实用最优化方法

[英]R·Fletcher 著

游兆永 徐成贤 吴振国 胡月梅 译

天津科技翻译出版公司

实用最优化方法

R·Fletcher 著

游兆永　徐成贤　吴振国　胡月梅译

天津科技翻译出版公司

内 容 简 介

本书是由国际著名的最优化专家、英国的R·Fletcher教授编撰。书中对当今世界广泛使用的最有成效的无约束与约束最优化方法作了比较系统的论述，并介绍了最近十年来最优化研究的最新成果。全书以方法的实用性为主线，辅之以少量必要的理论分析，避免了纯理论的论述。书中在叙述基本方法的同时，作者又根据其几十年从事最优化研究与计算的切身经验就如何使方法更有效，更可靠地运用的问题进行了探讨，并对有关方法附有实际计算的数值结果以供使用，因而适用于不同层次的读者需要。

本书既可作为大学本科学生、硕士及博士研究生的教学参考用书，又可作为工程技术人员的参考用书。

实用最优化方法
游兆永　徐成贤　吴振国　胡月梅　译
责任编辑　李丕章
·　·　·
天津科技翻译出版公司出版
（天津市河西区吴家窑大街22号）
新华书店天津发行所发行
河北省三河县科教印刷厂印刷
·　·　·
开本787×1092　1/32　印张：14.75　字数：310（千字）
1990年7月第1版　1990月7月第1次印刷
印数1—3500册
ISBN7-5433-0067-2/O·11　定价：8.50元

序　言

最优化是一门集理论与实验、既严密又富启发性的学科，既可把它当作纯数学的一个分枝来研究，又几乎在所有的科技领域有广泛的应用。本书旨在对当前实际生活中用得最广泛的一些最优化方法就上述问题作一个比较系统的讨论。本书的写作力求把实用作为贯穿全书的主线。我始终认为，对最优化方法的特性如无实际的计算经验作背景，完成这一任务是相当困难的，甚至是不可能的。在叙述基本方法的同时，还用了一定的篇幅就如何使方法更可靠与有效地执行的问题进行了讨论。不止如此，书中还给出了不少数值比较的结果及其分析，以进一步强调这些方面的重要性。当然，在强调实际应用的同时，不能排除理论研究在最优化中的作用。对于一个科学家来说，如果有一些基本的理论分析作为基础，他就能更好更有效地应用数值方法，因此，本书也对某些理论问题，如方法的推导，怎样执行方法等方面作必要的叙述，但力求避免纯为理论的理论。

也许有人希望把本书作为本科生或研究生课程的教材。作者本人曾在工程学入门，高级数学课程及硕士与博士研究生课程这两个层次上用过本书或其中的部分章节。为照顾到这一差异，书中采用了所谓的双重表达法，即用简单的术语表达一些比较直接的内容，对一些比较困难的理论内容则采用严密的论证。当然，对后者能免则免。对多数基本的方法，尽可能给出有关数值计算的例子。据本人对过去教学情况所作的观察发现，如能就几个方法向学生提供计算机的程序，便于他们通过简单的数值计算，来发现如最速下降法在

处理Rosenbrock函数时所显示的坏形态等，有助于学生从学习中获得更多的东西。

除给出数值例子外，每章末还提供了一组练习题，这不仅可以进一步阐明书中的内容，而且对书中的内容有所扩充。其中的多数问题我曾用作学生的课外练习或试题。对某些问题读者最好用计算器，如可能的话用可编程序的计算器更好。有少部分练习题选自丹地大学数值分析专业硕士课程试题，这些问题具于小型研究课题的性质，一般采用开卷考试的方式。

鉴于在第一章叙述的原因，本书共分二卷，在第二卷接近完成时，限于自己的能力，虽然第一卷不必要重写，但对第二卷还有一些工作要重做，重写后的第二卷内容更新，预计重写工作在本年度内完成。

借此机会，我由衷地感谢所有对我的工作有影响、帮助和支持过的同事这中间要特别感谢以前我在，AERE Hawell工作的同事，M·J·D，Powell教授对我的帮助和鼓励，他对最优化技术的发展作出了杰出的贡献。感谢A.R.Mitchell教授以及丹地大学的其它同事，在本书的准备过程中是他们给了我鼓励，并为我创造了一个良好的工作环境。我也希望对D·S·Jones教授表示感谢，他对本书的出版工作表示了极大的关注及鼓励。G·A·Watson博士与M.D·Jackson博士对本书的结构安排提供了不少有益的建议，M·Smith小姐熟练的打字技术使得本书能及早出版，对此，我也表示感谢。最后，且最重要，我希望把本书奉献给我的双亲与我的家庭，以感谢他们对我无尽的爱与深刻的影响。

R·Fletcher

1979年7月于丹迪

目　　录

第　I　卷

第 II 卷

第I卷

第一章 概 论

1.1 历史与应用

可以把最优化定义为对某些数学上定义的问题确定其最优解的科学，通常这些问题是一些客观现实的模型。最优化包括对各种问题最优性条件的研究，数值求解方法的确定，这些方法结构的研究以及方法在试验性条件下与对现实问题的计算机试验。它具有非常广泛的实际应用领域，同时最优化也可以作为纯数学的一个分枝来进行研究。

在1940年以前，对多变量函数的数值最优化方法知之甚少。当时有若干最小二乘求解的方法，以及在某些物理问题上应用的最速下降法之类的方法。多变量问题的牛顿法是比较著名的，对理论化学中关于变分问题的自适应域等问题也曾试图研究一些比较高级的方法。然而由于复杂，有关的运算需要借助于大量的台式计算机。勿庸置疑，计算机的发明极大的推进了最优化方法乃至整个数值分析领域的发展。线性规划是最优化领域一个非常重要的分枝，它是在本世纪40年代与50年代引入与发展起来的。然而在当时，那些方法的应用领域相当窄，在战后的一段时间内，爬山法得到了发展，这类方法由于不考虑所论问题的任何特殊结构而应用相当广泛。但是这后一类方法最初相当粗糙，且效率很低。1959年发表的W·C·Davidon的一个报告可以说是最优化

技术的一个转折点，这个报告引入了后来所谓的变尺度方法。本人的朋友与同事Powell教授曾叙述过这样一件事情，在他1961年所出席的一个会议上，有一位报告人曾谈到他在极小化一个具有十个变量的函数时所遇到的困难，而正是在那个时候，Powell教授依据Davidon的想法构造了一个方法并编制了相应的程序，该程序用很短的时间，确定了一个具有100个变量的函数的最优解。从那时起，最优化技术有了迅速的发展，现在对各种各样的问题都有了相应的求解方法。本书力求以系统与综合的方式来叙述这些发展。

最优化方法的应用是相当广泛的，几乎涉及所有具有数值信息的活动，如科学、工程、数学、经济、商业、贸易等等，要把所有的应用加以综合性的罗列是不现实的，这里仅择其中的几个：

(a) 化学反应器设计；

(b) 航空发动机与飞机结构设计；

(c) 建筑、桥梁等的结构设计；

(d) 商业上的资源分配、安排与配料；

在数值分析其它分枝上的应用有：

(e) 数据拟合；

(f) 偏微分方程的变分原理；

(g) 常微分方程的非线性方程组；

(h) 罚函数。

还可以举出很多最优化应用的例子，这一方面可查阅Dixon（1976）为《最优化现状》学术讨论会所编辑的会议文集，或各有关领域专门的技术文献。为说明最优化所研究的问题，考虑蒸馏塔最优设计的问题，它的一个简化模型由图1.1.1所示。

这一系统用于从输入蒸馏塔的混合物蒸汽中分离出一种易于挥发的气体成分。最优化的目标函数可以是分离所得产品的数量也可以是从整个生产系统所获得的利润。变量可以包括输入气流的速度，加热的速率，各金属片上各种成分液体与气体的组成，温度与气压等。变量要受到各种因素及内在联系的制约，这些制约称为约束。

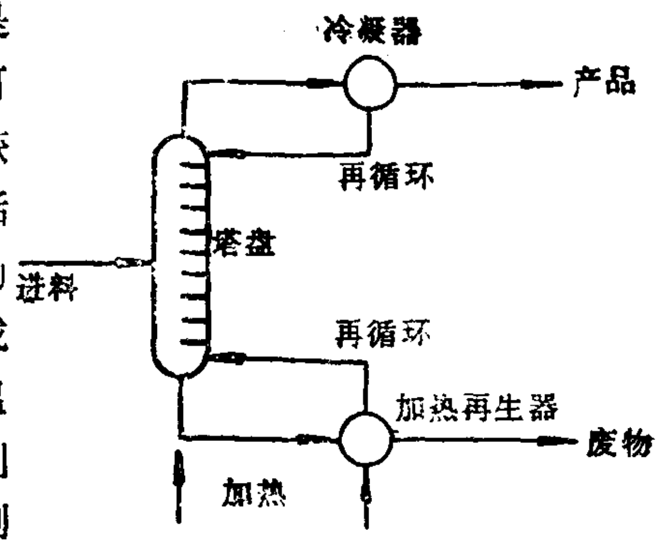

图1.1.1　蒸馏塔模型

例如液体与气体的比例，流量都必须是非负的（$x_i \geqslant 0$），温度不能超过某一上界（$T_i \leqslant T_{max}$）。各成分的百分比之和必须等于1（$\sum x_i = 1$）。除此之外，还有一些比较复杂的约束以显示各成分之间物理关系，例如气体与液体的比例关系可表示为$N_i = l_i\phi(T_i)$，其中$\phi(T_i)$为一个给定温度T_i的高度非线性函数。如果蒸馏塔中金属片的多少也允许调节，情况将变得更加复杂。所形成的问题中某些变量仅允许取整数值。

本书除在上述指出可能产生的不同类型优化问题之外，并不涉及具体的应用。但有可能把优化问题加以适当的分类，并指出适用于各类优化问题的算法。使用者据此可以把所要处理的问题归入适当的类别，以调用适当的计算机程序来求解。这些程序对所要输入的数据一般都有详细的说明。例如，对非线性函数一般要求使用者按某一指定的格式编出

相应的子程序。有一点需要记住，对实际问题，在某些情况下，由于数学模型对实际问题的近似程度不太好，或者不能完全按最优解的要求进行设计，使用者不仅要知道所论问题的最优解，还要知道解随参数变化的敏感性，即当某些参数在一定范围内变化时最优解的变化情况。作为一个通用的程序，也应该具有不需经多次的重新求解就可以提供这方面信息的能力。

鉴于上述理由，本书仅涉及各类可能出现的标准最优化问题。全书分为卷 1 与卷 2 两部分，卷 1 专门处理无约束最优化问题，即在没有任何约束的条件下确定一个多变量目标函数的最优值。这类问题不仅具有其自身的重要性，而且还是求解约束最优化问题的一个主要工具。此外，无约束最优化的一些概念直接适用于约束最优化。卷 1 还讨论了由数据拟合所产生的平方和函数的特殊情况，这当然还包含了非线性齐次方程组求解，这是一类很重要但常用最优化方法求解的问题。卷 2 用于处理约束最优化问题，由于各种形式约束的引入，增加了问题的复杂程度。卷 2 的内容计划包括：

线性规划；

整数规划；

一阶与二阶最优性条件；

凸性与对偶性；

二次规划；

线性约束的规划；

非线性规划与罚函数；

几何规划；

不可微优化。

本书的多数内容选自大量有关最优化方法的文献，主要

侧重于讨论那些已被执行，并有令人满意的数值计算结果的实用方法。对于一个算法，主要考虑两个方面：算法的可靠性以及是否有足够的证据或理由表明算法能以一个适当快的收敛率收敛于问题的一个解。同时书中也尽量指出哪些我们认为有价值或可能导致新的进展的新想法。有些读者阅读本书可能是为了寻找一个能有效地解决具体问题的方法。这样的意见是很难给的，因为，决定并非象看起来那样轮廓鲜明。在选用一个方法时有很多具体的因素需要考虑，例如函数值与导数值计算的难易程度。又如在一开始时怎样更好地处理问题同方法的选择直接有关。最后且最重要，方法的选择还依赖于该方法是否有现成的计算机程序或软件包。现在有些程序库都在文件中给出决策树来帮助使用者选择适用于他的方法。但应该提醒读者的是，即使有这样的决策树存在，也只能把它们看作一个不成熟的建议，而不能把它们看成是一个最优化技术专家的意见。

1.2 数学基础

本书的很多地方要用到矩阵代数与数值线性代数的一些基本概念与技巧。限于篇幅，对此，除了在某些场合作简洁的说明之外，在这里不准备作详细的描述（如可参阅Broyden，1975）。书中用小写黑体英文字母表示列向量，大写黑体英文字母表示矩阵，即

$$\mathbf{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} \qquad \mathbf{B} = \begin{bmatrix} B_{11}, & B_{12}, & \cdots B_{15} \\ B_{21}, & B_{22}, & \cdots B_{23} \\ \cdots\cdots & \cdots\cdots\cdots & \cdots\cdots \\ B_{r1}, & B_{r2}, & \cdots B_{r3} \end{bmatrix}$$

字母T表示转置，即$\mathbf{a}^T$表示行向量，而$\mathbf{a}^T\mathbf{z}$表示内积，即

$\mathbf{a}^T\mathbf{z} = \mathbf{z}^T\mathbf{a} = \sum_i a_i z_i$。

还要用到有关向量空间的概念，在n维空间（R^n）中的一个点$\mathbf{x}$是一个向量$(x_1, x_2, \cdots x_n)^T$，其中 x_1 为其在第一个座标方向的分量，其余类推。本书叙述的多数方法为迭代法，这些方法一般都产生一个可能收敛于问题解 $\mathbf{x}^*$的点列 $\mathbf{x}^{(1)}$，$\mathbf{x}^{(2)}$，$\mathbf{x}^{(3)}$，…，记为$\{\mathbf{x}^{(K)}\}$(见图1.2.2)，其中上标表示迭代次数。在最优化技术中，直线的概念相当重要，它是一个点的集合

$$\mathbf{x}(=\mathbf{x}(\alpha)) = \mathbf{x}'\alpha\mathbf{s} \qquad (1.2.1)$$

其中α可取任意值（在α≥0时为一半直线），$\mathbf{x}'$ 为直线上相应于α = 0时的一固定点，$\mathbf{s}$为直线的方向。例如，在图1.2.1中，$\mathbf{x}'$为点$(2,2)^T$，$\mathbf{s}$为方向$(3,1)^T$，用有向箭头表示。

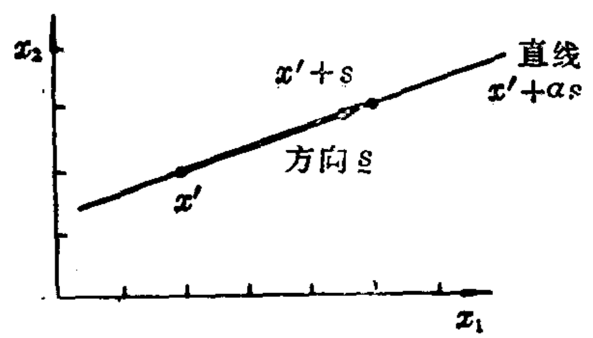

图1.2.1　二维空间中的直线

有时为了方便把向量$\mathbf{s}$规范化，即要求$\mathbf{s}^T\mathbf{s} = \sum_i s_i^2 = 1$；这样做对直线本身并无影响，只是相应于直线上的点α取值不同。

在最优化领域，另一个经常涉及的重要概念，为多变量函数（记为$f(\mathbf{x})$）的微分。对两个变量的问题可以通过画出函数的等高线来得到一些直观的认识。所谓等高线为函数

f(x)在其上恒取常数值的曲面或曲线。图1.2.2给出了著名的检验函数 Rosenbrock函数

$$f(x)=100(x_2-x_1^2)^2+(1-x_1)^2 \qquad (1.2.2)$$

的等高线，第六章的图6.2.2则给出了其它函数的等高线。一般我们总假定所论函数是光滑的，即连续且连续(Fre′chet)可微(c^1)。因此，对于一个函数f(x)，在任意点x总存在着一个一阶偏导数向量或梯度向量。

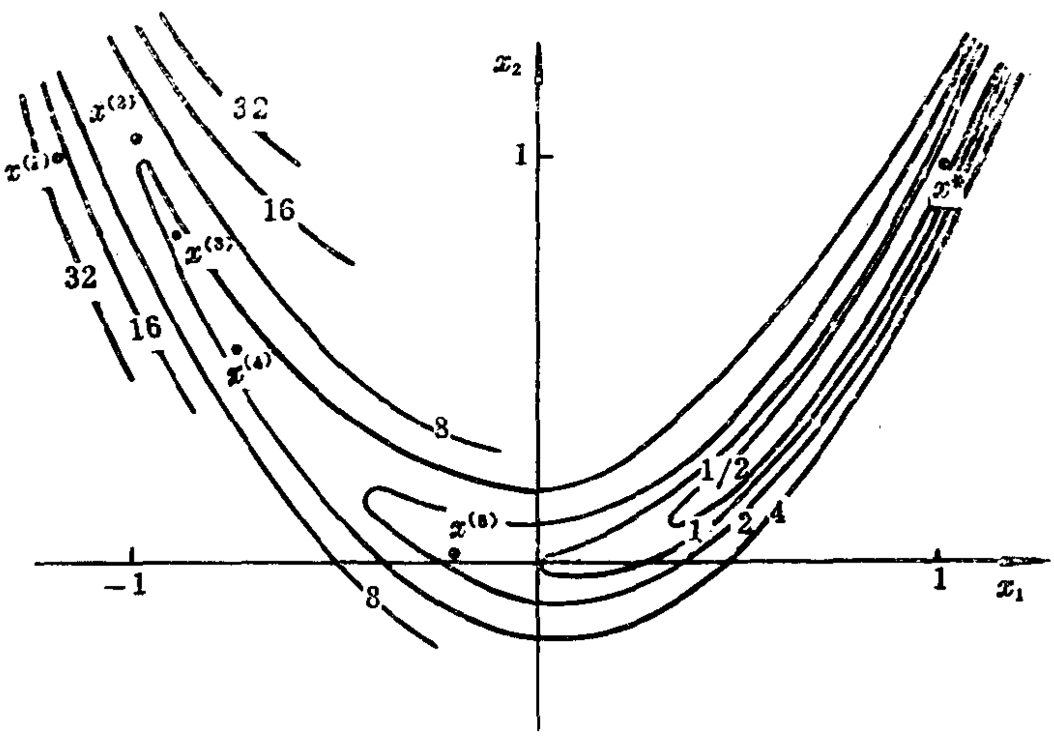

图1.2.2 Rosenbrock函数的等高线

$$\begin{pmatrix}\partial f/\partial x_1\\ \partial f/\partial x_2\\ \vdots\\ \partial f/\partial x_n\end{pmatrix}=\nabla f(x) \qquad (1.2.3)$$

其中∇表示梯度算子$(\partial/x_1, \cdots, \partial/\partial x_n)^T$。如果f(x)二次连续可微($C^2$)，则存在一个用$\nabla^2 f(x)$表示的二阶偏导数矩阵，

或称Hessian矩阵，它的第i行第j列元素为$\partial^2 f/(\partial x_i \partial x_j)$。矩阵$\nabla^2 f(\mathbf{x})$为一对称方阵，由于它的任意一列，如第j列为$\nabla(\partial f/\partial x_j)$，$\nabla^2 f(\mathbf{x})$可表示为$\nabla(\nabla f^T)$。例如，对函数(1.2.2)有：

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} -400x_1(x_2 - x_1^2) - 2(1 - x_1) \\ 200(x_2 - x_1^2) \end{pmatrix} \qquad (1.2.4)$$

$$\nabla^2 f(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} 1200x_1^2 - 400x_2 + 2 & -400x_1 \\ -400x_1 & 200 \end{bmatrix}。$$

这表明在一般情况下∇f与$\nabla^2 f$是x的函数，随x的变化而变化。因此在点$\mathbf{x}' = (0,\ 0)^T$，对(1.2.4)有$\nabla f(\mathbf{x}') = (-2, 0)^T$

$$\nabla^2 f(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 200 \end{bmatrix}。$$

利用这些表达式就可以得出f沿由(1.2.1)表示的任意直线$\mathbf{x}(\alpha)$的导数。根据链导法则

$$\frac{d}{d\alpha} = \sum_i \frac{d}{d\alpha} x_i(\alpha) \frac{\partial}{\partial x_i} = \sum_i s_i \frac{\partial}{\partial x_i} = \mathbf{s}^T \nabla \qquad (1.2.5)$$

$f(=f(\mathbf{x}(\alpha)))$沿直线在任意点$\mathbf{x}(\alpha)$的斜率为

$$\frac{df}{d\alpha} = \mathbf{s}^T \nabla f = \nabla f^T \mathbf{s}。 \qquad (1.2.6)$$

同样，沿该直线的曲率为

$$\frac{d^2 f}{d\alpha^2} = \frac{d}{d\alpha} \frac{df}{d\alpha} = \mathbf{s}^T \nabla(\nabla f^T \mathbf{s}) = \mathbf{s}^T \nabla^2 f \mathbf{s} \qquad (1.2.7)$$

其中∇f与$\nabla^2 f$在点$\mathbf{x}(\alpha)$求值。若记$\mathbf{G} = \nabla^2 f$，则$\mathbf{Gs}$为一个向量，它的第i个分量为$(\mathbf{Gs})_i = \sum_j G_{ij} s_j$，而$\mathbf{s}^T \mathbf{Gs}$为$\mathbf{s}$与$\mathbf{Gs}$的内积。以函数(1.2.2)为例，在点$\mathbf{x}' = (0, 0)^T$沿由方向$\mathbf{s} = (1,\ 0)^T$所形成的直线（图1.2.2中的$x_1$轴）的斜率为

$s^T\nabla f=-2$，曲率为$s^TGs=2$（因为$Gs=(2,\ 0)^T$）。

斜率与曲率的上述定义与向量s的大小（长度）有关，为了避免概念上的模糊不清一般要求$\|s\|=1$，（这里范数又称模$\|s\|$用以度量s的大小，常用的范数有L_2范数$\|s\|_2=\sqrt{s^Ts}$。）若用g'表示$\nabla f(x')$，则在所有使$\|s\|_2=1$的方向中，$\pm g'/\|g'\|_2$为斜率最大与最小的两个方向，且正交于$f(x)$在点x'处的等高线与切平面（见图1.2.3与问题1.4）。

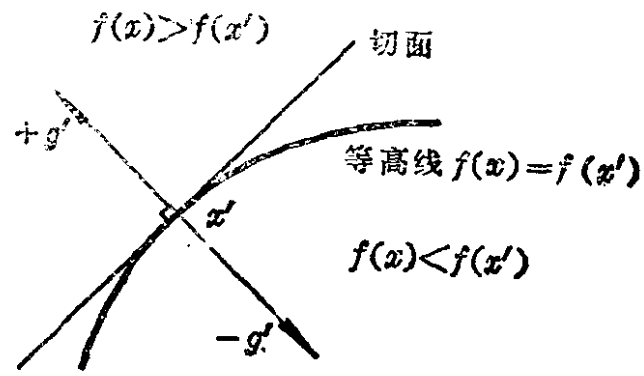

图1.2.3　梯度向量的性质

多变量函数的一个特殊情况为一般的线性函数，它可以表示为

$$f(x)=\sum_{i=1}^{n}a_ix_i+b=a^Tx+b \tag{1.2.8}$$

其中a为常向量，b为常数。如果把坐标向量定义为

$$e_i=\begin{pmatrix}0\\0\\\vdots\\1\\\vdots\\0\end{pmatrix}\begin{matrix}\\\\\\\leftarrow\text{第i个分量}\\\\\\\end{matrix} \tag{1.2.9}$$