

两个无约束优化的数值实验

刘红英

本报告描述了两个无约束问题及其相关的若干数值实验。

1. 参数估计问题

考虑 A, B, C 在等温批式反应器(isothermal batch reactor) 遵循的一阶反应[[2], p.17, 例 2.1], 即 $A \xrightarrow{k_1} B$, $A \xrightarrow{k_2} C$ 所发生的反应. 使用无量纲浓度 $a(t) = [A](t)/[A](0)$, $b(t) = [B](t)/[A](0)$, $c(t) = [C](t)/[A](0)$, 即用 A 的初始浓度 $[A](0)$ 进行规范化, 描述该反应的微分方程是:

$$\frac{da}{dt} = -(k_1 + k_2)a(t), \quad a(0) = 1, \quad (1a)$$

$$\frac{db}{dt} = k_1 a(t), \quad b(0) = 0, \quad (1b)$$

$$a(0) = a(t) + b(t) + c(t), \quad (1c)$$

这是一个线性常微分方程组问题, 其解可以写成如下形式:

$$a(t) = \exp(-(k_1 + k_2)t),$$

$$b(t) = \frac{k_1}{k_1 + k_2} (1 - \exp(-(k_1 + k_2)t)),$$

$$c(t) = \frac{k_2}{k_1 + k_2} (1 - \exp(-(k_1 + k_2)t)).$$

表 1 给出了对此系统测得的 10 组实验数据.

表 1 一阶并行反应的浓度数据

i	time, t_i	$\hat{a}(t_i)$	$\hat{b}(t_i)$	$\hat{c}(t_i)$
1	0.1	0.913	0.0478	0.0382
2	0.2	0.835	0.0915	0.0732
3	0.3	0.763	0.1314	0.1051
4	0.4	0.697	0.1679	0.1343
5	0.5	0.637	0.2013	0.1610
6	0.6	0.582	0.2318	0.1854
7	0.7	0.532	0.2596	0.2077
8	0.8	0.486	0.2851	0.2281
9	0.9	0.444	0.3084	0.2467
10	1.0	0.406	0.3296	0.2637

这里定义动力学参数作为变量 $\mathbf{x}^T = [k_1, k_2]$, 将余量平方和

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{10} [(\hat{a}(t_i) - a(t_i))^2 + (\hat{b}(t_i) - b(t_i))^2 + (\hat{c}(t_i) - c(t_i))^2] \quad (2)$$

作为目标函数, 这里的求和范围是规范化后的时间 t_i 处得到的浓度测量值

\hat{a} , \hat{b} , 和 \hat{c} .

请完成以下问题:

- 1) 给出目标函数在区域 $[0,1.2] \times [0,1]$ 内的等值线. 由图估计目标函数的最小值和最小值点. 这个最小值点是动力学模型(1)关于实验数据在二范数误差意义下的最佳拟合.
- 2) 分别以 $(0.5, 0.4)$ 和 $(2, 2)$ 为初始点, 利用基本牛顿法[[1],p.103]求解参数估计问题(2), 画出迭代点的轨迹;
- 3) 对初始点 $(2, 2)$, 利用带线搜索的牛顿法求解参数估计问题(2), 画出迭代点的轨迹. 这里步长用回溯 Armijo 线搜索[[1],p. 89, 算法 4.3.1]确定. 请说明线搜索中的参数设置, 并统计每次迭代中为了确定步长而需要回溯的次数.
- 4) 请描述 2) 和 3) 中出现的结果和现象, 并进行分析, 给出可能的解释.

2. 无约束优化问题

问题描述如下

$$\text{minimize}_{x \in \mathbb{R}^2} f(x) = \alpha \exp(-\beta) \quad (3.a)$$

$$\text{with } u = x_1 - 0.8, \quad (3.b)$$

$$v = x_2 - \left(a_1 + a_2 u^2 (1 - u)^{\frac{1}{2}} - a_3 u \right), \quad (3.c)$$

$$\alpha = -b_1 + b_2 u^2 (1 + u)^{\frac{1}{2}} + b_3 u, \quad (3.d)$$

$$\beta = c_1 v^2 (1 - c_2 v) / (1 + c_3 u^2), \quad (3.e)$$

其中 $\mathbf{a}^T = [0.3, 0.6, 0.2]$, $\mathbf{b}^T = [5, 26, 3]$, $\mathbf{c}^T = [40, 1, 10]$. 该问题的解 $\mathbf{x}^* = [0.7395, 0.3144]^T$, 最优值 $f^* = -5.0893$.

请回答以下问题:

- 1) 计算这个点处的梯度和 Hessian 阵, 并说明其是否满足最优性条件.
- 2) 画出该问题在单位正方形内的等值线. 请问这个函数是凸函数吗? (凸函数的水平集是凸集, 见[1]中 p.84, 引理 4.1.1). 画出这个函数 Hessian 阵的最小特征值的等值线. 请标出正负特征值区域.

这里为了观察牛顿法的性能, 给出了两个初始点, 一个是靠近解的 $(0.8, 0.3)$, 一个是远离解的 $(1, 0.5)$. 针对这两个初始点, 以梯度二范数小于 1×10^{-8} 为终止条件, 完成以下问题:

- 1) 给出基本牛顿法[[1],p.103]得到的迭代序列, 并画出迭代轨迹图. 描述所得结果, 并给出解释.
- 2) 给出信赖域型牛顿法[[1],p.137, 算法 6.1.1]得到的迭代序列, 并画出迭代轨迹图. 描述所得结果, 并给出解释. 这里的信赖域子问题(目标函数为二次函数, 约束为球约束)可以使用 Matlab 中的 `fmincon.m` 求解, 也可以使用 Steihaug 共轭梯度法求解[[1],p.148, 算法 6.3.2]. 请给出自己算法中的参数设置.
- 3) 给出 BFGS 拟牛顿法[[1],p.119, 算法 5.3.1]得到的迭代序列, 并画出迭代轨迹图. 描述所得结果, 并给出解释. 可以使用回溯 Armijo 线搜索[[1],p.

89, 算法 4.3.1]代替 BFGS 中需要的 Wolfe 线搜索来确定步长. 请给出自己算法中的参数设置.

4) 比较以上数值结果, 完成以下表格:

表 1 求解问题(3)的各种方法的数值结果比较

初始点 方法	(0.8, 0.3)			(1, 0.5)		
	k	l	m	k	l	m
基本牛顿法						
信赖域法						
拟牛顿法						

其中 k 表示迭代次数, l 表示计算目标值的次数, m 表示计算梯度的次数.

3. 小结

描述两到三个你遇到的问题及解决办法, 描述自己对无约束最优化算法的理解. 其他任何你觉得有意义的内容.

参考文献

- [1] 刘红英, 夏勇, 周水生. 数学规划基础[M]. 北京:北京航空航天大学出版社,2012.
- [2] Lorenz T. Biegler, Nonlinear programming: concepts, algorithms, and applications to Chemical Processes [M]. Society for industrial and applied mathematics and the mathematical optimization society, Philadelphia, 2010.