应用最优化方法及MATLAB实现

刘兴高　胡云卿　著

科学出版社

应用最优化方法及 MATLAB 实现

刘兴高　胡云卿　著

科学出版社
北京

内 容 简 介

本书系统讲述如何将最优化方法实现为应用软件。系统阐述了各种无约束和带约束优化问题的计算方法和程序实现，内容包括：精确/非精确一维搜索、最速下降法、牛顿/拟牛顿法、共轭梯度法、单纯形法、内点法、积极集法、序列二次规划方法等。书中包含了必要的最优化理论知识，为得到最优化方法并用程序实现做准备。书中给出的许多应用优化技术是我们的最新研究成果，给出的优化程序是以专业编程技巧实现的最优化算法。书中还给出了大量的例子和习题。

本书可作为高等院校自动化、控制、系统工程、工业工程、计算机、应用数学、经济、管理、化工、材料、机械、能源等相关专业学生的教材，也可作为有关研究人员和工程技术人员的参考书。

图书在版编目(CIP)数据

应用最优化方法及 MATLAB 实现/刘兴高，胡云卿著. —北京：科学出版社，2014.1

ISBN 978-7-03-038989-3

Ⅰ. ①应… Ⅱ. ①刘…②胡… Ⅲ. ①Matlab 软件-应用-最优化算法 Ⅳ. ①O242.23-39

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2013)第 254814 号

责任编辑：杨向萍 张 宇 / 责任校对：宋玲玲

责任印制：张 倩 / 封面设计：蓝正设计

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

文林印刷厂印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2014 年 1 月第 一 版 开本：B5(720×1000)

2014 年 1 月第一次印刷 印张：20 3/4

字数：416 000

定价：95.00 元

(如有印装质量问题，我社负责调换)

前　言

人们在生活中会遇到许许多多的选择，例如，去哪一所大学就读，毕业后去什么性质的单位工作，如何安排工作计划等。其中，某些选择可能会在人生轨迹上产生重要影响。因此，人们为了追求更加幸福的生活以及避免出现“错一步棋抱憾终身”的情况，都希望在遇到问题时能得到科学而及时的指导。最优化科学，就是告诉人们如何选择才能达到最佳效果的一门科学，它既可以用于对“物”的研究（如工程学），又可以用于对“事”的研究（如管理学）。

最优化科学可以分为三个层次：①最优化理论；②最优化方法；③实践与应用。其中，位于第一层次的最优化理论，主要研究从具体问题得到的数学模型的分类、性质、解的特点等信息；第二层次的最优化方法，则是基于最优化理论提炼得到的求解上述数学模型的计算方法；最优化方法只有在具体学科中进行实践与应用才能体现其自身的价值，即第三层次“到实践中去”的过程，也是使用最优化科学解决实际问题来创造最优化价值的过程。

将最优化方法实现为具有价值的优化软件需要控制、数学与计算机等学科的交叉融合，需要解决诸多瓶颈问题，如矩阵结构的探测、针对大规模矩阵的高效分解算法、数值漂移和冗余约束的消除、高阶算法处理技巧等。目前，中国市场上具有工程背景的书籍，大多是利用国外现成的优化软件来解决在具体科学中遇到的优化问题。一方面，如果只是单纯购买和使用国外现成的优化软件，而不去尝试自主开发，那么在工业、经济、军事、国防等领域只能是长期受制于人；另一方面，如果没有可供调试的软件来辅助学习（国外商业软件的程序是无法调试的），对最优化理论与方法的理解也很难达到一定的深度。因此，将最优化方法实现为应用软件的专业指导书籍，是将最优化科学从第二层次真正推向最高层次的一个关键，这正是撰写本书的目的。书中包含了必要的最优化理论知识，作者尽可能简洁、清晰地叙述这些理论，为得到最优化方法并用程序实现做准备。

书中，第 1 章为绪论，介绍关于最优化的基本知识，通过举例使读者对生活中无处不在的最优化问题有初步了解。第 2～6 章是关于无约束优化问题的计算方法：第 2 章总体介绍无约束优化问题的基本概念和相关理论；第 3 章和第 4 章分别介绍无约束一维优化问题（也称一维搜索）的精确方法和非精确方法；第 5 章和第 6 章分别介绍无约束多维优化问题的基本方法（包括最速下降法和牛顿法）和高级方法（包括共轭梯度法和拟牛顿法）。第 7～12 章是关于带约束优化问题的计算方法：第 7 章总体介绍带约束优化问题的基本概念和相关理论；第 8 章和第 9 章分

别介绍线性规划问题的单纯形法和原-对偶路径跟踪内点法(包括当前国外流行软件中用得最多的预测校正内点法);第 10 章和第 11 章分别介绍二次规划问题的积极集法和内点法(包括预测校正内点法);第 12 章介绍针对带约束的一般非线性优化问题的序列二次规划方法。附录列出了本书优化程序的基本调用方法及参数说明。

本书介绍的所有方法均已在 MATLAB 平台上编程实现,并经过测试,形成了具有我国自主知识产权的优化软件包,书中也给出了研究组自主开发的 MATLAB 源程序,相关测试信息请参见研究组网站(http://mypage.zju.edu.cn/liuxinggao)。读者如需详细、深入了解本书数值优化方法在各个行业中的实际应用,请参考作者所著的《最优化方法应用分析》一书。

本书的读者为高等院校自动化、控制、系统工程、工业工程、计算机、应用数学、经济、管理、化工、材料、机械、能源等理工科专业的本科高年级学生、研究生,科研院所的研究人员和相关领域的工程技术人员等。研究组的周游、林芯羽和李国栋等参与完成了程序测试、插图、格式和符号统一等工作,在此一并致谢。

限于作者水平,书中疏漏之处在所难免,欢迎读者批评指正。

作　者

2013 年 6 月于浙江大学求是园

目　录

第 1 章　绪　　论

1.1　最优化方法的发展历史

自古以来，人们在做事情的时候都会自觉或者不自觉地寻求最省时、最省力的方式，使自己能以最少的付出获取最多的回报。例如，购物时如何花尽可能少的钱买尽可能多的东西，外出旅行时如何走最短的线路到达目的地，组织活动时如何做到人尽其才、物尽其用等。这些探索和寻求最佳做事方式的过程，其实就是最优化过程。

所谓最优化，通俗地讲，就是从众多选择中找到最符合人们期望的那一个选择。最优化最早可追溯到 17 世纪。当时，欧洲数学的发展使得最优化逐步脱离了之前的宗教主义和经验主义，并开始成为有严格理论支撑的数学分支。人们普遍认为，英国科学家 Newton 发明微积分并提出函数极值的概念，是最优化理论的起点。此后，在数学理论发展迅速的 18～19 世纪，涌现出的一些成果也扩充了最优化理论的体系。例如，Lagrange 提出了处理不等式约束的 Lagrange 乘子法，Cauchy 提出了最速下降法的基本思想等。然而，受计算设备的限制，这些方法在当时仅停留在理论研究阶段，并未获得实际应用。

现代意义上的最优化始于 20 世纪上半叶。早在 1939 年，苏联数学家 Kantorovich就使用了线性规划方法求解生产组织管理以及军队运输方面的问题，只是当时并未引起人们的足够重视。到了 20 世纪 40 年代，由于第二次世界大战的军事需求和电子计算机的发明，最优化理论、求解方法、具体实现首先在线性规划方面取得了巨大进展，其典型代表是 1947 年 Dantzig 提出的单纯形法。美国国家标准局(National Bureau of Standards)于 1952 年在 SEAC(Standard Electronic Automatic Computer)电子计算机上首次实现了单纯形法，从此线性规划被广泛应用到实际生产和生活中，产生了巨大效益，也极大地促进了自然科学、社会科学、工程技术等众多领域的发展。21 世纪初，单纯形法被美国《计算机科学与工程》杂志评为 20 世纪十大算法之一，它的提出也被认为是现代最优化的起始标志。

单纯形法在实际应用时已经表现得十分高效，但 1972 年 Klee 和 Minty 给出了一个例子，证明单纯形法从计算复杂度上来说是一个指数级算法，引起不小震动。为了追求理论上的完美性，许多数学家从此开始寻找求解线性规划问题的多项式复杂度算法。1979 年，苏联数学家 Khachiyan 提出了首个多项式算法——椭球算法。遗憾的是，椭球算法实现起来非常困难，实用价值不高。1984 年，美国 Bell 实验室年仅 28 岁的印度数学家 Karmarkar 提出了另外一个多项式算法——

Karmarkar 算法。由于其易实现性，该算法还登上了美国《纽约时报》和《时代周刊》。以 Karmarkar 算法为基础，20 世纪 90 年代又出现了求解线性规划问题的内点法。相比 Karmarkar 算法，内点法不仅求解效率大大提高，而且在大规模问题上的表现甚至优于单纯形法，成为新的研究热点。随着计算机的普遍使用，目前已有许多功能强大的线性规划软件，如 CPLEX、XPRESS-MP 、LIPSOL 等，可方便求解具有上万个变量的大规模线性规划问题。

非线性优化（或称非线性规划）比线性规划发展稍晚，起始标志是 1951 年由 Kuhn 和 Tucker 提出的 Kuhn-Tucker（KT）条件。KT 条件以严格的方式，给出了带约束优化问题的必要条件，为非线性优化的发展奠定了基石。但在 20 世纪 80 年代，学术界证实了 KT 条件早在 1939 年就由 Karush 在其硕士学位论文中提出过，为了尊重 Karush 的贡献，后将 KT 条件更名为 Karush-Kuhn-Tucker（KKT）条件。非线性优化的发展呈现出明显的多样性，成果丰富。在多维无约束优化问题方面，出现了共轭梯度法和拟牛顿法。共轭梯度法使用一组共轭向量作为搜索方向，而不再使用最速下降法中的负梯度方向，从而使计算效率得到大大提升。共轭梯度法最早于 20 世纪 50 年代由 Hestenes 和 Stiefel 为求解线性方程组提出，后来被 Fletcher 和 Reeves 等引入最优化领域。拟牛顿法避免了计算由二阶偏导数组成的 Hesse 矩阵及其逆矩阵，不仅降低了计算量而且有很快的收敛速度，是目前求解多维无约束优化问题的流行方法。1963 年，Fletcher 和 Powell 在 Davidon 的工作基础上进行改进，得到了 Davidon-Fletcher-Powell（DFP）方法。1970 年，数学、工程、信息领域的四位专家 Broyden、Fletcher、Goldfarb 和 Shanno，各自从不同的角度几乎同时提出了一种更加高效的拟牛顿方法，即 Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno（BFGS）方法。DFP 方法和 BFGS 方法是拟牛顿法中的典型代表，在实际应用中受到广泛赞誉。

在多维带约束优化问题方面，1968 年，Fiacco 和 McCormick 提出了序列无约束优化技术（sequential unconstrained minimization technique，SUMT），其本质是将带约束最优化问题转换为一系列无约束优化问题来求解。1978 年出现了著名的序列二次规划（sequential quadratic programming，SQP）方法，它首先由美国数学家 Wilson 于 1963 年提出，后来经过华人数学家韩世平和英国数学家 Powell 完善，所以又称为 Wilson-Han-Powell（WHP）方法。SQP 方法被公认为是当今求解非线性优化问题的最优秀算法之一。20 世纪 90 年代以后，内点法也从线性规划领域拓展到了非线性优化领域，特别是在大规模非线性优化问题的求解上，有着十分优秀的表现。

随着理论数学、计算数学和计算机科学的迅速发展，最优化理论与方法的体系中还增加了许多新兴分支，如整数规划、几何规划、动态规划、随机规划等。它们已逐渐渗透到生产、建设、经济、管理、军事、交通等方面，并发挥着越来越重要的作用。