(\frac{x_2}{t+x_3}\right) \tag{1-1}$$

其中，x_1,x_2,x_3 是待定参数。通过实验测定 t 和 R 的 15 组数据（表 1-1），确定参数 x_1,x_2,x_3 使曲线尽可能地靠近所有的实验点。

表 1-1　实验测定 t 和 R 的数据

i	t_i	R_i	i	t_i	R_i
1	50	34 780	9	90	8 261
2	55	28 610	10	95	7 030
3	60	23 650	11	100	6 005
4	65	19 630	12	105	5 147
5	70	16 370	13	110	4 427
6	75	13 720	14	115	3 820
7	80	11 540	15	120	3 307
8	85	9 744			

解　该问题可利用最小二乘法原理求解，即确定参数的一组值，使其偏差的平方和

$$S=\sum_{i=1}^{15}\left[R_i-x_1\exp\left(\frac{x_2}{t_i+x_3}\right)\right]^2 \tag{1-2}$$

最小。

【例 1.2】 生产安排问题

某工厂生产甲、乙、丙三种产品,每件产品所消耗的材料、工时、盈利数据见表1-2。

表 1-2 甲、乙、丙三种产品所消耗的材料、工时、盈利数据

产品	甲	乙	丙
材料(千克/件)	4	4	5
工时(小时/件)	4	2	3
盈利(元/件)	7	3	6

已知该工厂每天的材料消耗不超过600千克,工时不超过1 400小时,问每天生产甲、乙、丙三种产品各多少时盈利最大?

解 设每天生产甲、乙、丙三种产品分别为 x_1, x_2, x_3 件,因此盈利为

$$7x_1+3x_2+6x_3$$

其相应的材料限制为

$$4x_1+4x_2+5x_3\leqslant 600$$

工时限制为

$$4x_1+2x_2+3x_3\leqslant 1\,400$$

再考虑自然限制

$$x_1\geqslant 0, x_2\geqslant 0, x_3\geqslant 0$$

因此生产安排问题就是在上述限制条件下,使其盈利达到最大。其数学表达式为:

$$\begin{cases}\max & f(\boldsymbol{x})=7x_1+3x_2+6x_3\\ \text{s.t.} & 4x_1+4x_2+5x_3\leqslant 600\\ & 4x_1+2x_2+3x_3\leqslant 1\,400\\ & x_1\geqslant 0, x_2\geqslant 0, x_3\geqslant 0\end{cases}$$

【例 1.3】 库存问题

一零售商店需要储存和销售货物，显然影响库存的因素很多。为简便，只考虑一种货物。假设商店用于担负货物存货的资金不超过 S 元。货物共有 n 个型号，j 型号货物的外包装体积为 V_j，仓库用于存储货物的最大容积为 V。一般货物为批量订货，每订购一批 j 型号货物，需花费手续费 a_j（由于每批进货的数量是相同的，因而入库费用可同手续费合并计算）。每台 j 型号货物的单价为 c_j，每年对 j 型号货物的需要量为 d_j，假设 j 型号货物年库存费用与价格的比为 q_j。如何进货使订货及存储的平均年花费最小？

解 假设 x_j 为一批 j 型号货物的订货台数，则订货费用为 a_jd_j/x_j，存储的年平均费用应是存货的平均数量 $x_j/2$ 同年存储费 q_jc_j 的乘积，即 $q_jc_jx_j/2$。故订货及存储的年平均花费为

$$f(\boldsymbol{x}) = \sum_{j=1}^{n}\left(\frac{a_jd_j}{x_j} + \frac{q_jc_jx_j}{2}\right)$$

由库存总价值不能超过上限有

$$g_1(\boldsymbol{x}) = \sum_{j=1}^{n} c_jx_j - S \leqslant 0$$

库存容量的限制为

$$g_2(\boldsymbol{x}) = \sum_{j=1}^{n} V_jx_j - V \leqslant 0$$

此外，$x_j \geqslant 0 (j = 1,2,\cdots,n)$。因此，建立的数学模型为：

$$\begin{cases} \min \quad f(\boldsymbol{x}) = \displaystyle\sum_{j=1}^{n}\left(\frac{a_jd_j}{x_j} + \frac{q_jc_jx_j}{2}\right) \\ \text{s.t.} \quad g_1(\boldsymbol{x}) = \displaystyle\sum_{j=1}^{n} c_jx_j - S \leqslant 0 \\ \qquad\ \ g_2(\boldsymbol{x}) = \displaystyle\sum_{j=1}^{n} V_jx_j - V \leqslant 0 \\ \qquad\ \ x_j \geqslant 0 (j = 1,2,\cdots,n) \end{cases}$$

【例 1.4】 合理下料问题

设要用某类钢板下 m 种零件 $A_1,A_2,\cdots,A_m$ 的毛坯料。根据既省料又容易操作的原则，人们在一块钢板上已设计出 n 种不同的下料方案，设在第 j 种下料方案中可得到零件 A_i 的个数为 a_{ij}，第 i 种零件的需要量为 $b_i(i=1,2,\cdots,m)$。问应如何下料才能既满足需要，又使所用钢板的总数最少？试建立其数学模型。

解 设采用第 j 种方案下料的钢板数为 x_j，所用钢板总数为 y，则上述问题可化为如下的最优化问题：

$$\begin{cases} \min \quad y=\sum_{j=1}^{n} x_j \\ \text{s.t.} \quad \sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_j \geqslant b_i, i=1,2,\cdots,m \\ \qquad\quad x_j \geqslant 0, x_j \in I, j=1,2,\cdots,n \end{cases}$$

其中，$I=\{0,1,2,\cdots,n,\cdots\}$。

【例 1.5】 投资决策问题

解 设在一段时间(比如三年)内，有 B 亿元的基金可用于投资，有 m 个项目 $A_1,A_2,\cdots,A_m$ 可供挑选。若对项目 A_i 进行投资，需花费 a_i 亿元，可获益 c_i 亿元，试确定最佳的投资方案。

解 引入变量

$$x_i=\begin{cases}1, & \text{若对 } A_i \text{ 投资} \\ 0, & \text{若对 } A_i \text{ 不投资}\end{cases}, i=1,2,\cdots,m$$

则需满足的条件为

$$\sum_{i=1}^{m} a_i x_i \leqslant B, x_i \in I=\{0,1\}, i=1,2,\cdots,m$$

最佳的投资方案应该为：投资少，收益大。若要投资少，则 $\min\sum_{i=1}^{m} a_i x_i$；若要收益大，则 $\max\sum_{i=1}^{m} c_i x_i$。

1.2 最优化问题的概念

1.2.1 最优化问题的基本概念

将上一节的例子进行抽象，得到最优化问题的一般数学模型为：

$$\begin{cases}\min & f(\boldsymbol{x}) \\ \text{s. t.} & h_i(\boldsymbol{x})=0, i=1,2,\cdots,m \\ & g_j(\boldsymbol{x})\leqslant 0, j=1,2,\cdots,l\end{cases} \tag{1-3}$$

其中，$\boldsymbol{x}=(x_1,x_2,\cdots,x_n)^{\mathrm{T}}\in\mathbf{R}^n$，通常称变量 $x_1,x_2,\cdots,x_n$ 为决策变量(decision variables)，称 $f(\boldsymbol{x})$为目标函数(objective function)，$h_i(\boldsymbol{x})=0$ 为等式约束，$g_j(\boldsymbol{x})\leqslant 0$ 为不等式约束，等式约束和不等式约束统称为约束条件(constraint condition)。s. t. 为英文“subject to”的缩写，表示“受限制于”。$R=\{\boldsymbol{x}\mid h_i(\boldsymbol{x})=0, i=1,2,\cdots,m; g_j(\boldsymbol{x})\leqslant 0, j=1,2,\cdots,l\}$称为最优化问题(1-3)的可行集(feasible set)(可行域 feasible region)或容许集，称 $\boldsymbol{x}\in\mathbf{R}$ 为最优化问题(1-3)的可行点(feasible point)(可行解 feasible solution)或容许解。通常最优化问题的标准形式为求目标函数的极小值，对于求目标函数的极大值问题，利用 $\max f(\boldsymbol{x})=\min[-f(\boldsymbol{x})]$化为求极小值问题。于是上一节的最优化问题可用数学模型表示，如例 1.1 曲线拟合问题为：

$$\min\sum_{i=1}^{15}\left[R_i-x_1\exp\left(\frac{x_2}{t_i+x_3}\right)\right]^2$$

例 1.4 合理下料问题的数学模型为：

$$
\begin{cases}
\min \quad y = \sum_{j=1}^{n} x_j \\
\text{s.t.} \quad \sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j \geqslant b_i, i = 1,2,\cdots,m \\
\qquad\quad x_j \geqslant 0, x_j \in I, j = 1,2,\cdots,n
\end{cases}
$$

其中，$I=\{0,1,2,\cdots,n,\cdots\}$。

定义 1.1 若有 $\boldsymbol{x}^* \in \mathbf{R}^n$ 使得 $\forall \boldsymbol{x} \in \mathbf{R}^n$，均有 $f(\boldsymbol{x}^*) \leqslant f(\boldsymbol{x})$，则称 $\boldsymbol{x}^*$ 为最优化问题(1-3)的(全局)最优解(global optimal solution)(点)或(全局)极小点(global minimum point)。

若存在 $\boldsymbol{x}^* \in \mathbf{R}^n$ 使得 $\forall \boldsymbol{x} \in \mathbf{R}^n, \boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{x}^*$，均有 $f(\boldsymbol{x}^*) < f(\boldsymbol{x})$，则称 $\boldsymbol{x}^*$ 为最优化问题(1-3)的严格全局最优解或严格全局极小点。

定义 1.2 若存在 $\boldsymbol{x}^*$ 的一个邻域 $N(\boldsymbol{x}^*, \varepsilon)$ 使得 $\forall \boldsymbol{x} \in \mathbf{R}^n \cap N(\boldsymbol{x}^*, \varepsilon), \varepsilon > 0$，均有 $f(\boldsymbol{x}^*) \leqslant f(\boldsymbol{x})$，则称 $\boldsymbol{x}^*$ 为最优化问题(1-3)的(局部)最优解(local optimal solution)(点)或(局部)极小点(local minimum point)，其中 $N(\boldsymbol{x}^*, \varepsilon) = \{\boldsymbol{x} \mid \|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^*\| < 0\}$，$\|\cdot\|$ 为向量的模。

若存在 $\boldsymbol{x}^* \in \mathbf{R}^n$ 使得 $\forall \boldsymbol{x} \in \mathbf{R}^n \cap N(\boldsymbol{x}^*, \varepsilon), \boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{x}^*$，均有 $f(\boldsymbol{x}^*) < f(\boldsymbol{x})$，则称 $\boldsymbol{x}^*$ 为最优化问题(1-3)的严格局部最优点或严格局部极小点。

求出 $\boldsymbol{x}^*$ 点所对应的目标函数值称为最优值，通常用 f^* 表示。

求解最优化问题(1-3)就是求其全局最优解，但是在一般情况下，我们很难求出全局最优解，常常只能求出其中一个局部最优解。本书中所介绍的最优化方法主要是求其局部最优解的数值方法。

根据目标函数和约束条件的形式不同，可把最优化问题划分为不同的类型。如根据最优化问题是否有约束条件，可分为约束最优化问题和无约束最优化问题。如例 1.1 为无约束最优化问题，例 1.2、例 1.3、例 1.4 和例 1.5 为约束最优化问题。

也可以根据目标函数和约束条件中函数的类型进行分类。若目标函数和约束条件中出现的函数均为线性函数，称该最优化问题为线性规划（Linear Programming）问题，否则称为非线性规划（Nonlinear Programming）问题，即目标函数和约束条件中出现的函数至少有一个不是线性函数，称该最优化问题为非线性规划问题。如例 1.2、例 1.4 和例 1.5 是线性规划问题，例 1.3 为非线性规划问题。

此外，对于某些特殊类型的目标函数和约束条件又可分为其他类型的优化问题，若目标函数为二次函数，而约束条件为线性函数，称该最优化问题为二次规划（Quadratic Programming）问题，显然二次规划是最简单的一种非线性规划问题。若优化变量只能取整数值时，称该最优化问题为整数规划（Integer Programming）问题，如例 1.4 和例 1.5 为整数规划。特别地，若整数规划问题中的优化变量只能取值为 0 或 1，称之为 0-1 规划，例 1.5 即是0-1 规划。当目标函数不是数量函数而是向量函数时，称之为多目标函数，例 1.5 是多目标规划，等等，还有其他的分类，在此不作详细的叙述。为了对最优化问题有直观的理解，下面介绍二维最优化问题的几何解释。

1.2.2 二维最优化问题的几何解释

具有两个变量的最优化问题具有明显的几何意义，可以用图解法（通过作图来求得最优解的方法）得到最优解和最优值。

考察如下的二维最优化问题

$$\begin{cases} \min \quad z=f(x_1,x_2) \\ \text{s. t.} \quad g_i(x_1,x_2)\leqslant 0, \quad i=1,2,\cdots,m \end{cases} \tag{1-4}$$

在三维欧式空间中，$z=f(x_1,x_2)$表示曲面，$f(x_1,x_2)=C$（常数）称为等高线或等值线。如果让常数 C 依次取一系列的数值 $c_1,c_2,\cdots$得到一族等值线，从等值线族的图上可大致看出函数值

的变化情况。而可行集 $R=\{(x_1,x_2)\mid g_i(x_1,x_2)\leqslant 0,i=1,2,\cdots,m\}$表示平面的一个区域,要求解最优化问题(1-4),即在与可行集 R 有交集的等值线中找出具有最小值的等值线。下面举例说明如何用图解法求解二维最优化问题。

【例 1.6】 求解最优化问题

$$\begin{cases}\min & z=f(x_1,x_2)=(x_1-2)^2+x_2^2\\ \text{s.t.} & x_1^2+x_2^2\leqslant 1\\ & 2x_1+x_2\geqslant 1\\ & x_1,x_2\geqslant 0\end{cases}$$

解 首先画出可行集 R,如图 1-1 所示。

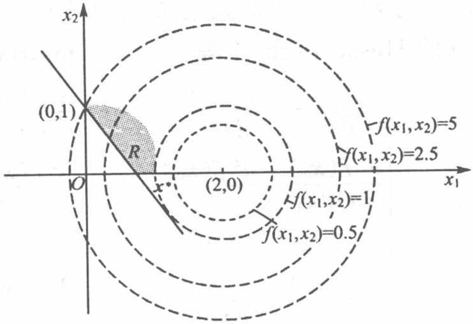

图 1-1 例 1.6 的可行集

分别令 $z=0.5,1,1.5,2,2.5,5,\cdots$,做出目标函数的等值线族(图中的虚线),从图中可以看出:该问题的最优解为 $\boldsymbol{x}^*=(1,0)^{\mathrm{T}}$,最优值为 $f(\boldsymbol{x}^*)=1$。

一般地,用图解法求最优解的步骤为:

(1)画出最优化问题的可行集 R 的图形;

(2)让常数 C 取一系列数值 $c_1,c_2,\cdots$,做出目标函数的等值线族;

(3)通过观察等值线族与可行集 R,确定使目标函数取得最小值的可行解 $\boldsymbol{x}^*$,从而求出最优值。

1.3 数学预备知识

1.3.1 梯度、Hesse 矩阵与多元函数的 Taylor 展开式

定义 1.3 设 n 元函数 $f(\boldsymbol{x})$ 在点 $\boldsymbol{x}_0$ 可微，则称向量

$$\nabla f(\boldsymbol{x}_0)=\left(\frac{\partial f(\boldsymbol{x}_0)}{\partial x_1},\frac{\partial f(\boldsymbol{x}_0)}{\partial x_2},\cdots,\frac{\partial f(\boldsymbol{x}_0)}{\partial x_n}\right)^{\mathrm{T}} \tag{1-5}$$

为函数 $f(\boldsymbol{x})$ 在点 $\boldsymbol{x}_0$ 处的梯度(gradient)。

定义 1.4 设 n 元函数 $f(\boldsymbol{x})$ 在点 $\boldsymbol{x}_0$ 处二次可微，将 $f(\boldsymbol{x})$ 在点 $\boldsymbol{x}_0$ 处的二阶偏导数按下列形式组成的矩阵 $\nabla^2 f(\boldsymbol{x})$ 称为函数 $f(\boldsymbol{x})$ 在点 $\boldsymbol{x}_0$ 处的 Hesse(海赛)矩阵(Hessian matrix)：

$$\nabla^2 f(\boldsymbol{x}_0)=\begin{pmatrix}\dfrac{\partial^2 f(\boldsymbol{x}_0)}{\partial x_1^2} & \dfrac{\partial^2 f(\boldsymbol{x}_0)}{\partial x_1\partial x_2} & \cdots & \dfrac{\partial^2 f(\boldsymbol{x}_0)}{\partial x_1\partial x_n}\\ \dfrac{\partial^2 f(\boldsymbol{x}_0)}{\partial x_2\partial x_1} & \dfrac{\partial^2 f(\boldsymbol{x}_0)}{\partial x_2^2} & \cdots & \dfrac{\partial^2 f(\boldsymbol{x}_0)}{\partial x_2\partial x_n}\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ \dfrac{\partial^2 f(\boldsymbol{x}_0)}{\partial x_n\partial x_1} & \dfrac{\partial^2 f(\boldsymbol{x}_0)}{\partial x_n\partial x_2} & \cdots & \dfrac{\partial^2 f(\boldsymbol{x}_0)}{\partial x_n^2}\end{pmatrix}^{\mathrm{T}} \tag{1-6}$$

显然，当 $f(\boldsymbol{x})$ 在点 $\boldsymbol{x}_0$ 处二次可微时，其 Hesse 矩阵 $\nabla^2 f(\boldsymbol{x})$ 是对称的。

设向量 $P(\boldsymbol{x})$ 的每个分量 $p_i(\boldsymbol{x})$ 均为 $\boldsymbol{x}$ 的可微函数，显然可求每个 $p_i(\boldsymbol{x})$ 的梯度 $\nabla p_i(\boldsymbol{x})$，则可定义向量 $P(\boldsymbol{x})$ 的梯度为

$$\nabla P(\boldsymbol{x})=(\nabla p_1(\boldsymbol{x}),\nabla p_2(\boldsymbol{x}),\cdots,\nabla p_n(\boldsymbol{x})) \tag{1-7}$$

显然，$\nabla P(\boldsymbol{x})$ 是 n 阶方阵。由 $\nabla^2 f(\boldsymbol{x})$ 的表达式可知，函数 $f(\boldsymbol{x})$ 的 Hesse 矩阵的第 j 列就是 $f(\boldsymbol{x})$ 关于 x_j 的一阶偏导数 $\dfrac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_j}$(即梯度 $\nabla f(\boldsymbol{x})$ 的第 j 个分量)的梯度。因此，根据 $\nabla P(\boldsymbol{x})$ 的