北京大学数学教学系列丛书

本科生
数学基础课教材

数值最优化方法

高立 编著

北京大学出版社
PEKING UNIVERSITY PRESS

北京大学数学教学系列丛书

数值最优化方法

高　立　编著

北京大学出版社
PEKING UNIVERSITY PRESS

图书在版编目(CIP)数据

数值最优化方法/高立编著. —北京: 北京大学出版社.
2014. 8
(北京大学数学教学系列丛书)
ISBN 978-7-301-24645-0
Ⅰ. ①数…　Ⅱ. ①高…　Ⅲ. ①最优化算法-高等学校-教材
Ⅳ. O242.23

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2014) 第 182244 号

书　　　名: 数值最优化方法
著名责任者: 高　立　编著
责 任 编 辑: 曾琬婷
标 准 书 号: ISBN 978-7-301-24645-0/O·0995
出 版 发 行: 北京大学出版社
地　　　址: 北京市海淀区成府路 205 号　100871
网　　　址: http://www.pup.cn　新浪微博: @北京大学出版社
电 子 信 箱: zpup@pup.cn
电　　　话: 邮购部 62752015　发行部 62750672　编辑部 62767347
出版部 62754962
印 刷 者: 北京大学印刷厂
经 销 者: 新华书店
890 毫米×1240 毫米　A5　9.375 印张　260 千字
2014 年 8 月第 1 版　2014 年 8 月第 1 次印刷
定　　　价: 28.00 元

内 容 简 介

本书的内容包括求解光滑非线性无约束和有约束最优化问题的基本方法与基本性质以及方法的数值试验结果.

本书在选材上, 注重最优化方法的基础性与实用性; 在内容的处理上, 注重由浅入深、循序渐进; 在叙述上, 力求清晰、准确、简明易懂. 为了帮助读者理解和巩固所学的内容, 在第二章至第九章各章之后配置了丰富的习题和上机习题, 并在书末附有大部分习题的答案和提示.

本书可作为高等院校计算科学专业以及相关专业本科生的教材或教学参考书, 也可供从事科学与工程计算的科技人员参考.

作 者 简 介

高 立 北京大学数学科学学院教授、博士生导师. 1988 年在 Technical University of Denmark 获博士学位, 主要研究方向为最优化方法及其应用. 主讲过的课程主要有“数学试验”“数值代数”“最优化方法”“运筹学”“数值代数 II”“最优化理论与算法”等. 出版了教材《数值线性代数》(合编).

序　言

自 1995 年以来, 在姜伯驹院士的主持下, 北京大学数学科学学院根据国际数学发展的要求和北京大学数学教育的实际, 创造性地贯彻教育部“加强基础, 淡化专业, 因材施教, 分流培养”的办学方针, 全面发挥我院学科门类齐全和师资力量雄厚的综合优势, 在培养模式的转变、教学计划的修订、教学内容与方法的革新, 以及教材建设等方面进行了全方位、大力度的改革, 取得了显著的成效. 2001 年, 北京大学数学科学学院的这项改革成果荣获全国教学成果特等奖, 在国内外产生很大反响.

在本科教育改革方面, 我们按照加强基础、淡化专业的要求, 对教学各主要环节进行了调整, 使数学科学学院的全体学生在数学分析、高等代数、几何学、计算机等主干基础课程上, 接受学时充分、强度足够的严格训练; 在对学生分流培养阶段, 我们在课程内容上坚决贯彻“少而精”的原则, 大力压缩后续课程中多年逐步形成的过窄、过深和过繁的教学内容, 为新的培养方向、实践性教学环节, 以及为培养学生的创新能力所进行的基础科研训练争取到了必要的学时和空间. 这样既使学生打下宽广、坚实的基础, 又充分照顾到每个人的不同特长、爱好和发展取向. 与上述改革相适应, 积极而慎重地进行教学计划的修订, 适当压缩常微、复变、偏微、实变、微分几何、抽象代数、泛函分析等后续课程的周学时, 并增加了数学模型和计算机的相关课程, 使学生有更大的选课余地.

在研究生教育中, 在注重专题课程的同时, 我们制定了 30

多门研究生普选基础课程 (其中数学系 18 门), 重点拓宽学生的专业基础和加强学生对数学整体发展及最新进展的了解.

教材建设是教学成果的一个重要体现. 与修订的教学计划相配合, 我们进行了有组织的教材建设. 计划自 1999 年起用 8 年的时间修订、编写和出版 40 余种教材. 这就是将陆续呈现在大家面前的“北京大学数学教学系列丛书”. 这套丛书凝聚了我们近十年在人才培养方面的思考, 记录了我们教学实践的足迹, 体现了我们教学改革的成果, 反映了我们对新世纪人才培养的理念, 代表了我们新时期的数学教学水平.

经过 20 世纪的空前发展, 数学的基本理论更加深入和完善, 而计算机技术的发展使得数学的应用更加直接和广泛, 而且活跃于生产第一线, 促进着技术和经济的发展, 所有这些都正在改变着人们对数学的传统认识. 同时也促使数学研究的方式发生巨大变化. 作为整个科学技术基础的数学, 正突破传统的范围而向人类一切知识领域渗透. 作为一种文化, 数学科学已成为推动人类文明进化、知识创新的重要因素, 将更深刻地改变着客观现实的面貌和人们对世界的认识. 数学素质已成为今天培养高层次创新人才的重要基础. 数学的理论和应用的巨大发展必然引起数学教育的深刻变革. 我们现在的改革还是初步的. 教学改革无禁区, 但要十分稳重和积极; 人才培养无止境, 既要遵循基本规律, 更要不断创新. 我们现在推出这套丛书, 目的是向大家学习. 让我们大家携起手来, 为提高中国数学教育水平和建设世界一流数学强国而共同努力.

张继平

2002 年 5 月 18 日

于北京大学蓝旗营

前　言

随着计算机技术的发展, 最优化方法在科学、工程、经济、工业、商业等领域的重要性日益凸显, 所以为大学本科生开设最优化方法的课程是很重要的.

作者多年来在北京大学为本科生开设 “最优化方法” 课程, 本教材是在该课程所用讲义的基础上编写的. 本教材初稿自 2008 年起由作者在每年讲授的课程上使用, 授课对象是北京大学数学科学学院各届计算科学专业 (该专业名称据 1998 年教育部颁布的普通高等学校专业目录而定. 1998 年前, 该专业称为计算数学专业) 和其他相关专业的学生. 在此期间, 根据教材的使用情况和学生的反馈意见, 作者对本教材进行了反复的修改.

考虑到一门课程的授课时间和授课对象等因素, 本教材的编写主要注意了以下几个方面:

1. 在基本理论和基本方法的选材上, 我们主要选择了针对光滑非线性最优化问题的基本概念、基本方法以及这些方法的基本性质等内容;

2. 考虑到计算科学专业的特点以及最优化方法既需要理论分析又需要进行数值计算的特点, 我们运用本教材中的重要方法, 对一些著名的优化检验问题进行了数值计算, 给出了数值结果, 以便大家更好地理解各种方法及其数值表现;

3. 在方法的讲述方式上, 我们尝试着尽可能清楚地阐述方法构造的思想及意义, 以帮助读者更好地理解方法, 掌握方法;

4. 考虑到最优化方法是一门应用广泛的学科, 我们适当地加入了几个应用问题的最优化模型, 以期让学生了解最优化方法实用性的

重要.

本教材的教学时间以 48—54 学时为宜. 教材中的内容适宜学生自己学习或者课堂讲授. 本教材自第二章起在每章后都附有后记, 介绍该章方法的渊源以及更多相关的方法, 期望为学生进一步的学习提供指南. 为了使学生更好地理解和巩固所学的知识, 教材自第二章起每章后都附有习题, 并在教材的最后附有习题答案或提示. 为了使学生从数值计算的角度更好地理解各种方法, 培养用最优化方法解决问题的能力, 本教材在需要编制程序的章后设有上机题目. 如果不要求学生自己编制程序, 可以让学生调用 Matlab 工具箱中的程序, 解决这些问题.

编写这部教材的过程不仅仅是一个让我静心梳理和学习知识的过程, 在这个过程中, 我得到过许多人真诚的帮助, 这些帮助使我获益匪浅, 我希望在这里向他们表达我深深的谢意.

首先我要特别地向林霖同学表示感谢, 感谢他在我决定撰写本教材之时, 所给予我的鼓励和从绘图到计算等多方面切实的帮助. 正是由于这些帮助. 使我得以顺利地完成本教材的撰写.

感谢梁鑫同学, 他编写了教材中算法的 Matlab 程序, 并对数值试验中的算例进行了计算. 我的研究生顾晓娟、陈显全和王闻蔚仔细地阅读了全部书稿, 并提出了许多宝贵的意见和建议. 樊家琛绘制了教材中部分示意图，徐智韬耐心细致地检查了习题与提示. 在 2008 年至 2014 年使用本教材初稿授课期间, 我得到过很多同学的帮助, 他们与我讨论问题, 提出自己的看法与建议, 尤其是黄晨笛、魏烨翔和梅松同学，他们逐字逐句地阅读书稿并提出修改意见. 在这里我向大家表示我真诚的谢意.

感谢我的同事徐树方教授和马尽文教授对书稿提出的宝贵意见. 特别地，我要感谢中国科学院数学与系统科学研究院的戴彧虹研究员，他在百忙之中抽出时间阅读了全部书稿, 给出了非常宝贵的建议. 我还要感谢本教材的责任编辑曾琬婷, 她对每次排版的稿件, 都认真、细致

地提出了许多修改意见, 为本教材的顺利出版做了大量耐心的工作. 最后感谢北京大学出版社为出版本教材给予的大力支持.

迄今为止, 国内外已经出版了许多最优化方法的教材和专著. 在本教材的编写过程中, 我们参考了许多优秀的教材和专著, 我们已将他们列在本教材的参考文献中. 借此机会我要向这些著作的作者表示诚挚的感谢.

由于作者的水平有限, 本教材的错漏与不足在所难免, 欢迎读者给予批评指正.

高　立

2014 年 4 月于燕园

目　录

第一章　引　　论

自古以来, 凡事追求尽善尽美是人类的天性, 因而为解决产生于科学、工程、数学、经济和商业等领域的实际问题时, 人们欲从众多可行方案中选择最优的或近似最优的解决方案, 便是自然而然的事了. 幸运的是, 在科学技术与计算机高速发展的今天, 人们的这种愿望, 至少可以在某种程度上得以满足. 虽然我们所能找到的方案不能尽善尽美, 但是我们所进行的有目的、有针对性的选择至少比盲目的选择要好得多. 这就是最优化技术能在现代科学技术领域乃至所有可以提炼数学信息的领域有着那么广泛的应用、占有那么重要的地位的原因.

1. 最优化问题

最优化问题可以分为无约束最优化问题与约束最优化问题两大类型.

无约束最优化问题是求一个函数的极值问题, 即

$$\min f(x), \tag{1.1}$$

其中 $x \in \mathbb{R}^n$, $f(x) \in \mathbb{R}$ 称为**目标函数**. 问题 (1.1) 的解称为**最优解**, 记为 x^*, 该点的函数值 $f(x^*)$ 称为**最优值**. 例如, 问题 $\min f(x)=(x-1)^2$, $x \in \mathbb{R}$ 是无约束最优化问题, 其最优解为 $x^* = 1$.

如果极值问题受到某些条件的限制, 该极值问题就成为**约束最优化问题**

$$\min\ f(x), \tag{1.2a}$$

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

$$c_i(x) \geqslant 0,\ i \in \mathcal{I}, \tag{1.2c}$$

其中 s.t. 是 "subject to" 的缩写, 意为 "满足于", $x \in \mathbb{R}^n$, $f(x) \in \mathbb{R}$ 称为目标函数, $c_i(x) \in \mathbb{R}$ $(i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I})$ 称为**约束函数**, $c_i(x) = 0$ 和 $c_i(x) \geqslant 0$ 分别称为**等式约束**和**不等式约束**, $\mathcal{E} = \{1, \cdots, m_e\}$ 和 $\mathcal{I} = \{m_e + 1, \cdots, m\}$ 分别是等式约束指标集合和不等式约束指标集合, m, m_e 为正整数, $m_e \leqslant m$, (1.2b) 式和 (1.2c) 式统称为**约束条件**(简称为**约束**). 例如, 问题 $\min f(x) = (x-1)^2$, s.t. $x \geqslant 2$, $x \in \mathbb{R}$ 是约束最优化问题, 其最优解为 $x^* = 2$.

问题 (1.1) 和问题 (1.2) 是最优化问题的一般形式, 其他形式的最优化问题均可以变换成此种形式. 例如，极大化问题 $\max f(x)$ 等价于极小化问题 $\min -f(x)$, 约束 $c_i(x) \leqslant 0$ 可以化为约束 $-c_i(x) \geqslant 0$.

2. 最优化问题的分类

最优化问题的分类是多样的. 根据变量的取值是否连续, 最优化问题可分为:

- 连续最优化问题;
- 离散最优化问题.

根据连续最优化问题中函数是否连续可微, 连续最优化问题又可分为:

• 光滑最优化问题: 问题 (1.2) 中所有函数, 包括目标函数与约束函数均连续可微;

• 非光滑最优化问题: 问题 (1.2) 中只要有一个函数不是连续可微的, 该问题即为非光滑最优化问题.

约束最优化问题 (1.2) 又分为目标函数和约束函数均为线性函数的线性规划问题和目标函数或约束函数中至少有一个是非线性函数的非线性规划问题.

3. 最优化方法的主要内容

最优化方法是指用科学计算的方法来求解问题 (1.1) 或问题 (1.2) 的方法. 一般来说, 求解实际问题的主要过程可以分为三步: 建模 —

求解 — 检验. 建模是将我们要解决的实际问题抽象为如问题 (1.1) 或问题 (1.2) 的数学模型的过程; 求解是根据所建问题的特点, 建立最优化方法, 寻找问题的最优解或近似最优解的过程, 这其中包括设计计算方法、编制程序、上机运算、得到近似结果. 一般来说, 通过计算得到的解是近似解, 而非问题的精确解. 与精确解相比, 近似解是有误差的. 如果得到的近似解不太符合实际情况或需求, 就需要调整问题, 修改模型, 重新进行计算, 这就是检验的目的与过程. 本书的内容, 主要集中在讨论如何构造求解问题 (1.1) 或问题 (1.2) 的计算方法, 讨论这些方法的性质和数值表现等方面. 另外, 在例题与作业中, 我们会有少量建模的问题.

随着科学与技术的发展, 现代的最优化问题具有如下的特点：维数高、规模大、问题复杂、具有非线性性等. 这些问题要求我们在构造算法的时候, 需要考虑下面两个问题:

- 有效性. 一个好的算法要尽可能地使用尽量少的计算机时间和尽量少的计算机空间.

- 精确性. 计算问题本身的属性和计算机的舍入差都会对计算解的精确性产生影响. 欲考虑计算解的精确性问题, 就要对问题进行敏度分析, 建立数值稳定的算法.

当然, 这些要求可能是相互矛盾的. 比如说, 一个较快速的方法在计算的过程中可能需要使用较多的计算机空间. 因此使用者需要根据自己的需求去选择算法, 或者针对问题的特殊性, 自行设计算法. 这就要求我们对于各种算法的特点及基本的数学理论有透彻的理解.

4. 最优化问题实例

下面举三个最优化方法应用于医学与经济领域的例子.

例 1.1(肺功能的测定)　在医学上, 患者肺功能的好坏是通过测定患者的血氧分压 PO_2 来确定的. 以前测量 PO_2 的方式是使用插管术, 这种方式既容易引起感染, 又使得病人不舒服. 后来人们发明了血氧仪. 该仪器通过检测人体末梢组织, 如手指或耳垂等部位, 根据不

同波长的红光和红外光的吸光度变化率, 推算出组织的动脉血氧饱和度 SO_2. 我们只要建立起 SO_2 与 PO_2 的关系, 就可以根据测得的 SO_2 计算 PO_2. 1979 年, Severinghaus[71] 给出一组患者的 PO_2 和 SO_2 数据, 见表 1.1, 其中 t_i 表示患者的 PO_2, 单位为百分数 (%); y_i 表示患者的 SO_2, 单位为托 (torr).

表 1.1　一组患者的 PO_2 和 SO_2 数据

t_i/%	y_i/torr	t_i/%	y_i/torr	t_i/%	y_i/torr
4	2.56	36	68. 63	75	95.10
6	4.37	38	71. 96	80	95.84
8	6.68	40	74. 69	85	96.42
10	9.58	42	77. 29	90	96.88
12	12.96	44	79. 55	95	97.25
14	16.89	46	81. 71	100	97.49
16	21.40	48	83. 52	110	97.86
18	26.76	50	85. 08	120	98.21
20	32.132	52	86. 59	130	98.44
22	37.60	54	87. 70	140	98.62
24	43.14	56	88. 93	150	98.77
26	48.27	58	89. 89	175	99.03
28	53.16	60	90. 85	200	99.20
30	57.54	65	92. 73	225	99.32
32	61.69	70	94. 06	250	99.41
34	65.16				

1984 年, Du Toit 和 Gonin[23] 给出这样的模型:

$$\tilde{f}(x;t) = C_5 C_1^{C_2^{1-C_3^{tC_4}}}, \tag{1.3}$$

其中 $C_i = \dfrac{1}{1+\mathrm{e}^{x_i}}$ $(i=1,2,3)$, $C_4 = 1+\mathrm{e}^{x_4}$, $C_5 = x_5$. 在这个模型中, t 表示 PO_2, $\tilde{f}$ 表示 SO_2. 如果我们能够根据测定的数据, 确定 x_i $(i=1,\cdots,5)$ 的值, 就可以根据 (1.3) 式, 求出反函数 $t(\tilde{f})$.

建立最优化问题