

## Chap6 优化工具箱、模拟退火算法

MATLAB优化工具箱拥有以下4类求解器。

### 1· 最小值优化

这一组求解器用于求解目标函数在初始点 $\mathbf{x}_0$ 附近的最小值位置。适用于无约束优化、线性规划、二次规划和一般的非线性规划。

### 2· 多目标最小值优化

这一组求解器用于求解一组方程极大值中的极小值（**fminimax**），还可以求解一组方程低于某一特定值的定义域（**fgoalattain**）。

### 3· 方程求解器

这一组求解器用于求解一个标量或者向量非线性方程 $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ 在初始点 $\mathbf{x}_0$ 附近的解。也可以将方程求解当作是一种形式的优化，因为它等同于在 $\mathbf{x}_0$ 附近找到一个 $\mathbf{f}(\mathbf{x})$ 模的最小值。

### 4· 最小二乘（曲线拟合）求解器

这一组求解器用于求解一组平方和的最小值。这样的问题常在求一组数据的拟合模型的过程中出现。这组求解器适用于求问题非负解、边界限定或者线性约束解问题，还适用于根据数据拟合出参数化非线性模型。

为此，我们应根据自己的实际需要，根据实际的约束条件来选择相应的求解器。4种求解器所对应的所有优化函数如所示。

类 别	适用问题	公式描述	可用函数
极小值优化	标量最小值优化问题	$\min_x f(x)$ $1 < x < u$ (x 是标量)	fminbnd
	无约束最小值优化问题	$\min_x f(x)$	fminunc fminsearch
	线性规划	$\min_x f^T x$ $A \bullet x \leq b$ $Aeq \bullet x = beq$ $1 \leq x \leq u$	linprog
	二次规划	$\min_x \frac{1}{2} x^T H x + f^T x$ $A \bullet x \leq b$ $Aeq \bullet x = beq$ $1 \leq x \leq u$	quadprog
	约束最小值优化问题	$\min_x f(x)$ $c(x) \leq 0$ $ceq(x) = 0$ $A \bullet x \leq b$ $Aeq \bullet x = beq$ $1 \leq x \leq u$	fmincon
	半无限问题	$\min_x f(x)$ $K(x, w) \leq 0$ (对于所有的 w) $c(x) \leq 0$ $ceq(x) = 0$ $A \bullet x \leq b$ $Aeq \bullet x = beq$ $1 \leq x \leq u$	fseminf
	0-1 规划	$\min_x f^T x$ $A \bullet x \leq b$ $Aeq \bullet x = beq$  x 为二进制	bintprog

多目标最小值优化	目标达到	$\min_{x,y} \gamma$ 其中 : $F(x) - w\gamma \leq goal$ $c(x) \leq 0$ $ceq(x) = 0$ $A \cdot x \leq b$ $Aeq \cdot x = beq$ $l \leq x \leq u$	fgoalattain
	极小化极大	$\min_x \max_i F_i x$ 其中 : $c(x) < 0$ $ceq(x) = 0$ $A \cdot x < b$ $Aeq \cdot x = beq$ $l < x < u$	fminimax

方程求解	线性方程	$Cx=d$ N 个方程，N 个变量	$\backslash$ (矩阵左除)
	非线性方程(单变量)	$F(x)=0$	fzero
	非线性方程	$F(x)=0$ N 个方程，N 个变量	fsolve
最小二乘 ( 曲线拟合 ) 问题	线性最小二乘	$\min_x \ C \cdot x - d\ _2^2$ M 个方程，N 个变量	$\backslash$ (矩阵左除)
	非负线性最小二乘	$\min_x \ C \cdot x - d\ _2^2$ $x \geq 0$	lsqnonneg
	约束线性最小二乘	$\min_x \ C \cdot x - d\ _2^2$ $A \cdot x < b$ $Aeq \cdot x = beq$ $lb < x < ub$	lsqlin
	非线性最小二乘	$\min_x \ F(x)\ _2^2 = \min_x \sum_i F_i^2(x) \quad lb < x < ub$	lsqnonlin
	非线性曲线拟合	$\min_x \ F(x, xdata) - ydata\ _2^2 \quad lb < x < ub$	lsqcurvefit

## 极小值优化

标量最小值优化

求解单变量最优化问题的方法有多种，根据目标函数是否要求导，可以分为两类，即直接法和间接法。直接法不需要对目标函数进行求导，而间接法则需要用到目标函数的导数。

常用的一维直接法主要有消去法和近似法两种。

- 消去法：该法利用单峰函数具有的消去性质进行反复迭代，逐渐消去不包含极小点的区间，缩小搜索区间，直到搜索区间缩小到给定的允许精度为止。一种典型的消去法为黄金分割法（**Golden Section Search**）。黄金分割法的基本思想是在单峰区间内适当地插入两点，将区间分为3段，然后通过比较这两点函数值的大小来确定是删去最左段还是最右段，或同时删去左右两段，而保留中间段。重复该过程可以使区间无限缩小。插入点的位置放在区间的黄金分割点及其对称点上，所以该法称为黄金分割法。该法的优点是算法简单，效率较高，稳定性好。
- 多项式近似法：该法用于目标函数比较复杂的情况。此时搜索一个与它近似的函数代替目标函数，并用近似函数的极小点作为原函数极小点的近似。常用的近似函数为二次和三次多项式。二次插值法的计算速度比黄金分割法快，但是对于一些强烈扭曲或可能多峰的函数，该法的收敛速度会变得很慢，甚至失败。

间接法需要计算目标函数的导数，优点是计算速度很快。常见的间接法包括牛顿切线法、对分法、割线法和三次插值多项式近似法等。优化工具箱中用得较多的是三次插值法。如果函数的导数容易求得，一般来说应首先考虑使用三次插值法，因为它具有较高的效率。在只需要计算函数值的方法中，二次插值法是一个很好的方法，它的收敛速度较快，特别是在极小点所在区间较小时尤为如此。黄金分割法则是一种十分稳定的方法，并且计算简单。基于以上分析，**MATLAB**优化工具箱中使用得较多的方法是二次插值法、三次插值法、二次三次混合插值法和黄金分割法。

**MATLAB**优化工具箱提供了**fminbnd**函数来进行标量最小值问题的优化求解。

例：对边长为3m的正方形铁板，在4个角处剪去相等的正方形，以制成方形无盖水槽，问如何剪才能使水槽的容积最大？

$$V = (3 - 2x)^2 x$$

```
function f = myfun1(x)
```

```
f = -(3-2*x).^2 * x;
```

```
x = fminbnd(@myfun1,0,1.5)    %
```

```
x = 0.5000
```

```
% x = fminbnd(fun,x1,x2)：返回标量函数fun在条件x1 < x < x2下取最小值时自变量x的值
```

```
y = -myfun1(x)    % 调用myfun1函数来计算水槽的最大容积
```

```
y = 2.0000
```

无约束最小值优化

无约束最优化问题在实际应用中也比较常见，如工程中常见的参数反演问题。另外，许多有约束最优化问题也可以转化为无约束最优化问题进行求解。

求解无约束最优化问题的方法主要有两类，即直接搜索法（**Search method**）和梯度法（**Gradient method**）。

直接搜索法适用于目标函数高度非线性，没有导数或导数很难计算的情况。实际工程中很多问题都是非线性的，因此直接搜索法不失为一种有效的解决办法。常用的直接搜索法为单纯形法，此外还有**Hooke-Jeeves**搜索法、**Pavell**共轭方向法等，其缺点是收敛速度慢。

在函数的导数可求的情况下，梯度法是一种更优的方法，该法利用函数的梯度（一阶导数）和**Hessian**矩阵（二阶导数）构造算法，可以获更快的收敛速度。函数 $f(x)$ 的负梯度方向 $-\nabla f(x)$ 即反映了函数的最大下降方向。当搜索方向取为负梯度方向时，称为最速下降法。但当需要最小化的函数有一狭长的谷形值域时，该法的效率则很低。常见的梯度法有最速下降法、**Newton**法、**Marquart**法、共轭梯度法和拟牛顿法（**Quasi-Newton method**）等。在这些方法中，用得最多的是拟牛顿法。

在MATLAB中，有**fminunc**和**fminsearch**两个函数用来求解无约束最优化问题。

$$\min_x f(x)$$

例：求函数 $f(x) = 3x_1^2 + 2x_1x_2 + x_2^2$ 的最小值

**myfun2.m**

```
function f = myfun2(x)
```

```
f = 3*x(1)^2 + 2*x(1)*x(2) + x(2)^2; % 目标函数
```

```
x0 = [1,1]; % 初始点
[x,fval] = fminunc(@myfun2,x0)
```

```
Local minimum found.
```

```
Optimization completed because the size of the gradient is less than
the default value of the optimality tolerance.
```

```
<stopping criteria details>
```

```
x =
```

```
1.0e-06 *
```

```
0.2541 -0.2029
```

```
fval = 1.3173e-13
```

求**banana**方程的最小值

$$f(x) = 100(x_2 - x_1^2)^2 + (a - x_1)^2$$

在指定**a**的情况下求这个方程的最小值

```
a=3;
```

```
banana = @(x)100*(x(2)-x(1)^2)^2+(a-x(1))^2;
```

```
options = optimset('Display','iter','PlotFcns',@optimplotfval);
[x,fval,exitflag,output] = fminsearch(banana, [-1.2, 1], ...
    optimset('TolX',1e-8,'Display','iter','PlotFcns',@optimplotfval))
```

Iteration	Func-count	min f(x)	Procedure
0	1	37	
1	3	32.85	initial simplex
2	5	17.4818	expand
3	7	16.8178	reflect
4	9	16.8178	contract outside
5	11	16.6414	contract inside
6	13	16.4303	contract inside
7	15	16.3426	reflect
8	17	16.3426	contract inside
9	19	16.2643	expand
10	21	16.0773	expand
11	23	15.8084	expand
12	25	15.1878	expand
13	27	14.884	expand
14	29	13.9896	reflect
15	31	13.9896	contract inside
16	33	13.8989	expand
17	35	12.4126	expand
18	37	11.0063	expand
19	39	11.0063	contract inside
20	40	11.0063	reflect
21	42	10.8202	reflect
22	44	10.2503	reflect
23	45	10.2503	reflect
24	47	9.23987	reflect
25	49	9.23987	contract inside
26	51	9.1881	reflect
27	53	7.84817	expand
28	55	7.84817	contract inside
29	57	7.84817	contract outside
30	59	6.96312	expand
31	61	6.96312	contract outside
32	63	6.96312	contract outside
33	65	6.36776	expand
34	66	6.36776	reflect
35	68	5.58921	expand
36	70	5.58921	contract inside
37	72	5.04505	expand
38	74	5.04505	contract outside
39	76	4.63694	reflect
40	77	4.63694	reflect
41	79	4.30027	reflect
42	81	4.30027	contract inside
43	83	3.96936	expand
44	85	3.90401	reflect
45	87	3.23512	expand
46	89	3.23512	contract inside
47	90	3.23512	reflect
48	92	2.51489	expand
49	93	2.51489	reflect
50	95	2.51489	contract inside
51	97	2.51489	contract inside
52	98	2.51489	reflect
53	100	2.23345	expand
54	101	2.23345	reflect
55	103	1.99607	reflect
56	105	1.99607	contract inside
57	107	1.79673	expand

58	109	1.6899	reflect
59	111	1.54713	reflect
60	112	1.54713	reflect
61	114	1.17959	expand
62	116	1.17959	contract inside
63	117	1.17959	reflect
64	119	0.99258	reflect
65	120	0.99258	reflect
66	122	0.8552	reflect
67	124	0.8552	contract inside
68	126	0.7984	reflect
69	128	0.788623	reflect
70	130	0.68362	reflect
71	132	0.68362	contract inside
72	134	0.68362	contract inside
73	136	0.601175	expand
74	138	0.600973	reflect
75	140	0.53886	reflect
76	142	0.505426	expand
77	144	0.451138	reflect
78	146	0.363306	expand
79	147	0.363306	reflect
80	149	0.173319	expand
81	151	0.173319	contract inside
82	153	0.173319	contract inside
83	155	0.173319	contract inside
84	157	0.136211	reflect
85	159	0.136211	contract inside
86	161	0.130514	reflect
87	163	0.109441	reflect
88	164	0.109441	reflect
89	166	0.0903793	reflect
90	168	0.0903793	contract inside
91	170	0.0741684	expand
92	172	0.0592729	reflect
93	173	0.0592729	reflect
94	175	0.0396482	reflect
95	177	0.0396482	contract inside
96	179	0.0372114	reflect
97	181	0.026561	reflect
98	183	0.0263133	reflect
99	185	0.0185441	reflect
100	187	0.0152141	expand
101	189	0.010636	reflect
102	191	0.00150964	expand
103	193	0.00150964	contract inside
104	195	0.00150964	contract inside
105	197	0.00132331	reflect
106	199	0.000572752	contract inside
107	201	0.000193611	contract inside
108	203	0.000132029	contract inside
109	205	5.42594e-05	contract outside
110	207	1.1133e-05	contract inside
111	209	1.1133e-05	contract inside
112	211	1.1133e-05	contract inside
113	213	6.97874e-06	contract inside
114	215	2.60176e-06	contract inside
115	217	4.71736e-07	contract inside
116	219	4.71736e-07	contract outside
117	221	4.71736e-07	contract inside
118	223	2.13491e-07	reflect
119	225	8.99331e-08	contract inside
120	227	4.85962e-08	contract inside
121	229	3.15171e-08	contract inside
122	231	2.13444e-08	contract outside

123	233	7.08573e-09	contract inside
124	235	4.34071e-09	contract inside
125	236	4.34071e-09	reflect
126	238	3.64108e-10	contract inside
127	240	3.64108e-10	contract inside
128	242	3.64108e-10	contract inside
129	244	2.87881e-10	contract inside
130	246	2.16154e-10	contract inside
131	248	7.71999e-12	contract inside
132	250	7.71999e-12	contract outside
133	252	7.71999e-12	contract inside
134	253	7.71999e-12	reflect
135	255	7.71999e-12	contract outside
136	257	3.78416e-12	contract inside
137	259	1.92569e-12	contract inside
138	261	1.21641e-12	contract inside
139	263	1.14746e-12	reflect
140	265	1.99323e-13	contract inside
141	267	1.29675e-13	contract inside
142	269	1.29675e-13	contract inside
143	271	6.83674e-14	contract inside
144	273	2.34439e-14	contract inside
145	275	2.34422e-14	contract inside
146	277	1.79326e-14	reflect
147	279	1.0841e-15	contract inside
148	281	1.0841e-15	contract inside
149	283	1.0841e-15	contract inside
150	285	1.0841e-15	contract inside
151	287	9.91051e-16	contract inside
152	289	2.02396e-16	contract inside
153	291	8.59845e-17	contract inside
154	293	6.04367e-17	contract outside
155	295	1.56872e-17	contract inside
156	297	1.56872e-17	contract inside
157	299	1.30281e-17	contract inside
158	301	5.74483e-18	contract outside
159	303	2.40452e-18	contract inside

Optimization terminated:

the current x satisfies the termination criteria using OPTIONS.TolX of 1.000000e-08  
and F(X) satisfies the convergence criteria using OPTIONS.TolFun of 1.000000e-04

x =

3.0000 9.0000

fval = 2.4045e-18

exitflag = 1

output = struct with fields:

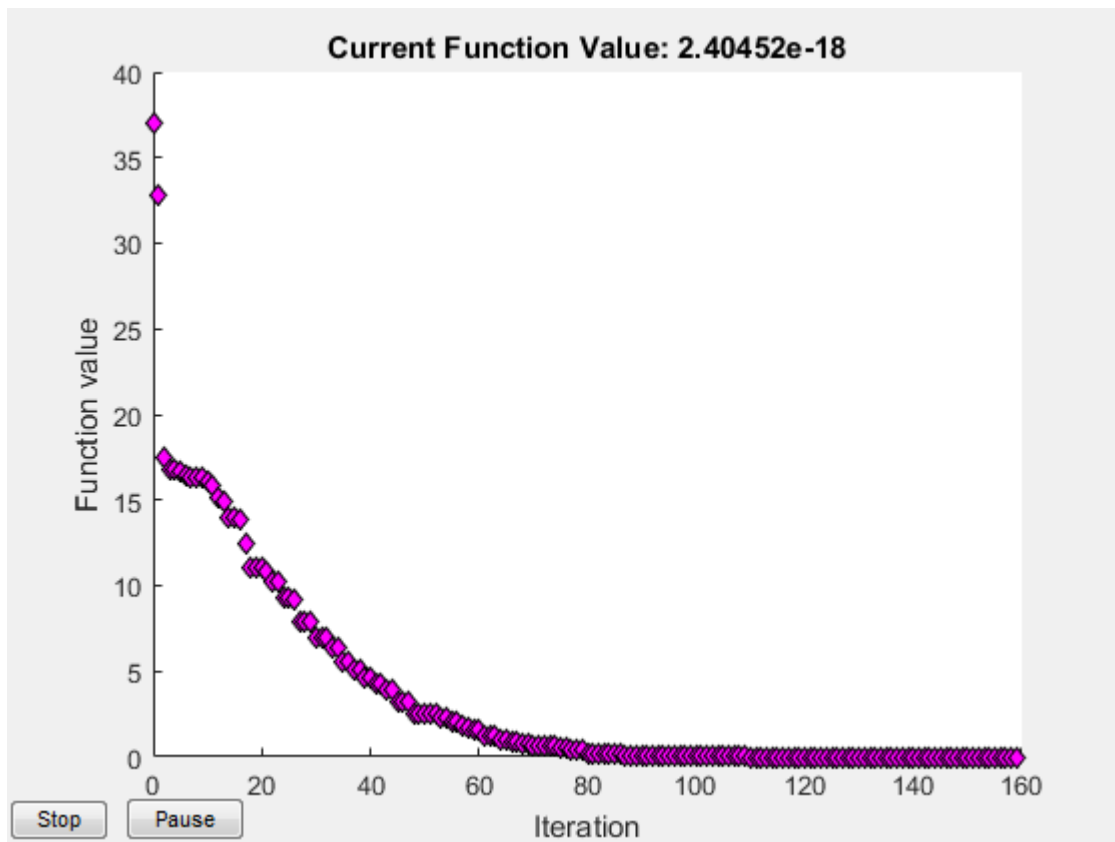
iterations: 159

funcCount: 303

algorithm: 'Nelder-Mead simplex direct search'

message: 'Optimization terminated: the current x satisfies the termination criteria using OPTIONS.TolX of 1.000000e-08 and F(X) satisfies the convergence criteria using OPTIONS.TolFun of 1.000000e-04'





`% optimset('TolX',1e-8)`用来设置算法终止误差

## 线性规划

线性规划是处理线性目标函数和线性约束的一种较为成熟的方法，目前已经广泛地应用于军事、经济、工业、农业、教育、商业和社会科学等许多方面。线性规划问题的标准形式是：

$$\begin{aligned} \min f(x) &= \sum_{j=1}^n c_j x_j \\ \text{s.t.} \quad &\begin{cases} \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j \leq b_i, i=1, 2, \dots, m \\ x_j \leq 0, j=1, 2, \dots, n \end{cases} \end{aligned}$$

写成矩阵形式为：

$$\begin{aligned} \max z &= CX \\ &\begin{cases} \sum_{j=1}^n p_j x_j = b \\ X \geq 0 \end{cases} \\ C &= (c_1, c_2, \dots, c_n) \end{aligned}$$

$$X = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \quad p_j = \begin{bmatrix} a_{1j} \\ a_{2j} \\ \vdots \\ a_{mj} \end{bmatrix} \quad (j=1,2,\dots,n) \quad b = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{bmatrix}$$

线性规划的标准形式要求目标函数最小化，约束条件取等式，变量非负。不符合这几个条件的线性模型要首先转换成标准形。线性规划的求解方法主要是单纯形法。

MATLAB优化工具箱提供了linprog函数用来进行线性规划的求解

例：求如下函数的最小值

$$f(x) = -5x_1 - 4x_2 - 6x_3$$

$$s.t. \begin{cases} x_1 - x_2 + x_3 \leq 20 \\ 3x_1 + 2x_2 + 4x_3 \leq 42 \\ 3x_1 + 2x_2 \leq 30 \\ 0 \leq x_1, 0 \leq x_2, 0 \leq x_3 \end{cases}$$

```
f = [-5; -4; -6];           % 用矩阵表示目标函数
A = [1  -1  1
      3   2  4
      3   2  0];           % 用矩阵形式表示约束条件系数
b = [20; 42; 30];          % 约束条件
lb = zeros(3,1);           % 下界约束
[x,fval,exitflag,output,lambda] = linprog(f,A,b,[],[],lb)
```

```
Optimal solution found.
x =
     0
    15.0000
     3.0000
fval = -78
exitflag = 1
output = struct with fields:
    iterations: 3
    constrviolation: 0
    message: 'Optimal solution found.'
    algorithm: 'dual-simplex'
    firstorderopt: 1.7764e-15
lambda = struct with fields:
    lower: [3x1 double]
    upper: [3x1 double]
    eqlin: []
    ineqlin: [3x1 double]
```

lambda.ineqlin

```
ans =
     0
    1.5000
    0.5000
```

```
lambda.lower
```

```
ans =  
    1.0000  
     0  
     0
```

**Lambda**域中向量里的非零元素可以反映出求解过程中的主动约束。在本例的结果中可以看出，第2个和第3个不等式约束（`lambda.ineqlin`）和第1个下界约束（`lambda.lower`）是主动约束。

## 二次规划

二次规划是非线性规划中一类特殊的数学规划问题，它的解是可以通过求解得到的。通常通过解其库恩-塔克条件（**K-T**条件），获取一个**K-T**条件的解，称为**K-T**对，其中与原问题的变量对应的部分称为**K-T**点。二次规划的一般形式为：

$$\begin{aligned} \min_x & \frac{1}{2}x^T Hx + f^T x \\ \text{s.t.} & Ax \leq b \end{aligned}$$

其中  $H \in \mathbb{R}^{n \times n}$  为对称矩阵。二次规划分为凸二次规划与非凸二次规划两者，前者的**K-T**点便是其全局极小值点，而后者的**K-T**点则可能连局部极小值点都不是。若它的目标函数是二次函数，则约束条件是线性的。求解二次规划的方法很多，较简便易行的是沃尔夫法，它是依据**K-T**条件，在线性规划单纯形法的基础上加以修正而得到的。此外还有莱姆基法、毕尔法、凯勒法等。**MATLAB**优化工具箱中提供了`quadprog`函数用来进行二次规划的求解。

例：求下面函数的最小值

$$\begin{aligned} f(x) &= \frac{1}{2}x_1^2 + x_2^2 - x_1x_2 - 2x_1 - 6x_2 \\ \text{s.t.} & \begin{cases} x_1 + x_2 \leq 2 \\ -x_1 + 2x_2 \leq 2 \\ 2x_1 + x_2 \leq 3 \\ 0 \leq x_1, 0 \leq x_2 \end{cases} \end{aligned}$$

首先要将方程写成矩阵形式

$$f(x) = \frac{1}{2}x^T Hx + f^T x$$

$$H = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 2 \end{bmatrix}, f = \begin{bmatrix} -2 \\ -6 \end{bmatrix}, x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$$

```
H = [1 -1; -1 2];  
f = [-2; -6];  
A = [1 1; -1 2; 2 1]; % 线性不等式约束  
b = [2; 2; 3]; % 线性不等式约束
```

```
lb = zeros(2,1);
[x,fval,exitflag,output,lambda] = quadprog(H,f,A,b,[],[],lb)
```

Minimum found that satisfies the constraints.

Optimization completed because the objective function is non-decreasing in feasible directions, to within the default value of the optimality tolerance, and constraints are satisfied to within the default value of the constraint tolerance.

<stopping criteria details>

x =

0.6667

1.3333

fval = -8.2222

exitflag = 1

output = struct with fields:

message: 'Minimum found that satisfies the constraints. Optimization completed because the objective fu

algorithm: 'interior-point-convex'

firstorderopt: 2.6645e-14

constrviolation: 0

iterations: 4

cgiterations: []

lambda = struct with fields:

ineqlin: [3×1 double]

eqlin: [0×1 double]

lower: [2×1 double]

upper: [2×1 double]

**exitflag = 1**表示计算的退出条件是收敛于x。**output**是包含着优化信息的结构数组。**lambda**返回了x处包含拉格朗日乘子的参数。

## 有约束最小值优化

在有约束最优化问题中，通常要将该问题转换为更简单的子问题，对这些子问题可以求解并作为迭代过程的基础。早期的方法通常是通过构造惩罚函数等，将有约束的最优化问题转换为无约束最优化问题进行求解。现在，这些方法已经被更有效的基于K-T方程解的方法所取代。K-T方程是有约束最优化问题求解的必要条件。

MATLAB优化工具箱提供了fmincon函数用来计算有约束的最小值优化。

例：求函数 $f(x) = -x_1x_2x_3$ 的最小值，搜索的起始值为 $x = [10;10;10]$ ，同时目标函数中的变量要服从以下约束条件：

$$0 \leq x_1 + 2x_2 + 2x_3 \leq 72$$

### myfun3.m

```
function f = myfun3(x)
```

```
f = -x(1) * x(2) * x(3);
```

约束条件改写

$$\begin{aligned} -x_1 - 2x_2 - 2x_3 &\leq 0 \\ x_1 + 2x_2 + 2x_3 &\leq 72 \end{aligned}$$

$$A = \begin{bmatrix} -1 & -2 & -2 \\ 1 & 2 & 2 \end{bmatrix}, b = \begin{bmatrix} 0 \\ 72 \end{bmatrix}$$

```
x0 = [10; 10; 10];    % 求解的起始点
A = [-1 -2 -2; 1 2 2];
b = [0; 72];
[x, fval] = fmincon(@myfun3, x0, A, b)
```

Local minimum found that satisfies the constraints.

Optimization completed because the objective function is non-decreasing in feasible directions, to within the default value of the optimality tolerance, and constraints are satisfied to within the default value of the constraint tolerance.

<stopping criteria details>

```
x =
    24.0000
    12.0000
    12.0000
fval = -3.4560e+03
```

**A\*x-b**    %对约束条件进行验证

```
ans =
   -72.0000
    -0.0000
```

另外两种极小值优化问题

半无限问题    **fsemintf**

0-1规划    **bintprog**

请查阅帮助文档或者其他参考书

## 多目标优化

前面介绍的最优化方法只有一个目标函数，是单目标最优化方法。但是，在许多实际工程问题中，往往希望多个指标都达到最优值，所以就有多个目标函数，这种问题称为多目标最优化问题。

多目标规划有许多解法，下面列出常用的几种。

- 化多为少法：将多目标问题化成只有1个或2个目标的问题，然后用简单的决策方法求解。最常用的是线性加权法和法。
- 分层序列法：将所有的目标按其重要程度依次排序，先求出第1个（最重要的）目标的最优解，然后在保证前一个目标最优解的前提下依次求下一个目标的最优解，一直求到最后一个目标为止。
- 直接求非劣解法：先求出一组非劣解，然后按事先确定好的评价标准从中找出一个满意的解。

- 目标规划法：当所有的目标函数和约束条件都是线性时，可以采用目标规划法，它是20世纪60年代初由查纳斯和库珀提出来的。此方法对每一个目标函数都事前给定一个期望值，然后在满足约束条件集合的情况下，找出使目标函数离期望值最近的解。
- 多属性效用法（MAUM）：各个目标分别用各自的效用函数表示，然后构成多目标综合效用函数，以此来评价各个可行方案的优劣。
- 层次分析法：由T.沙基于1980年提出来。这种方法是通过目标、约束条件、方案等的主观判断，对各种方案加以综合权衡比较，然后评定优劣。
- 重排次序法：把原来不好比较的非劣解，通过其他办法排出优劣次序。此外，还有多目标群决策和多目标模糊决策等方法。

针对多目标优化问题，MATLAB提供了fgoalattain和fminimax 函数用来进行求解。

例：

某工厂因生产需要欲采购一种原材料，市场上这种原材料有两个等级，甲级单价2元/千克，乙级单价1元/千克。要求所花总费用不超过200元，购得原材料总量不少于100千克，其中甲级原材料不少于50千克，问如何确定最好的采购方案。

设x1、x2分别为采购甲级和乙级原材料的数量（千克），要求总采购费用尽量少，总采购重量尽量多，采购甲级原材料尽量多。

myfun4.m

```
function f=myfun4(x)
```

```
f(1)=2*x(1)+ x(2);
```

```
f(2)=-x(1)- x(2);
```

```
f(3)=-x(1);
```

```
goal=[200 -100 -50];           % 要达到的目标
weight=[2040 -100 -50];        % 各个目标的权重
x0=[55 55];                    % 搜索的初始值
% 约束条件
A=[2 1;-1 -1;-1 0];
b=[200 -100 -50];
lb=zeros(2,1);
% 调用fgoalattain函数进行多目标优化
[x,fval,attainfactor,exitflag] =...
fgoalattain(@myfun4,x0,goal,weight,A,b,[],[],lb,[])
```

```
Local minimum possible. Constraints satisfied.
```

```
fgoalattain stopped because the size of the current search direction is less than
twice the default value of the step size tolerance and constraints are
satisfied to within the default value of the constraint tolerance.
```

```
<stopping criteria details>
```

```
x =
    50    50
fval =
```

```
150 -100 -50
attainfactor = 3.4101e-10
exitflag = 4
```

方程组求解

优化工具箱提供了3个方程求解的函数，其中，“\”算子可用于求解线性方程组Cx=d。当矩阵为n阶方阵时，采用高斯消元法进行求解；如果A不为方阵，则采用数值方法计算方程最小二乘意义上的解。fzero采用数值解法求解非线性方程，fsolve函数则采用非线性最小二乘算法求解非线性方程组。

例：求解下面方程组的根，其中包含两个未知数、两个方程。

$$\begin{aligned} 2x_1 - x_2 &= e^{-x_1} \\ -x_1 + 2x_2 &= e^{-x_2} \end{aligned}$$

方程组变换

$$\begin{aligned} 2x_1 - x_2 - e^{-x_1} &= 0 \\ -x_1 + 2x_2 - e^{-x_2} &= 0 \end{aligned}$$

myfun5.m

```
function F = myfun5(x)
F = [2*x(1) - x(2) - exp(-x(1));
     -x(1) + 2*x(2) - exp(-x(2))];
```

```
x0 = [-5; -5];
options=optimset('Display','iter');
[x,fval] = fsolve(@myfun5,x0,options)
```

% 猜测的搜索初始值  
% 输出显示选项设置  
% 调用fsolve命令

Iteration	Func-count	f(x)	Norm of step	First-order optimality	Trust-region radius
0	3	47071.2		2.29e+04	1
1	6	12003.4	1	5.75e+03	1
2	9	3147.02	1	1.47e+03	1
3	12	854.452	1	388	1
4	15	239.527	1	107	1
5	18	67.0412	1	30.8	1
6	21	16.7042	1	9.05	1
7	24	2.42788	1	2.26	1
8	27	0.032658	0.759511	0.206	2.5
9	30	7.03149e-06	0.111927	0.00294	2.5
10	33	3.29525e-13	0.00169132	6.36e-07	2.5

Equation solved.

fsolve completed because the vector of function values is near zero as measured by the default value of the function tolerance, and the problem appears regular as measured by the gradient.

```
<stopping criteria details>
x =
```

```

0.5671
0.5671
fval =
1.0e-06
-0.4059
-0.4059

```

## 最小二乘及数据拟合

最小二乘法是一种数学优化技术，它通过最小化误差的平方和找到一组数据的最佳函数匹配。最小二乘法通常用于曲线拟合。很多其他的优化问题也可以通过最小化能量或最大化熵用最小二乘形式表达。

MATLAB中提供了多个函数用来计算最小二乘问题，如\、lsqnonneg、lsqlin、lsqnonlin、lsqcurvefit等

求超定系统 $C \cdot x = d$ 的最小二乘解，约束条件为 $A \cdot x \leq b$ ， $lb \leq x \leq ub$ （具体的系数矩阵、边界条件如下所示）。

首先输入系数矩阵和上下边界。

```

C = [0.9501    0.7620    0.6153    0.4057
      0.2311    0.4564    0.7919    0.9354
      0.6068    0.0185    0.9218    0.9169
      0.4859    0.8214    0.7382    0.4102
      0.8912    0.4447    0.1762    0.8936];
d = [0.0578
      0.3528
      0.8131
      0.0098
      0.1388];
A = [0.2027    0.2721    0.7467    0.4659
      0.1987    0.1988    0.4450    0.4186
      0.6037    0.0152    0.9318    0.8462];
b = [0.5251
      0.2026
      0.6721];
lb = -0.1*ones(4,1);
ub = 2*ones(4,1);

```

然后调用约束最小二乘lsqlin函数：

```

[x,resnorm,residual,exitflag,output,lambda] = ...
    lsqlin(C,d,A,b,[],[],lb,ub);

```

Minimum found that satisfies the constraints.

Optimization completed because the objective function is non-decreasing in feasible directions, to within the default value of the optimality tolerance, and constraints are satisfied to within the default value of the constraint tolerance.

<stopping criteria details>

```

x,lambda.ineqlin,lambda.lower,lambda.upper % 查看计算的结果

```



```

x =
    -0.1000
    -0.1000
     0.2152
     0.3502
ans =
     0.0000
     0.2392
     0.0000
ans =
     0.0409
     0.2784
     0.0000
     0.0000
ans =
     0
     0
     0
     0

```

**lambda**结构数组中向量的非零元素可以说明解的主动约束条件。在本例中，第2个不等式约束和第1个、第2个下界边界约束是主动约束。

例：对下面的公式进行最小化优化。搜索的初始值为 $\mathbf{x} = [0.3, 0.4]$ 。

$$\sum_{k=1}^{10} \left( 2 + 2k - e^{kx_1} - e^{kx_2} \right)^2$$

**lsqnonlin**函数用下面的向量值函数代替，其中 $\mathbf{k} = 1:10$ （因为 **F** 包含 $\mathbf{k}$ 个部分）。

$$F_k(\mathbf{x}) = 2 + 2k - e^{kx_1} - e^{kx_2}$$

### myfun6.m

```
function F = myfun6(x)
```

```
k = 1:10;
```

```
F = 2 + 2*k-exp(k*x(1))-exp(k*x(2));
```

```
x0 = [0.3 0.4] % 初始值
```

```

x0 =
    0.3000    0.4000

```

```
[x,resnorm] = lsqnonlin(@myfun6,x0) % 调用优化命令
```

```
Local minimum possible.
```

```
lsqnonlin stopped because the size of the current step is less than
the default value of the step size tolerance.
```

```
<stopping criteria details>
```

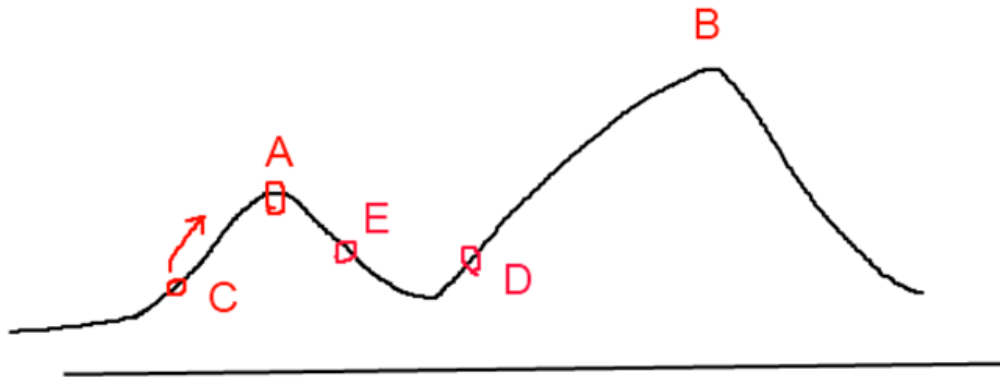
```

x =
    0.2578    0.2578
resnorm = 124.3622

```

## 模拟退火

模拟退火算法(Simulated Annealing, SA)的思想借鉴于固体的退火原理，当固体的温度很高的时候，内能比较大，固体的内部粒子处于快速无序运动，当温度慢慢降低的过程中，固体的内能减小，粒子的慢慢趋于有序，最终，当固体处于常温时，内能达到最小，此时，粒子最为稳定。模拟退火算法便是基于这样的原理设计而成。



(1)随机挑选一个单元 $k$ ，并给它一个随机的位移，求出系统因此而产生的能量变化 $\Delta E_k$ 。

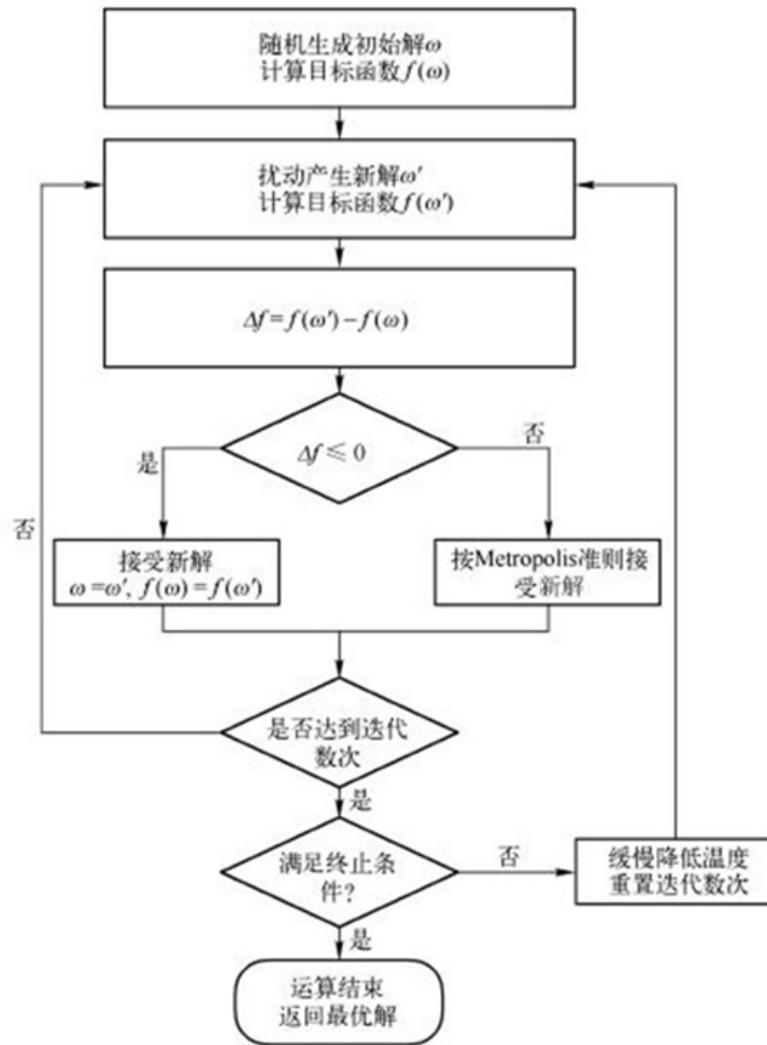
(2)若 $\Delta E_k \leq 0$ ，该位移可采纳，而变化后的系统状态可作为下次变化的起点；

若 $\Delta E_k > 0$ ，位移后的状态可采纳的概率为

$$\frac{1}{1 + \exp\left(\frac{\Delta}{\max(T)}\right)}$$

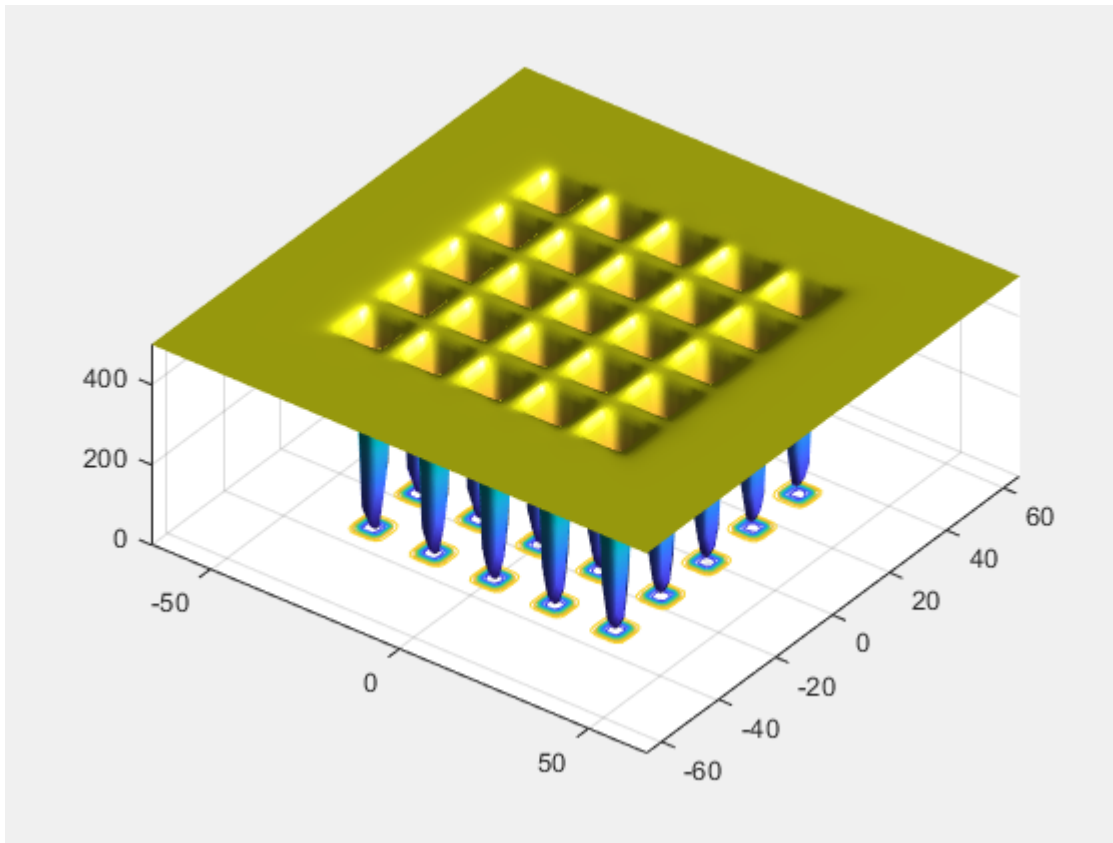
式中 $T$ 为温度，然后从 $(0,1)$ 区间均匀分布的随机数中挑选一个数 $R$ ，若 $R < P_k$ ，则将变化后的状态作为下次的起点；否则，将变化前的状态作为下次的起点。

(3)转第(1)步继续执行，知道达到平衡状态为止。



MATLAB 工具箱中自帶了模拟退火优化函数 `simulannealbnd`

```
dejong5fcn % 优化测试函数
```

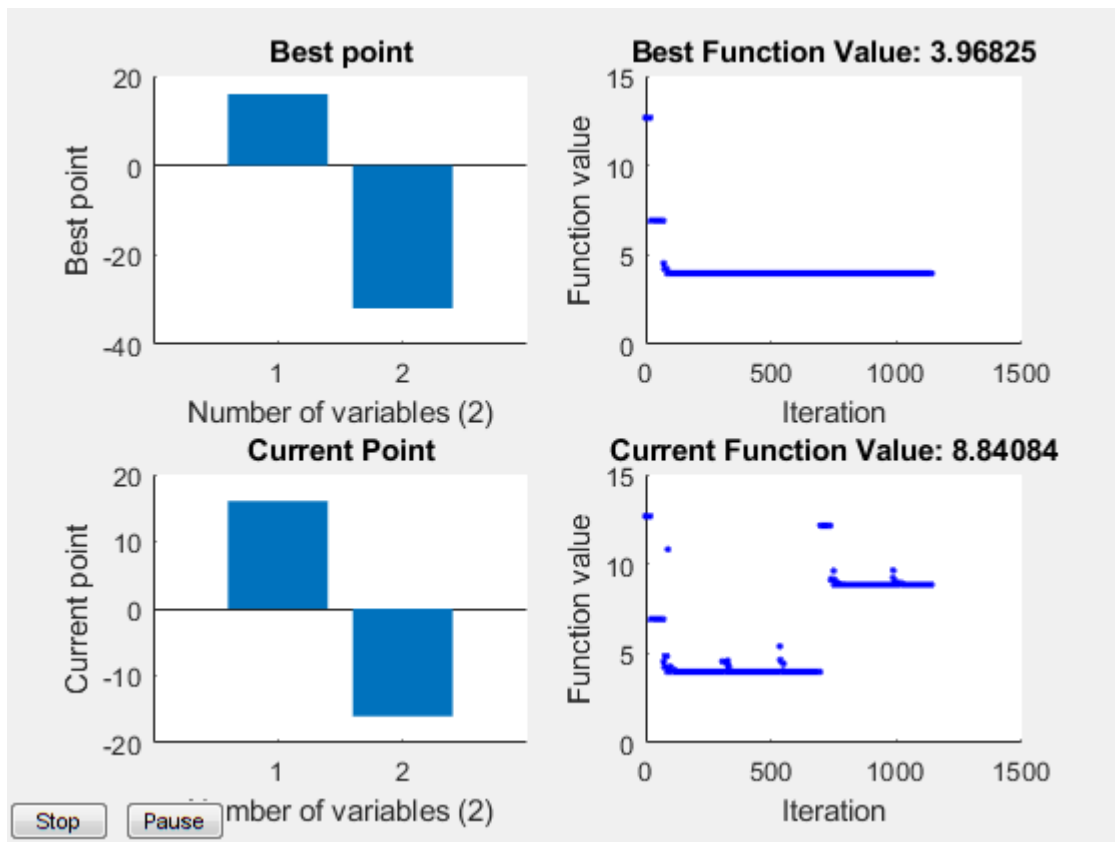


```
fun = @dejong5fcn;    % 目标函数
[x,fval] = simannealbnd(fun,[0 0])    % 目标函数、初始点
```

```
Optimization terminated: change in best function value less than options.FunctionTolerance.
x =
    -31.9976    -31.9919
fval = 0.9980
```

```
% 如果有绘图
options = saoptimset('PlotFcns',{@saplotbestx,@saplotbestf,@saplotx,@saplotf});
% 如果有上下限约束
x0 = [0,0];
lb = [-64,-64];
ub = [64,64];
x = simannealbnd(fun,x0,lb,ub,options)
```

```
Optimization terminated: change in best function value less than options.FunctionTolerance.
x =
    15.9889   -31.9616
```



求：

$$\min f(x) = (4 - 2.1x_1^2 + x_1^4/3)x_1^2 + x_1x_2 + (-4 + 4x_2^2)x_2^2;$$

写成函数形式

```
function y = simple_objective(x)
```

$$y = (4 - 2.1x(1)^2 + x(1)^4/3)x(1)^2 + x(1)x(2) + (-4 + 4x(2)^2)x(2)^2;$$

```
ObjectiveFunction = @simple_objective;
```

```
X0 = [0.5 0.5]; % 初始点
```

```
[x,fval,exitFlag,output] = simulannealbnd(ObjectiveFunction,X0)
```

Optimization terminated: change in best function value less than options.FunctionTolerance.

x =

```
-0.0898    0.7126
```

fval = -1.0316

exitFlag = 1

output = struct with fields:

```
iterations: 1483
```

```
funccount: 1494
```

```
message: 'Optimization terminated: change in best function value less than options.FunctionTolerance.'
```

```
rngstate: [1x1 struct]
```

```
problemtype: 'unconstrained'
```

```
temperature: [2x1 double]
totaltime: 0.7883
```

```
% 如果有上下限约束
```

```
lb = [-64 -64];
```

```
ub = [64 64];
```

```
[x,fval,exitFlag,output] = simannealbnd(ObjectiveFunction,X0,lb,ub);
```

```
Optimization terminated: change in best function value less than options.FunctionTolerance.
```

```
fprintf('The number of iterations was : %d\n', output.iterations);
```

```
The number of iterations was : 1258
```

```
fprintf('The number of function evaluations was : %d\n', output.funccount);
```

```
The number of function evaluations was : 1269
```

```
fprintf('The best function value found was : %g\n', fval);
```

```
The best function value found was : -1.03161
```

求：

$$\min f(x) = (a - b*x_1^2 + x_1^4/3)*x_1^2 + x_1*x_2 + (-c + c*x_2^2)*x_2^2;$$

写成函数形式

```
function y = parameterized_objective(x,a,b,c)
```

```
y = (a - b*x(1)^2 + x(1)^4/3)*x(1)^2 + x(1)*x(2) + (-c + c*x(2)^2)*x(2)^2;
```

```
a = 4; b = 2.1; c = 4; % define constant values
```

```
ObjectiveFunction = @(x) parameterized_objective(x,a,b,c);
```

```
X0 = [0.5 0.5];
```

```
[x,fval] = simannealbnd(ObjectiveFunction,X0)
```

```
Optimization terminated: change in best function value less than options.FunctionTolerance.
```

```
x =
```

```
0.0896 -0.7126
```

```
fval = -1.0316
```