数学实验

Experiments in Mathematics

实验7　无约束优化

Dept. of Mathematical Sciences

Tsinghua University

Beijing 100084, China

2000-11-11　1

优化模型和算法的重要意义

最优化是工程技术、经济管理、科学研究中经常遇到的问题

结构设计　　资源分配　　生产计划　　运输方案

解决优化问题的手段

- 经验积累，主观判断
- 作试验，比优劣
- 建立数学模型，求解最优策略

2000-11-11　2

优化问题的数学模型

$$\min_{x} \ z=f(x),\ x\in\Omega\in R^n$$

x～决策变量，f～目标函数，Ω～可行域

$$\min_{x} \quad z=f(x) \qquad (1)$$

$$s.t.\ \ g_i(x)\le 0,\ \ i=1,2,\cdots m \qquad (2)$$

- 可行解（只满足**(2)**）与最优解（满足**(1),(2)**）
- 无约束优化（只有**(1)**）与约束优化（**(1),(2)**）
- 实际问题一般总有约束，何时可用无约束优化处理？

2000-11-11 3

无约束优化的主要内容

1. 优化问题的最优解条件；算法模式

2. 无约束优化的基本方法：梯度法，牛顿法，拟牛顿法

3. 非线性最小二乘法

4. 优化工具箱的使用

5. 实际问题中的无约束优化模型

2000-11-11 4

实例1　产销量安排

某厂生产两个牌号的同一种产品，如何确定产量使利润最大

牌号	产量	成本	价格
甲	x1	q1	p1
乙	x2	q2	p2

假设A　产销平衡

假设B　***p*随*x*** **(**两种牌号**)**增加而减小，呈线性关系

$$p_1 = b_1 - a_{11}x_1 - a_{12}x_2,\ b_1, a_{11}, a_{12} > 0,\ a_{11} > a_{12}$$

$$p_2 = b_2 - a_{21}x_1 - a_{22}x_2,\ b_2, a_{21}, a_{22} > 0,\ a_{22} > a_{21}$$

2000-11-11　　5

实例1　产销量安排

假设C　***q*随*x*** **(**本牌号**)**增加而减小，呈负指数关系

$$q_1 = r_1 e^{-\lambda_1 x_1} + c_1,\ r_1, \lambda_1, c_1 > 0$$

$$q_2 = r_2 e^{-\lambda_2 x_2} + c_2,\ r_2, \lambda_2, c_2 > 0$$

目标　利润最大

$$\max_{x_1, x_2} z(x_1, x_2) = (p_1 - q_1)x_1 + (p_2 - q_2)x_2$$

2000-11-11　　6

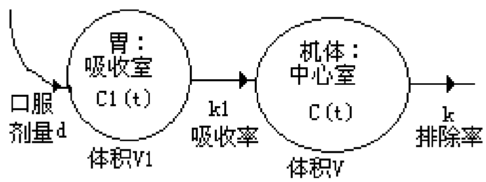
实例2 药物的吸收与排除

问题 一室(中心室)模型口服给药方式下的血药浓度**c(t)**

假设 药物经吸收室进入中心室。药物从吸收室向中心室的转移率与吸收室血药浓度成正比；中心室的排除率与中心室血药浓度成正比。

建模 $\dot{c}_1(t) = -k_1 c_1$

$$V\dot{c}(t) = -kVc + k_1 V_1 c_1$$



$$\Rightarrow \begin{cases} \dot{c}_1(t) = -k_1 c_1 \\ \dot{c}(t) = -kc + k_1 c_1 V_1 / V \end{cases}$$

$c_1(0) = d/V_1,\ c(0) = 0$ (t=0, 口服剂量d)

模型求解

$$\dot{c}_1(t) = -k_1 c_1$$
$$\dot{c}(t) = -kc + k_1 c_1 V_1 / V$$
$$c_1(0) = d/V_1,\ c(0) = 0$$

$$c_1(t) = \frac{d}{V_1} e^{-k_1 t}$$

$$c(t) = \frac{d}{V} \frac{k_1}{k_1 - k}(e^{-kt} - e^{-k_1 t})$$

参数估计 用测试分析确定$c(t)$中的参数k, k_1, V

今测得一组数据 (t_i, c_i), i=1,…n

t_i	0.083	0.167	0.25	0.50	0.75	1.0	1.5
c_i	□□□□	□□□□	□□□□	□□□□	□□□□	□□□□	□□□□
t_i	2.25	3.0	4.0	6.0	8.0	10.0	12.0
c_i	□□□□	□□□□	□□□□	□□□	□□□	□□□	□□□

参数估计

$$c(t)=\frac{d}{V}\frac{k_1}{k_1-k}(e^{-kt}-e^{-k_1 t})$$

用最小二乘法求参数k, k_1, V（已知d ），使理论值$c(t_i)$与实测值c_i的误差平方和最小.

$$R(k,k_1,V)=\sum_{i=1}^{n}[c(t_i)-c_i]^2=\sum_{i=1}^{n}[\frac{d}{V}\frac{k_1}{k_1-k}(e^{-kt_i}-e^{-k_1 t_i})-c_i]^2$$

非线性最小二乘问题, 无约束优化.

约束： $\boldsymbol{k, k_1, V>0}$?

2000-11-11 9

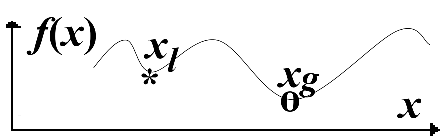
无 约 束 优 化 的 提 法

给定一个函数 $\boldsymbol{f(x)}$, 寻找 $\boldsymbol{x^*}$ 使得 $\boldsymbol{f(x^*)}$最小，即

$\underset{x}{Min}\, f(x)$ 其中 $x=(x_1,x_2,\cdots,x_n)^T\in\Re^n$

最 优 解 的 分 类 和 条 件

局部最优解



全局最优解

必要条件 $\nabla f(x^*)=(f_{x_1},\cdots,f_{x_n})^T=0$

充分条件 $\nabla f(x^*)=0, \nabla^2 f(x^*)>0$

$$\nabla^2 f=\left[\frac{\partial^2 f}{\partial x_i\partial x_j}\right]_{n\times n}$$

Hessian阵

2000-11-11 10

求解无约束优化的基本思路

基本思想　在 $\Re^n$ 中某一点，确定一个搜索方向及沿该方向的移动步长，得到使目标函数下降的新的点

迭代步骤

Step 1 初始化：初始点$\boldsymbol{x}^0$，终止准则等

Step 2 迭代改进：方向$\boldsymbol{d}^k$，步长α^k

$$x^{k+1} = x^k + \alpha^k d^k \qquad f(x^{k+1}) < f(x^k)$$

Step 3 终止检验：得到近优解或$\boldsymbol{k}$+1⇒$\boldsymbol{k}$转2

选择$\boldsymbol{d}^k$,α^k使$\boldsymbol{f}$下降更快 ⇒ 不同算法

2000-11-11　11

无约束优化的基本方法(搜索方向的选择)

1 最速下降法（梯度法）

暂不考虑搜索步长，可设α^k=1

将 $f(x^{k+1})$ 在 x^k 点作泰勒展开，只保留一阶项，有

$$f(x^{k+1}) = f(x^k + d^k) = f(x^k) + \nabla f^T(x^k) d^k$$

下降方向　$\nabla f^T(x^k) d^k < 0$

最速下降方向　$d^k = -\nabla f(x^k)$　（负梯度方向）

迭代改进格式　$x^{k+1} = x^k - \nabla f(x^k)$

算法特点　初始阶段改进较快，最优解附近改进较慢

2000-11-11　12

2 Newton方法

将$f(x^{k+1})$在x^k点作泰勒展开至二阶项，用d替代d^k

$$f(x^{k+1}) = f(x^k + d) = f(x^k) + \nabla f^T(x^k)d + \frac{1}{2}d^T\nabla^2 f(x^k)d$$

求d使$f(x^{k+1})$极小$\Rightarrow$右端对d导数为0 $\Rightarrow \nabla f(x^k)+\nabla^2 f(x^k)d=0$

牛顿方程 $\nabla^2 f(x^k)d = -\nabla f(x^k)$

牛顿方向 $d^k = -(\nabla^2 f(x^k))^{-1}\nabla f(x^k)$

迭代格式 $x^{k+1} = x^k - (\nabla^2 f(x^k))^{-1}\nabla f(x^k)$

特点 局部2阶收敛;需计算Hessian阵,它可能病态或不正定

比较 解$F(x)=0$的牛顿法 $x^{k+1} = x^k - [F'(x^k)]^{-1}F(x^k)$

$F(x) \Leftrightarrow \nabla f(x)$

2000-11-11 13

3 拟Newton方法

目的 不计算Hessian阵，克服病态、不正定、计算复杂等缺陷，同时保持收敛较快的优点

思路 回顾解方程组 F(x)=0的拟牛顿法

$x^{k+1} = x^k - [F'(x^k)]^{-1}F(x^k)$ $\Rightarrow$ $x^{k+1} = x^k - (A^k)^{-1}F(x^k)$

使A^k满足 $A^k(x^k - x^{k-1}) = F(x^k) - F(x^{k-1})$

用迭代方法$A^k = A^{k-1} + \Delta A^{k-1}$ 计算A^k

优化问题 $\underset{x}{Min}\ f(x)$ $\nabla f(x)$相当 $F(x)$

$\nabla^2 f(x)$相当$F'(x)$, $\nabla^2 f$不一定正定，构造正定阵G代替$\nabla^2 f$

2000-11-11 14

无约束优化(搜索方向的选择) 3 拟Newton方法

设在第k步, G^k已得到, $H^k=(G^k)^{-1}$,可计算

$$x^{k+1} = x^k - H^k \nabla f(x^k)$$

记 $\Delta x^k = x^{k+1} - x^k$, $\Delta f^k = \nabla f(x^{k+1}) - \nabla f(x^k)$

按照拟牛顿条件:

$G^{k+1}\Delta x^k = \Delta f^k$ 或 $\Delta x^k = H^{k+1}\Delta f^k$

构造 迭代公式$G^{k+1} = G^k + \Delta G^k$ 或$H^{k+1} = H^k + \Delta H^k$

于是有 $x^{k+2} = x^{k+1} - H^{k+1}\nabla f(x^{k+1})$

2000-11-11 15

无约束优化(搜索方向的选择) 3 拟Newton方法

3.1 Davidon-Fletcher-Powell(DFP)公式

$$\Delta H^k = \frac{\Delta x^k (\Delta x^k)^T}{(\Delta x^k)^T \Delta f^k} - \frac{H^k \Delta f^k (\Delta f^k)^T H^k}{(\Delta f^k)^T H^k \Delta f^k}$$

$$\Delta G^k = \left(1 + \frac{(\Delta x^k)^T G^k \Delta x^k}{(\Delta x^k)^T \Delta f^k}\right) \frac{\Delta f^k (\Delta f^k)^T}{(\Delta x^k)^T \Delta f^k} - \frac{\Delta f^k (\Delta x^k)^T G^k + G^k \Delta x^k (\Delta f^k)^T}{(\Delta x^k)^T \Delta f^k}$$

特点

若迭代点处梯度非零，则矩阵**H**^{k}对称正定，并且具有二次终止性。

2000-11-11 16

无约束优化(搜索方向的选择) 3 拟Newton方法

3.2 Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno(BFGS)公式

$$\Delta G^k = \frac{\Delta f^k (\Delta f^k)^T}{(\Delta f^k)^T \Delta x^k} - \frac{G^k \Delta x^k (\Delta x^k)^T G^k}{(\Delta x^k)^T G^k \Delta x^k}$$

$$\Delta H^k = \left(1 + \frac{(\Delta f^k)^T H^k \Delta f^k}{(\Delta x^k)^T \Delta f^k}\right) \frac{\Delta x^k (\Delta x^k)^T}{(\Delta x^k)^T \Delta f^k} - \frac{\Delta x^k (\Delta f^k)^T H^k + H^k \Delta f^k (\Delta x^k)^T}{(\Delta x^k)^T \Delta f^k}$$

特点 若$(\Delta f^k)^T \Delta x_k > 0$, 则$H^k$对称正定，且迭代2阶收敛

- **DFP与BFGS 互为对偶：** $\Delta x^k, \Delta f^k$互换, $\Delta G^k, \Delta H^k$互换

2000-11-11 17

无约束优化的基本方法(搜索步长的确定)

4 线性搜索确定步长方法

问题 给定x^k和方向d^k, 确定步长α^k, 使得

$$\min_{\alpha} f(x^k + \alpha d^k)$$ ~一维优化问题

$$\left.\frac{df}{d\alpha}\right|_{\alpha^k} = 0 \quad \Rightarrow \quad (d^k)^T \nabla f(x^k + \alpha^k d^k) = 0$$

优化算法 黄金分割(**0.618**)法、**Fibonacci**法、**Newton**切线法、割线法、**2**次或**3**次插值法等

2000-11-11 18

无约束优化的基本方法

5 非线性最小二乘拟合方法

问题　给定(t_i, y_i), i=1,…n, 拟合一个函数$y=f(t, x)$，其中x为待定的参数向量, f对x非线性。

记误差 $r_i(x) = y_i - f(t_i, x)$ $r(x) = (r_1(x), \cdots r_n(x))^T$

优化模型 $$\min_x R(x) = r^T(x) r(x)$$

根据目标函数是 $r(x)$ 的二次函数的特点
构造简单算法

2000-11-11　　19

无约束优化(非线性最小二乘拟合) $R(x) = r^T(x) r(x)$

记 $r(x)$ 的雅各比阵为 $J(x) = (\partial r_i / \partial x_j)_{n\times m}$

$$\nabla R = 2J(x)^T r(x) \qquad \nabla^2 R = 2J(x)^T J(x) + 2S$$

$$S = \sum_{i=1}^{n} r_i(x) \nabla^2 r_i(x) \qquad \nabla^2 r_i(x) = (\partial^2 r_i / \partial x_k \partial x_l)_{m\times m}$$

讨论
- 牛顿法要计算**Hessian**矩阵，其中**S**计算量大。
- 若f对x线性, 则化为线性最小二乘拟合,此时**S=0**

特定算法考虑如何忽略或近似矩阵**S**。

2000-11-11　　20

无约束优化(非线性最小二乘拟合)

5.1 Gauss-Newton算法：忽略矩阵S

$\nabla R = 2J(x)^T r(x)$　　$\nabla^2 R = 2J(x)^T J(x)$

牛顿方程　$\nabla^2 f(x^k)d = -\nabla f(x^k)$

f用R代替，下降方向d^k满足

$$J(x^k)^T J(x^k)d^k = -J(x^k)r(x^k)$$

G-N算法　收敛性依赖 f 对 x 的线性程度，及偏差r的大小

无约束优化(非线性最小二乘拟合)

5.2 Levenbery-Marquardt算法：G-N算法修正

$$J(x^k)^T J(x^k)d^k = -J(x^k)r(x^k)$$

防止 J^TJ 出现病态

$$(J(x^k)^T J(x^k) + \alpha^k I)d^k = -J(x^k)r(x^k)$$

其中$\alpha^k>0$为修正参数.

L-M算法　d^k位于牛顿方向(α^k很小)和负梯度方向(α^k很大)之间

优化工具箱 (matlab\toolbox\optim)

无约束优化

模型: $\underset{x}{Min}\ f(x), x \in R^n$

1) 基本程序: □□□□□□□□□□□□□□□□□□□□

输入: □□□□□□□□□□□□的□文件名， □**0** ~初始点，

输出: □ ~最优解

例 □□□求解□ $\min \frac{x^2}{a}+\frac{y^2}{b}, \quad a=b=2$

examp071.m

□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□
□□□□□□□□□
□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□

□□□□□□□□□□
□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□

□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□

2000-11-11 23

无约束优化

模型: $\underset{x}{Min}\ f(x), x \in R^n$

2) 提高精度，观察中间结果，给出迭代次数和最优值

□□□

输入: □□□□□□□□□□（缺省值） □无中间结果输出

□□□□□□□□□□□□中间结果输出

□□□□□□控制参数

□□□□□□□□□□设置最优解□的精度

□□□□□□□□□□设置最优值□的精度

输出: □□□□□□□□□□□最优值□

□□□□□□□□□□迭代次数

例 □□ $\min \frac{x_1^2}{a}+\frac{x_2^2}{b}, \quad a=10, b=1$

examp072.m

2 24

无约束优化

模型: $\underset{x}{Min}\ f(x), x \in R^n$

3) 算法选择: □□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□

输入: □□□□□□□□□（缺省值） □□□□□公式

□□□□□□□□□□□□□□公式

□□□□□□□□□□□最速下降法

□□□□□□□□□（缺省值） ~混合**2, 3**次多项式插值

□□□□□□□□□□□□**3**次多项式插值

□□□□□□□□搜索方向

□□□□□□□□□搜索步长

□□□□□□□□□□□□□□

2000-11-11 25

无约束优化

模型: $\underset{x}{Min}\ f(x), x \in R^n$

例3. $\min\ f(x,y) = 100(y - x^2)^2 + (1-x)^2$

精确解: $x=y=1$, $f(x,y)=0$

计算结果

examp073.m

方向	步长	最优解x	最优值f	n
BFGS	2,3次	(9.9997e-001 9.9994e-001)	1.0944e-009	14
DFP	2,3次	(9.9997e-001 9.9994e-001)	2.1173e-009	1000
GRAD	2,3次	(-6.4113e-001 4.2250e-001)	2.7064e+000	1000
BFGS	3次	(1.0000e+000 9.9999e-001)	5.9567e-010	226
DFP	3次	(5.9547e-001 3.4591e-001)	1.7117e-001	220

2000-11-11 26

无约束优化

模型: $\underset{x}{Min}\ f(x), x \in R^n$

4) 采用分析梯度:

□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□

□□□□□□□□□$\nabla f(x)$ 的□文件名

例4. $\min\ f(x,y) = 100(y-x^2)^2 + (1-x)^2$

算出 $\nabla f = \begin{bmatrix} -400x(y-x^2)-2(1-x) \\ 200(y-x^2) \end{bmatrix}$

examp074.m

5）其他: 用□□□□□□□□□输入最大迭代次数,（缺省值□表示□□□□□□为变量个数 ）。

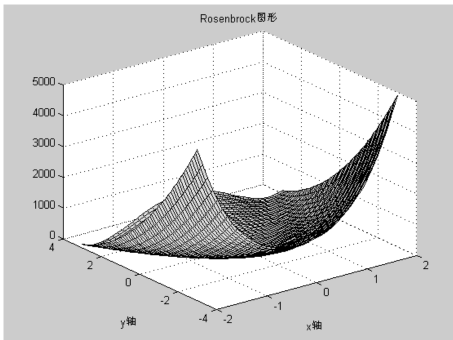
计算结果

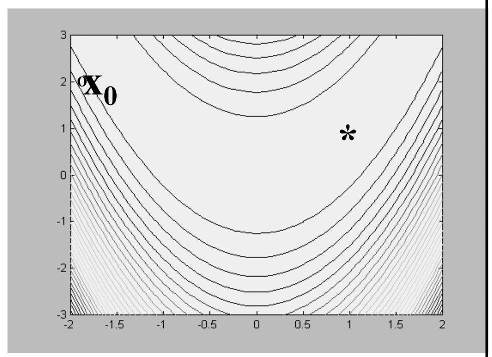
方向	步长	最优解x	最优值f	n
BFGS	2,3次	(1.0000e+000 1.0000e+000)	6.3209e-011	54
DFP	2,3次	(3.7903e-001 1.3278e-001)	3.9744e-001	72
BFGS	3次	(1.0000e+000 1.0000e+000)	8.0378e-015	26
DFP	3次	(1.0001e+000 1.0003e+000)	2.2499e-008	25

与不用分析梯度的结果比较

方向	步长	最优解x	最优值f	n
BFGS	2,3次	(9.9997e-001 9.9994e-001)	1.0944e-009	14
DFP	2,3次	(9.9997e-001 9.9994e-001)	2.1173e-009	1000
GRAD	2,3次	(-6.4113e-001 4.2250e-001)	2.7064e+000	1000
BFGS	3次	(1.0000e+000 9.9999e-001)	5.9567e-010	226
DFP	3次	(5.9547e-001 3.4591e-001)	1.7117e-001	220

$f(x,y)=100(y-x^2)^2+(1-x)^2$ 的图形





无约束优化 几个值得注意的问题

梯度函数：利用分析梯度可能改进算法的性能

算法选择：**foptions(6)=0**（缺省值）~ **BFGS**公式，**foptions(7)=0**（缺省值)~混合**2**，**3**次插值，一般较好。

高度非线性、不连续时可用程序 **fmins**

精度控制：用**foptions(2：3)**控制，对迭代次数有重大影响，应适当选择。

改变初始值 由一个初值出发通常得到局部最优解，如果函数存在多个局部最优，只有改变初值，对局部最优进行比较，才有可能得到全局最优解。

注: fminu将被fminunc取代； fmins将被fminsearch取代; foptions将被optimset，optimget取代（用法有变化）

优化工具箱 (matlab\toolbox\optim)

非线性最小二乘方法

$$\min_{x} R(x)=r^T(x)r(x)$$

$$r_i(x) = y_i - f(t_i, x)$$

$$r(x)=(r_1(x),\cdots r_n(x))^T$$

□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□
□□□□□□□□□□□□

输入的用法与□□□□□相同， 但注意：□□□□□□□□□□□□
的□文件名，　□□□□□□□□□ $\nabla r(x)$ 的□文件名

输出 □=□□□□（误差向量），□□□□□□**T**□□

注：**leastsq** 将被 **lsqnonlin**取代（用法有变化）；

数据拟合也可用**curvefit**（将被 **lsqcurvefit**取代）

优化实例　实例1 产销量安排

原问题

$$p_i = b_i - a_{i1}x_1 - a_{i2}x_2,\ b_i, a_{i1}, a_{i2} > 0,\ i = 1,2,$$

$$q_i = r_i e^{-\lambda_i x_i} + c_i,\ r_i, \lambda_i, c_i > 0,\ i = 1,2,$$

$$\max_{x_1,x_2} z(x_1,x_2) = (p_1 - q_1)x_1 + (p_2 - q_2)x_2$$

已知数据

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0.1 \\ 0.2 & 2 \end{pmatrix} \quad b = \begin{pmatrix} 100 \\ 280 \end{pmatrix}$$

$$r^T = (30 \quad 100),\quad \lambda^T = (0.015 \quad 0.02),\quad c^T = (20 \ \ 30)$$

$$\begin{aligned} \min \quad f(x) = &-(b_1 - a_{11}x_1 - a_{12}x_2 - r_1 e^{-\lambda_1 x_1} - c_1)x_1 \\ &-(b_2 - a_{21}x_1 - a_{22}x_2 - r_2 e^{-\lambda_2 x_2} - c_2)x_2 \end{aligned}$$

2000-11-11　32

优化实例　实例**1** 产销量安排

初始点的选择　忽略成本及价格中的 a_{12}, a_{21}　$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0.1 \\ 0.2 & 2 \end{pmatrix}$

问题简化为　$\min \quad f(x) = -(b_1 - a_{11}x_1)x_1 - (b_2 - a_{22}x_2)x_2$

其解为$x_1 = b_1 / 2a_{11} = 50$，$x_2 = b_2 / 2a_{22} = 70$

作为原问题的初始点

命令和最优解　**x=fminu('f(x)', x0)**　**shili071.m**

x = 23.9025　62.4977　y = 6.4135e+003

即甲产量为 23.9025，乙产量为 62.4977，最大利润为 6413.5

2000-11-11　33

优化实例　实例**2** 药物的吸收与排除

原问题　$c(t) = \dfrac{d}{V}\dfrac{k_1}{k_1 - k}(e^{-kt} - e^{-k_1 t})$　测得一组数据 (t_i, c_i), i=1,…n

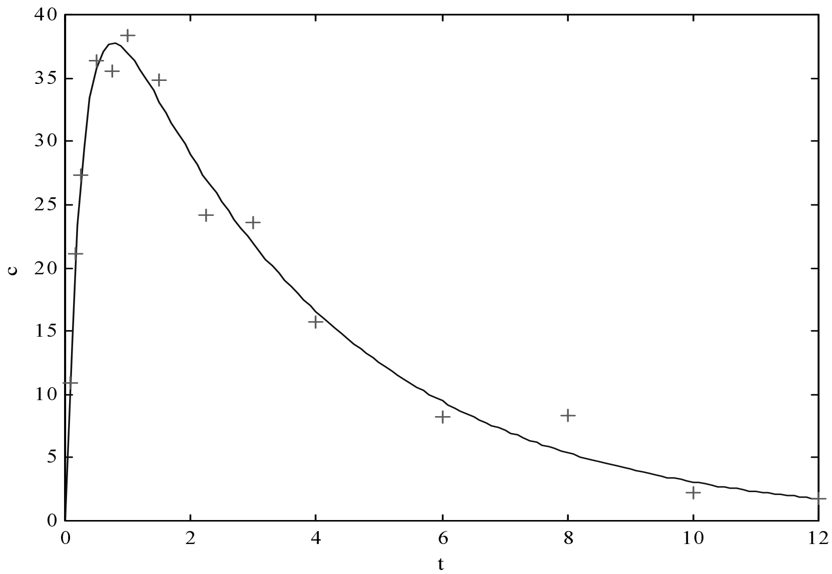
用非线性最小二乘拟合求参数k, k_1, V, 使误差R最小

$$R(k, k_1, V) = \sum_{i=1}^{n}[c(t_i) - c_i]^2 = \sum_{i=1}^{n}\left[\frac{d}{V}\frac{k_1}{k_1 - k}(e^{-kt_i} - e^{-k_1 t_i}) - c_i\right]^2$$

拟合结果为　$(k_1, k, d/V) = (3.6212, 0.2803, 46.8275)$

根据**d/V**和**d**可计算**V**　**shili072.m**

2000-11-11　34



血药浓度实验数据拟合图

无 约 束 优 化 实 验 内 容

实验目的

1．掌握 Matlab 优化工具包的基本用法，对不同算法进行初步分析、比较。

2．练习实际问题的非线性最小二乘拟合。

内容 2; 6(参看182页及198页内容)