最优化模型

Optimization Modelling

主讲人： 薛 毅 教授

北京工业大学应用数理学院

运筹学学科部主任

xueyi@bjut.edu.cn

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

第五章

最优化模型

第一节 最优化问题的数学模型

第二节 一维搜索

第三节 求解无约束问题的下降算法

第四节 惩罚函数法

第五节 用LINGO软件包求解最优化问题

第六节 实例分析— 飞行管理问题

1 最优化问题的数学模型

1.1. 无约束最优化问题

我们先用一个例子引出无约束最优化问题的数学模型.

例5.1.1 曲线拟合问题

设有两个物理量ξ和η，根据某一物理定律得知它们满足如下关系:

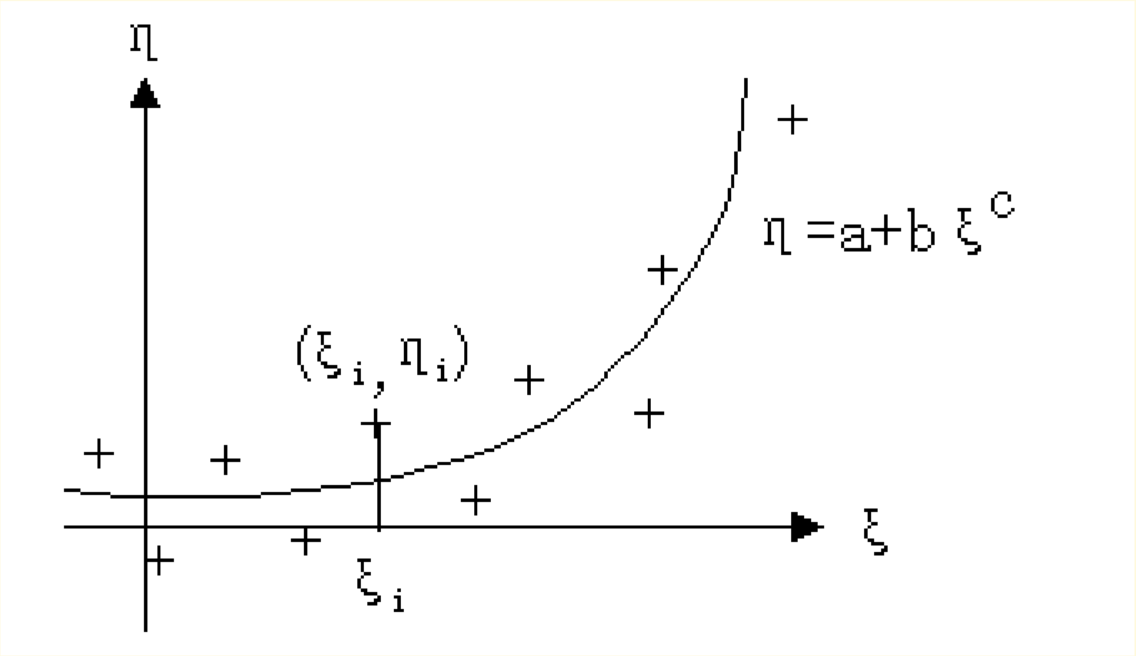
$$\eta = a + b\xi^c,$$

其中a, b, c是三个常数, 在不同情况下取不同的值。现由实验得到一组数据

$$(\xi_1, \eta_1),\ (\xi_2, \eta_2),\ \cdots,\ (\xi_m, \eta_m),$$

试选择a, b, c的值，使曲线$\eta = a + b\xi^c$尽可能靠近所有的实验点$(\xi_i, \eta_i), i = 1, 2, \cdots, m$。

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题



这个问题可用最小二乘原理求解，即选择a, b, c的一组值，使得偏差的平方和

$$\delta(a,b,c)=\sum_{i=1}^{m}(a+b\xi_i^c-\eta_i)^2$$

达到最小。换句话说，就是求三个变量的函数$\delta(a,b,c)$的极小点作为问题的解。

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

为了便于今后的讨论，我们把它写成统一的形式。把a,b,c换成x_1,x_2,x_3，记为$x=(x_1,x_2,x_3)^T$。把δ换成f，这样例5.1.1归纳求解无约束问题

$$\min f(x)=\sum_{i=1}^{m}(x_1+x_2\xi_i^{x_3}-\eta_i)^2 .$$

将例5.1.1推广到一般形式, 无约束最优化问题的数学模型为

$$\min \quad f(x), \qquad x=(x_1,x_2,\cdots,x_n)^T\in R^n, \tag{1.1}$$

称$f(x)$为目标函数, x为n维变量.

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

对于无约束问题(1.1), 我们给出最优解的严格定义。

定义5.1.1 若存在$x^* \in R^n, \varepsilon > 0, \forall x \in R^n$, 使当$\|x - x^*\| < \varepsilon$时, 恒有

$$f(x) \geq f(x^*),$$

则称x^*是$f(x)$的局部极小点, 或称x^*是无约束问题的局部解。若对$x \in R^n$, 使当$0 < \|x - x^*\| < \varepsilon$时, 恒有

$$f(x) > f(x^*),$$

则称x^*是$f(x)$的严格局部极小点, 或称x^*是无约束问题的严格局部解。

去掉定义中的$\|x - x^*\| < \varepsilon$, 则称$x^*$是$f(x)$的(严格)全局极小点, 或称$x^*$是无约束问题的(严格)全局解。

将全局和局部解均称为无约束问题的最优解。

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

定义5.1.2 称n维向量$\left(\frac{\partial}{\partial x_1}f(\bar{x}), \frac{\partial}{\partial x_2}f(\bar{x}), \cdots, \frac{\partial}{\partial x_n}f(\bar{x})\right)^T$为函数$f(x)$在$x=\bar{x}$处的梯度，记为$\nabla f(\bar{x})$，即

$$\nabla f(\bar{x}) = \left(\frac{\partial}{\partial x_1}f(\bar{x}), \frac{\partial}{\partial x_2}f(\bar{x}), \cdots, \frac{\partial}{\partial x_n}f(\bar{x})\right)^T.$$

称$\nabla f(x)$为梯度函数，简称梯度。

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

定理5.1.1 (无约束问题局部解的一阶必要条件) 设$f(x)$具有连续的一阶偏导数, 若x^*是无约束问题(1.1)的局部解, 则

$$\nabla f(x^*) = 0. \tag{1.2}$$

定理5.1.1的逆命题不成立, 即梯度为0的点不一定是局部解。这种情况由一元函数就可以得到验证。但此类点也是很重要的点, 称梯度为0的点为稳定点。

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

下面介绍充分条件, 仍然先给出一个概念.

定义5.1.3 称$n\times n$阶矩阵

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2}f(\bar{x}) & \frac{\partial^2}{\partial x_1\partial x_2}f(\bar{x}) & \cdots & \frac{\partial^2}{\partial x_1\partial x_n}f(\bar{x}) \\ \frac{\partial^2}{\partial x_2\partial x_1}f(\bar{x}) & \frac{\partial^2}{\partial x_2^2}f(\bar{x}) & \cdots & \frac{\partial^2}{\partial x_2\partial x_n}f(\bar{x}) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2}{\partial x_n\partial x_1}f(\bar{x}) & \frac{\partial^2}{\partial x_n\partial x_2}f(\bar{x}) & \cdots & \frac{\partial^2}{\partial x_n^2}f(\bar{x}) \end{bmatrix}$$

为函数$f(x)$在$x=\bar{x}$处的Hesse矩阵, 记为$\nabla^2 f(\bar{x})$, 即

$$\nabla^2 f(\bar{x}) = \left(\frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j}f(\bar{x})\right)_{n\times n}.$$

称$\nabla^2 f(x)$为Hesse矩阵函数。

定理5.1.2 (无约束问题局部解的二阶充分条件) 设$f(x)$具有连续的二阶偏导数, 在x^*处满足

$$\nabla f(x^*) = 0 \quad \text{且} \quad \nabla^2 f(x^*) \text{ 正定}, \tag{1.3}$$

则x^*是无约束问题(1.1)的严格局部解。

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

1.2. 约束最优化问题

类似于无约束问题, 我们仍用一个例子导出约束最优化问题的数学模型.

例5.1.2 人字架最优设计问题

考虑如图5.1.1所示的钢管构造的人字架，设钢管壁厚$t=\bar{t}$和半跨度$s=\bar{s}$已给定，试求能承受负荷$2P$的最轻设计。

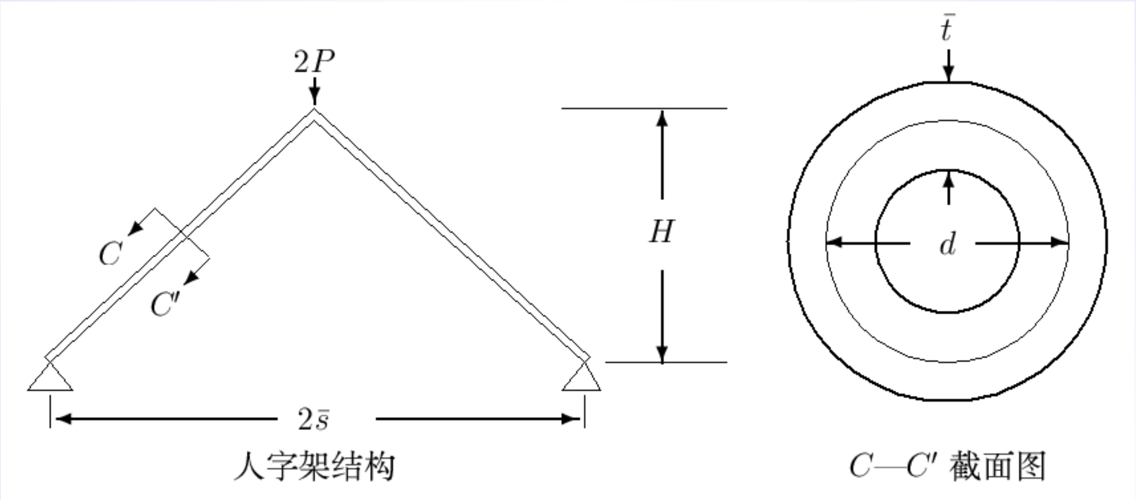


图5.1.1　人字架最优设计问题

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优. . .
实例分析— 飞行管理问题

首先我们定性地分析此问题。壁厚和跨度一定。欲求最轻设计，需要杆短。这样做必使张角增大，则负荷$2P$就会在钢管上有很大的张力。为了能承受这样的应力,钢管需变粗，其结果是杆变重.

下面进行定量的分析。给定一组d和H值后，可以计算出钢管的截面积A和钢管的长度L,

$$
\begin{aligned}
A &= \frac{1}{4}\pi(D_2^2 - D_1^2) = \frac{\pi}{4}(D_2 + D_1)(D_2 - D_1) = \pi d\bar{t}, \\
L &= (\bar{s}^2 + H^2)^{\frac{1}{2}},
\end{aligned}
$$

因此钢管的重量为

$$
w(d, H) = 2\rho\pi d\bar{t}(\bar{s}^2 + H^2)^{\frac{1}{2}},
$$

其中ρ是比重。

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

下面考虑d, H受到的限制，当负荷为$2P$时，杆件受到的压力为

$$\sigma(d,H)=\frac{P}{\pi \bar{t}}\cdot\frac{(\bar{s}^2+H^2)^{\frac{1}{2}}}{Hd}.$$

根据结构力学原理，对于选定的钢管，不出现断裂的条件（屈服条件）是

$$\sigma(d,H)\le\sigma_y,$$

其中σ_y是钢管最大许可的抗压强度。而不出现弹性弯曲的条件(屈曲条件)为

$$\sigma(d,H)\le\frac{\pi^2E(d^2+\bar{t}^2)}{8(\bar{s}^2+H^2)},$$

其中E为钢管材料的扬氏模量。因此人字架最优设计问题是在上述两个条件下使$w(d,H)$达到最小。

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

为了方便起见，写成统一的数学表达式，分别用x_1, x_2代替d, H，记$x = (x_1, x_2)^T$，用f代替w，因此人字架最优设计问题的数学表达式为

$$
\begin{aligned}
\min \quad & f(x) = 2\pi\rho\bar{t}x_1(\bar{s}^2 + x_2^2)^{\frac{1}{2}}, \\
s.t \quad & c_1(x) = \frac{P}{\pi\bar{t}} \cdot \frac{(\bar{s}^2 + x_2^2)^{\frac{1}{2}}}{x_1x_2} - \sigma_y \le 0, \\
& c_2(x) = \frac{P}{\pi\bar{t}} \cdot \frac{(\bar{s}^2 + x_2^2)^{\frac{1}{2}}}{x_1x_2} - \frac{\pi^2E}{8} \cdot \frac{\bar{t}^2 + x_1^2}{\bar{s}^2 + x_2^2} \le 0.
\end{aligned}
$$

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

综上所述，一般形式的约束最优化问题的数学模型为

$$\min \quad f(x), \ \ x \in R^n, \tag{1.4}$$

$$s.t. \quad c_i(x) = 0, \ \ i \in E = \{1, 2, \cdots, l\}, \tag{1.5}$$

$$c_i(x) \leq 0, \ \ i \in I = \{l+1, l+2, \cdots, l+m\}, \tag{1.6}$$

称$f(x)$为目标函数，称$c_i(x) = 0 (i \in E)$，或$c_i(x) \leq 0 (i \in I)$为约束条件。其中E是等式约束指标集，I是不等式约束指标集.

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

定义5.1.4 称满足约束条件的点为可行点, 称可行点全体组成的集合为可行域，记作D，即

$$D = \{x|\ c_i(x) = 0, i \in E, c_i(x) \le 0, i \in I\}.$$

这样我们可以定义约束问题的最优解。

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

定义5.1.5 若对$x^* \in D$, 存在$\varepsilon > 0$, 使当$x \in D$且$\|x - x^*\| \le \varepsilon$时, 总有

$$f(x) \ge f(x^*),$$

则称x^*为约束问题(1.4)–(1.6)的局部解, 或简称x^*为最优解. 若当$x \in D$且$0 < \|x - x^*\| \le \varepsilon$, 总有

$$f(x) > f(x^*),$$

则称x^*为约束问题的严格局部解.

去掉定义中的$\|x - x^*\| < \varepsilon$, 则称$x^*$为约束问题(1.4)–(1.6) 的(严格)全局解.

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

在这里我们给出约束问题的一阶必要条件.

定理5.1.3 (约束问题局部解的一阶必要条件) 设约束问题(1.4)–(1.6)中$f(x)$, $c_i(x)$ $(i=1,2,\cdots,l+m)$具有连续的一阶偏导数, 若x^*是约束问题(1.4)–(1.6) 的局部解, 并且在x^*处满足$\nabla c_i(x^*)(i\in E\bigcup I^*)$, 则存在常数$\lambda^*=(\lambda_1^*,\lambda_2^*,\cdots,\lambda_{l+m}^*)^T$, 使得

$$
\begin{aligned}
\nabla_x L(x^*,\lambda^*) &= \nabla f(x^*)+\sum_{i=1}^{l+m}\lambda_i^*\nabla c_i(x^*)=0,\\
c_i(x^*) &= 0, \quad i\in E=\{1,2,\cdots,l\},\\
c_i(x^*) &\le 0, \quad i\in I=\{l+1,l+2,\cdots,l+m\},\\
\lambda_i^* &\ge 0, \quad i\in I=\{l+1,l+2,\cdots,l+m\},\\
\lambda_i^* c_i(x^*) &= 0, \quad i\in I=\{l+1,l+2,\cdots,l+m\},
\end{aligned}
$$

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

其中I^*为x^*处的有效约束指标集, 简称有效集, 即

$$I(x^*) = \{i \mid c_i(x^*) = 0, i \in I\}.$$

$L(x, \lambda)$为Lagrange 函数, 即

$$L(x, \lambda) = f(x) + \sum_{i=1}^{l+m} \lambda_i c_i(x).$$

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

通常称上述一阶必要条件为Karush-Kuhn-Tucker条件, 或简称为KKT条件, 称满足KKT条件的点为KKT点, 称λ^*为x^*处的Lagrange乘子.

由于约束问题的二阶充分条件涉及较深的数学知识, 这里就不作介绍了.

大家注意到, 如果去掉不等式约束条件, 约束问题的一阶必要条件与《高等数学》中讲到条件极值的必要条件相同. 在增加不等式约束之后, 一阶必要条件变得复杂的多. 因此用一阶必要条件求解约束最优化问题, 比求解无约束问题更困难, 有关求解的数值方法, 将在5.4节中予以介绍.

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

1.3. 求解最优化问题的图解法

例5.1.3 根据图象求解无约束问题

$$\min f(x) = (x_1 - 2)^2 + (x_2 - 2)^2 + 4.$$

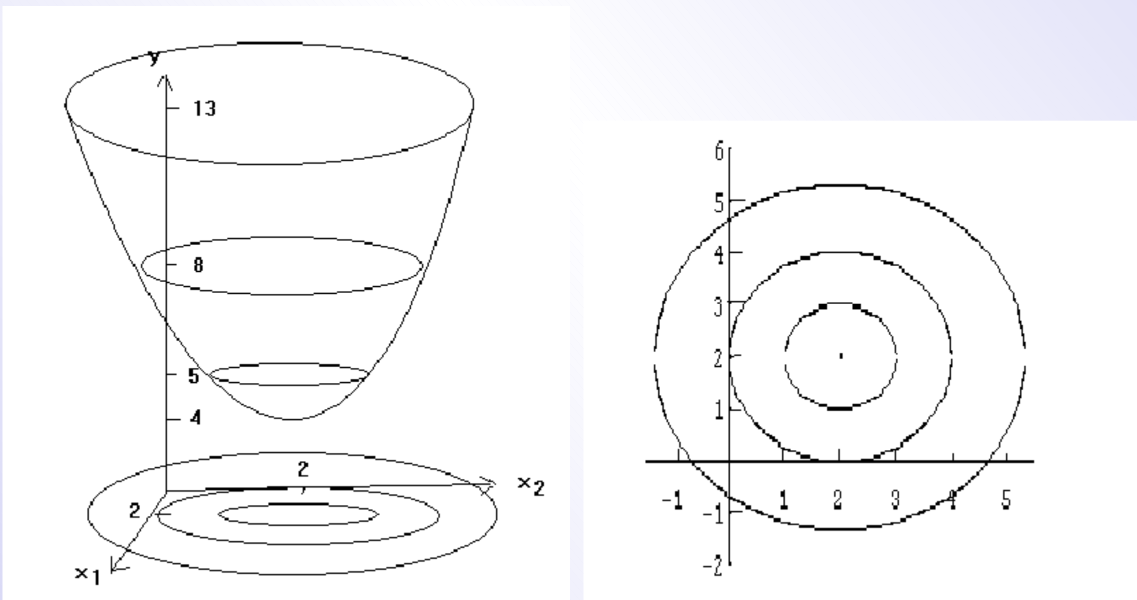


图5.1.2 无约束问题极小点的几何意义

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

例5.1.4 用图解法求解约束问题

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) = (x_1-2)^2 + (x_2-2)^2, \\ s.t. \quad & c_1(x) = x_1 + 2x_2 - 4 \le 0, \\ & c_2(x) = -x_1 \le 0, \\ & c_3(x) = -x_2 \le 0. \end{aligned}$$

首先画出问题的可行域D,

$$D = \{x | x_1 + 2x_2 \le 4, x_1 \ge 0, x_2 \ge 0\},$$

再考虑f的等高线

$$(x_1-2)^2 + (x_2-2)^2 = k,$$

是一族同心圆。

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

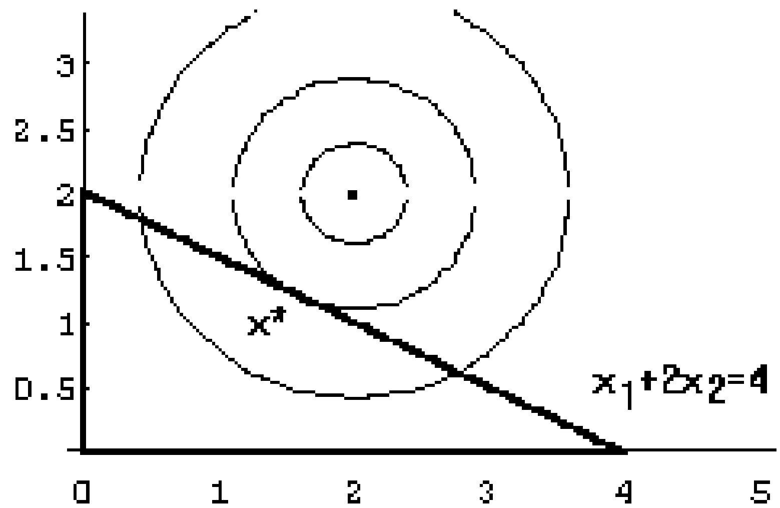


图5.1.3 约束问题极小点的几何意义

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

由图形可知，某一等高线($f(x)=k$)与约束$c_1(x)=0$相切，即其偏导数成比例。由于

$$\frac{\partial f}{\partial x_1}=2x_1-4, \qquad \frac{\partial f}{\partial x_2}=2x_2-4$$

和

$$\frac{\partial c_1}{\partial x_1}=1, \qquad \frac{\partial c_1}{\partial x_2}=2$$

则最优点满足方程组

$$\begin{cases} 2x_1-4=\lambda \\ 2x_2-4=2\lambda \\ x_1+2x_2=4 \end{cases}$$

解方程组得到$x^*=(\frac{8}{5},\frac{6}{5})^T$，其最优目标函数值为$f(x^*)=\frac{4}{5}$。

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

2 一维搜索

求解无约束最优化问题(1.1), 一般采用迭代的方法, 即先选择一个初始点, 再寻找该点处的下降方向（称为搜索方向）。然后求该方向上极小点（称为一维搜索），得到一个新的点. 这个新点要优于原来的点, 即新点处的目标函数值小于原来点处的目标函数值. 然后在新点处再寻找下降方向和在该方向上求极小点, ······, 如此下去, 最终得到最优点. 在这一节, 我们要解决的问题是一维搜索, 即给出求解一维问题

$$\min_{\alpha} \phi(\alpha) = f(x^{(k)} + \alpha d^{(k)})$$

的数值方法.

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

一维搜索的数值方法基本上有二种, 一种是试探法, 即陆续取一些试探点, 逐次比较在这些点的函数值, 完成一维搜索的任务. 另一种是插值法, 即用某些点的函数值（或导数值）构造插值函数, 用插值函数的极小点来近似函数$\phi(\alpha)$的极小点. 在这一节介绍最基本的试探法和插值方法.

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

2.1. 0.618法

0.618法又称为黄金分割法, 是试探法的一种. 0.618是一元二次方程

$$\tau^2 + \tau - 1 = 0 \tag{2.1}$$

的根

$$\tau = \frac{\sqrt{5} - 1}{2}$$

的近似值.

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

0.618法的基本思想是先在搜索区间$[a, b]$上确定两个试探点, 其中左试探点为

$$\alpha_l = a + (1-\tau)(b-a),$$

右试探点为

$$\alpha_r = a + \tau(b-a).$$

再分别计算这两个试探点的函数值$\phi_l = \phi(\alpha_l)$, $\phi_r = \phi(\alpha_r)$. 由单峰函数的性质, 若$\phi_l < \phi_r$, 则区间$[\alpha_r, b]$内不可能有极小点, 因此去掉区间$[\alpha_r, b]$, 令$a' = a$, $b' = \alpha_r$, 得到一个新的搜索区间. 若$\phi_l > \phi_r$, 则区间$[a, \alpha_l]$内不可能有极小点, 去掉区间$[a, \alpha_l]$, 令$a' = \alpha_l$, $b' = b$, 得到一个新的搜索区间.

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

类似上面的步骤, 在区间$[a', b']$内再计算二个新的试探点

$$\begin{aligned}\alpha_l' &= a' + (1-\tau)(b'-a'),\\ \alpha_r' &= a' + \tau(b'-a'),\end{aligned}$$

再比较函数值, 再确定新的区间, 如此下去, $\cdots$

在上述方法中, 似乎每次迭代中需要计算两个试探点及它们的函数值, 这里取τ值和其他值并没有什么不同. 真是这样吗? 下面对新的试探点进行分析。

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

(1) 若$\phi_l < \phi_r$, 则去掉区间$[\alpha_r, b]$, 那么新的右试探点为

$$\alpha_r' = a' + \tau(b' - a') = a + \tau(\alpha_r - a) = a + \tau^2(b - a),$$

注意到τ是方程(2.1)的根, 因此有

$$\alpha_r' = a + \tau^2(b - a) = a + (1 - \tau)(b - a) = \alpha_l,$$

即原区间的左试探点.

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

(2) 若$\phi_l > \phi_r$, 则去掉区间$[a, \alpha_l]$, 那么新的左试探点为

$$\begin{aligned}
\alpha_l' &= a' + (1-\tau)(b'-a') = \alpha_l + (1-\tau)(b-\alpha_l) \\
&= a + (1-\tau)(b-a) + \tau(1-\tau)(b-a) \\
&= a + (1-\tau^2)(b-a) = a + \tau(b-a) \\
&= \alpha_r,
\end{aligned}$$

即原区间的右试探点.

因此在上述计算过程中, 只需要计算一个新试探点和一个点的函数值. 因此, 0.618法除第一次需要计算两个试探点外, 其余各步每次只需计算一个试探点和它的函数值, 这大大提高了算法的效率. 因此就得到相应的算法.

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

算法5.2.2 (0.618法)

(1) 置初始搜索区间$[a,b]$, 并置精度要求ε, 并计算左右试探点

$$\alpha_l = a + (1-\tau)(b-a), \qquad \alpha_r = a + \tau(b-a),$$

其中 $\tau = \dfrac{\sqrt{5}-1}{2}$, 及相应的函数值$\phi_l = \phi(\alpha_l)$, $\phi_r = \phi(\alpha_r)$.

(2) 如果$\phi_l < \phi_r$, 则置$b = \alpha_r$, $\alpha_r = \alpha_l$, $\phi_r = \phi_l$, 并计算

$$\alpha_l = a + (1-\tau)(b-a), \qquad \phi_l = \phi(\alpha_l);$$

否则置$a = \alpha_l$, $\alpha_l = \alpha_r$, $\phi_l = \phi_r$, 并计算

$$\alpha_r = a + \tau(b-a), \qquad \phi_r = \phi(\alpha_r).$$

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优. . .
实例分析— 飞行管理问题

(3) 若$|b-a| \le \varepsilon$, 做

如果$\phi_l < \phi_r$, 则置$\mu = \alpha_l$; 否则置$\mu = \alpha_r$, 停止计算

(μ作为问题的解).

否则转(2).

例5.2.1 用0.618法求解一维问题

$$\min\ \phi(\alpha) = e^{\alpha} - 5\alpha$$

在区间[1,2]内的极小点, 计算4步.

解: $a=1$, $b=2$, $\alpha_l = 1.382$, $\alpha_r = 1.618$, $\phi_l = -2.927$, $\phi_r = -3.047$, 所以$\phi_l > \phi_r$, 去掉区间$[a, \alpha_l]$. 详细计算结果见表5.2.1.

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

表 5.2.1　迭代 4 次的计算结果

迭代次数	a	b	α_l	α_r	ϕ_l	ϕ_r	$\|b-a\|$
1	1	2	1.382^*	1.618^*	-2.927^*	-3.047^*	1.00
2	1.382	2	1.618	1.764^*	-3.047	-2.984^*	0.618
3	1.382	1.764	1.528^*	1.618	-3.031^*	-3.047	0.332
4	1.528	1.764	1.618	1.674^*	-3.047	-3.037^*	0.236

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优. . .
实例分析— 飞行管理问题

3 求解无约束问题的下降算法

3.1. 最速下降法

在讨论最速下降法之前, 先介绍一阶方向导数的概念. 一阶方向导数与普通的导数有些类似.

定义5.3.1 设d是任意的单位向量, 即$\|d\| = 1$， 若极限

$$\lim_{\alpha\to 0^+} \frac{f(\bar{x}+\alpha d) - f(\bar{x})}{\alpha}$$

存在， 则称该极限值为函数$f(x)$在$\bar{x}$处沿方向d的一阶方向导数， 简称为方向导数。记为 $\dfrac{\partial}{\partial d} f(\bar{x})$, 即

$$\frac{\partial}{\partial d} f(\bar{x}) = \lim_{\alpha\to 0^+} \frac{f(\bar{x}+\alpha d) - f(\bar{x})}{\alpha}.$$

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优. . .
实例分析— 飞行管理问题

由导数的几何意义, 我们不难得到方向导数的几何意义, 即方向导数表示函数$f(x)$在点$\bar{x}$处沿d方向的变化率。

因此, 若 $\dfrac{\partial f}{\partial d} > 0$, 当自变量沿$d$方向前进时，函数值上升。此时称$d$为上升方向。

若 $\dfrac{\partial f}{\partial d} < 0$, 当自变量沿$d$前进时, 函数值下降. 此时称$d$为下降方向。

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

为了便于计算方向导数, 我们给出方向导数的另一种表达式.

定理5.3.1 设d是单位向量, 若函数$f(x)$具有连续的一阶偏导数，则它在$\bar{x}$处沿方向d的一阶方向导数为

$$\frac{\partial}{\partial d}f(\bar{x}) = d^T\nabla f(\bar{x}).$$

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

定义5.3.2 设$x, y \in R^n$, 称

$$x^T y = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i$$

为x与y的内积(点积).

因此, 方向导数可以看成单位方向与梯度的内积.

对于任意的两个向量$x, y \in R^n$, 则有如下不等式

$$\left| x^T y \right| \le \|x\| \cdot \|y\|.$$

这就是著名的Schwartz不等式. 其意义为: 两个向量的内积小于等式向量模的积.

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

由定理5.3.1和Schwartz不等式, 对任何方向上的单位向量, 有如下不等式

$$\frac{\partial}{\partial d} f(\bar{x}) \geq -\|\nabla f(\bar{x})\|. \tag{3.1}$$

特别当d取负梯度方向时, 即$d = -\nabla f(\bar{x})/\|\nabla f(\bar{x})\|$. 由定理5.3.1得到

$$\frac{\partial}{\partial d} f(\bar{x}) = -\|\nabla f(\bar{x})\|. \tag{3.2}$$

式(3.1)和式(3.2)表明, 一阶方向导数在负梯度方向处达到最小, 也就是说负梯度方向是该点处使函数下降最快的方向.

因此称负梯度方向为最速下降方向.

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

最速下降法的基本思想是: 选任取一点$x^{(1)}$作为初始点, 计算该点的梯度$\nabla f(x^{(1)})$, 求该点处的最速下降方向, 即令$d^{(1)} = -\nabla f(x^{(1)})$, 再沿$d^{(1)}$方向前进, 寻找该方向上的极小点, 得到点$x^{(2)}$, 再计算$\nabla f(x^{(2)})$, 令$d^{(2)} = -\nabla f(x^{(2)})$, 沿$d^{(2)}$方向前进, 得到点$x^{(3)}$, 如此下去$\cdots\cdots$. 具体算法如下。

算法5.3.1 (最速下降法)

(1) 取初始点$x^{(1)}$, 置精度要求ε, 置$k=1$。

(2) 若$\|\nabla f(x^{(k)})\|<\varepsilon$, 则停止计算($x^{(k)}$为无约束问题的最优解); 否则置

$$d^{(k)}=-\nabla f(x^{(k)}).$$

(3) 一维搜索。求解一维问题

$$\min_{\alpha}\phi(\alpha)=f(x^{(k)}+\alpha d^{(k)}).$$

得α_k, 置

$$x^{(k+1)}=x^{(k)}+\alpha_k d^{(k)}.$$

(4) 置$k=k+1$, 转(2)。

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

在算法中, ε是精度要求, 即当梯度接近于0时, 我们就认为达到极小点, 终止计算. 这样做的目的是避免算法产生死循环. 算法中的一维搜索可用5.2节中介绍的算法求解.

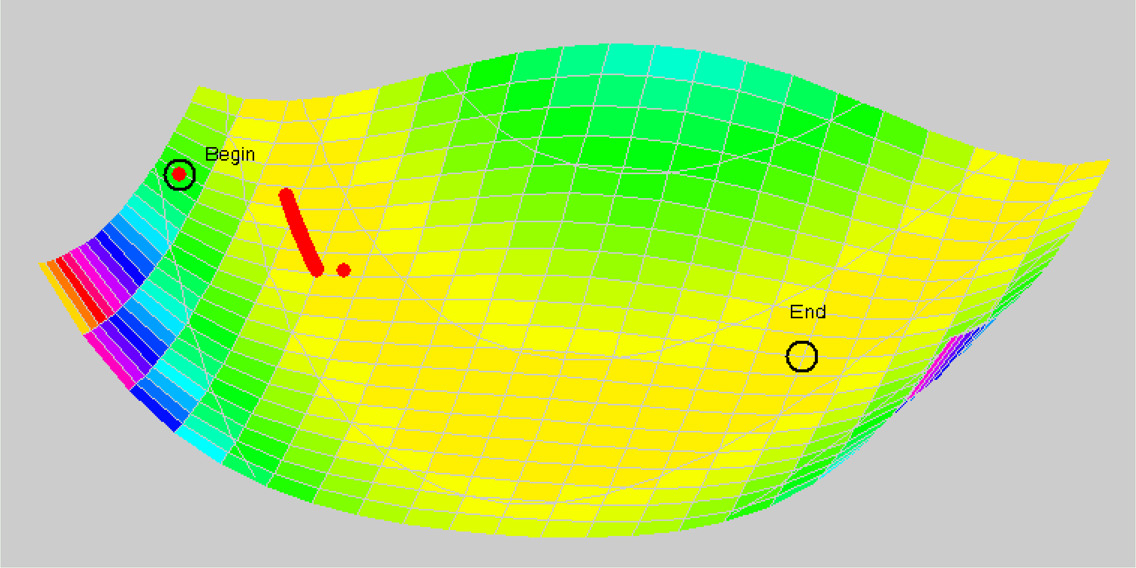
最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

例5.3.1 用最速下降法求解无约束问题

$$\min \ f(x) = 100 * (x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2,$$

取$x^{(1)} = (-1.9, 2)^T$.

为便于理解，这里不给出具体的计算过程，而是用图形来描述。在计算68次迭代，302次函数值的计算，得到如下结果。



最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

3.2. Newton法

若x^*是无约束问题的局部解, 则x^*满足

$$\nabla f(x) = 0, \tag{3.3}$$

因此, 可以通过求解方程组(3.3)来得到无约束最优化问题解. 注意到方程组(3.3)是非线性的, 处理起来较为困难, 因此考虑它的一个线性逼近. 选取初始点$x^{(1)}$（作为x^*的第一次近似）, 在$x^{(1)}$处线性展开(与一元函数的线性展开类似), 略去高阶部分得到

$$\nabla f(x) \approx \nabla f(x^{(1)}) + \nabla^2 f(x^{(1)})(x - x^{(1)}), \tag{3.4}$$

这里$\nabla^2 f(x^{(1)})$是$x^{(1)}$处的Hesse矩阵. 令式(3.4)右端为0, 即

$$\nabla f(x^{(1)}) + \nabla^2 f(x^{(1)})(x - x^{(1)}) = 0. \tag{3.5}$$

求解线性方程组(3.5)得到

$$x^{(2)} = x^{(1)} - \left(\nabla^2 f(x^{(1)})\right)^{-1} \nabla f(x^{(1)}),$$

作为x^*的第二次近似.

如果$x^{(2)}$的精度不够, 可以在$x^{(2)}$处将$\nabla f(x)$展开, 求解相应的线性方程组, 得到$x^{(3)}$, 如此下去, 可以得到序列$\{x^{(k)}\}$, 并且满足如下迭代公式

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \left[\nabla^2 f(x^{(k)})\right]^{-1} \nabla f(x^{(k)}), \quad k = 1, 2, \cdots, \tag{3.6}$$

称式(3.6)为Newton迭代公式.

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优. . .
实例分析— 飞行管理问题

为了便于计算将式(3.6)改为

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + d^{(k)},$$

其中$d^{(k)}$是线性方程组

$$\nabla^2 f(x^{(k)})d = -\nabla f(x^{(k)}) \tag{3.7}$$

的解. 通常称式(3.7)为Newton方程.

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

由上述推导过程, 我们得到如下算法.

算法5.3.2 (Newton法)

(1) 取初始点$x^{(1)}$, 置精度要求ε, 置$k=1$.

(2) 如果$\|\nabla f(x^{(k)})\| \le \varepsilon$, 则停止计算($x^{(k)}$作为无约束问题的解); 否则求解线性方程组

$$\nabla^2 f(x^{(k)})d = -\nabla f(x^{(k)}),$$

得到$d^{(k)}$.

(3) 置

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + d^{(k)}, \qquad k = k+1,$$

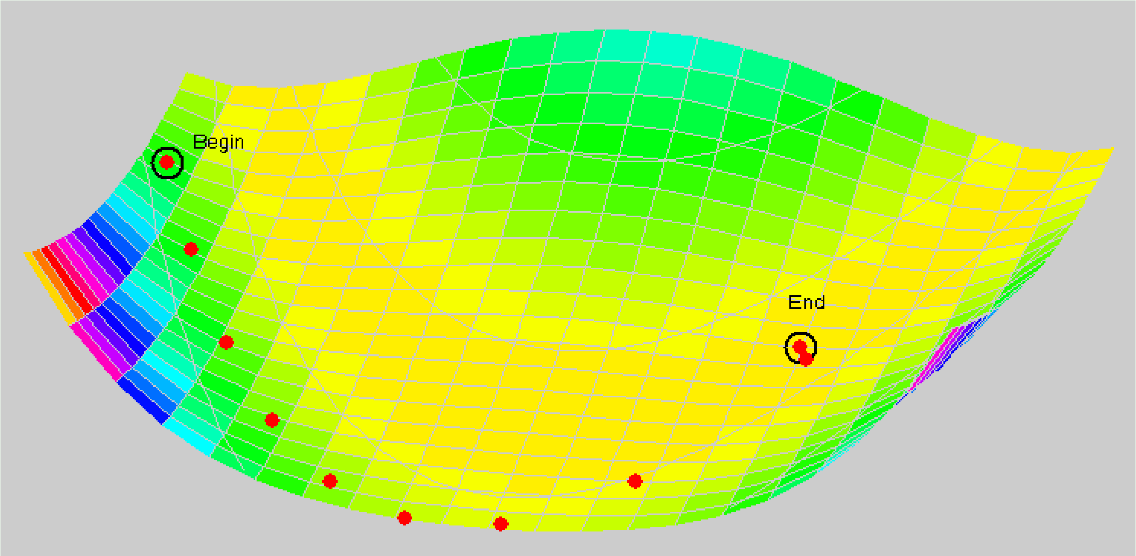
转(2).

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

例5.3.2 用Newton法求解无约束问题

$$\min\ f(x) = 100 * (x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2,$$

取$x^{(1)} = (-1.9, 2)^T$.



上述结果是经过11次迭代，47次函数值计算得到的。从计算效果来看，Newton法要比最速下降法优越的多。事实上，Newton法是求解无约束最优化问题最好的算法。

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优. . .
实例分析— 飞行管理问题

3.3. 变度量法

Newton法具有许多好的性质, 如收敛速度快等, 但在Newton法中, 每步计算需要求解Newton方程. 这一做法的主要缺点是需要计算Hesse矩阵, 计算量大. 要克服上述缺点的最直观想法是: 不计算Hesse矩阵$\nabla^2 f(x^{(k)})$, 而用一个“近似”矩阵$B^{(k)}$来代替$\nabla^2 f(x^{(k)})$. 其中$B^{(k)}$是根据迭代过程中的某些信息得到的.

用方程组

$$B^{(k)} d = -\nabla f(x^{(k)}) \tag{3.8}$$

的解$d^{(k)}$来作为搜索方向. 即用方程(3.8)来代替Newton方程(3.7). 这就得到一个新的算法. 由于$B^{(k)}$“近似”于$\nabla^2 f(x^{(k)})$, 可以猜想, 该算法应有较好性质, 并且克服了计算量大的缺点. 那么问题的关键是如何构造矩阵$B^{(k)}$?

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

首先, $B^{(k)}$不可能在数值上近似$\nabla^2 f(x^{(k)})$, 因为我们的目标是不计算Hesse矩阵$\nabla^2 f(x^{(k)})$. 那么, $B^{(k)}$只能在性质上近似$\nabla^2 f(x^{(k)})$.

经推导, $B^{(k)}$应满足

$$B^{(k)} s^{(k-1)} = y^{(k-1)}, \tag{3.9}$$

称式(3.9)为拟Newton方程. 并且假设$B^{(k)}$是对称矩阵.

由于式(3.9)并不能唯一地确定$B^{(k)}$, 因此还需要附加一些条件. 假设前面已得到的矩阵$B^{(k-1)}$, 并且矩阵$B^{(k-1)}$已与$\nabla^2 f(x^{(k-1)})$"近似". 一种自然的想法就是$B^{(k)}$ 是由$B^{(k-1)}$经过修正得到的, 即

$$B^{(k)} = B^{(k-1)} + \Delta B^{(k)}. \tag{3.10}$$

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

但由式(3.9)和式(3.10)仍无法唯一地确定出$\Delta B^{(k)}$. 在1970年, Brogden、Fletcher、Goldfarb和Shanno 给出了一个著名的修正公式,

$$B^{(k)} = B^{(k-1)} - \frac{B^{(k-1)} s^{(k-1)} (s^{(k-1)})^T B^{(k-1)}}{(s^{(k-1)})^T B^{(k-1)} s^{(k-1)}} + \frac{y^{(k-1)} (y^{(k-1)})^T}{(y^{(k-1)})^T s^{(k-1)}}, \tag{3.11}$$

因此称式(3.11)为BFGS公式, 相应的拟Newton算法也称为BFGS算法.

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

算法2 (BFGS算法)

(1) 取初始点$x^{(1)}$, 置初始矩阵$B^{(1)}(=I)$, 置精度要求ε, 置$k=1$.

(2) 如果$\|\nabla f(x^{(k)})\| \le \varepsilon$, 则停止计算($x^{(k)}$作为无约束问题的解); 否则求解线性方程组

$$B^{(k)}d = -\nabla f(x^{(k)})$$

得到$d^{(k)}$.

(3) 一维搜索. 求解一维问题

$$\min \phi(\alpha) = f(x^{(k)} + \alpha d^{(k)})$$

得α_k, 置

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)}.$$

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

(4) 修正$B^{(k)}$, 记

$$s^{(k)} = x^{(k+1)} - x^{(k)}, \qquad y^{(k)} = \nabla f(x^{(k+1)}) - \nabla f(x^{(k)}),$$

置

$$B^{(k+1)} = B^{(k)} - \frac{B^{(k)} s^{(k)} (s^{(k)})^T B^{(k)}}{(s^{(k)})^T B^{(k)} s^{(k)}} + \frac{y^{(k)} (y^{(k)})^T}{(y^{(k)})^T s^{(k)}}.$$

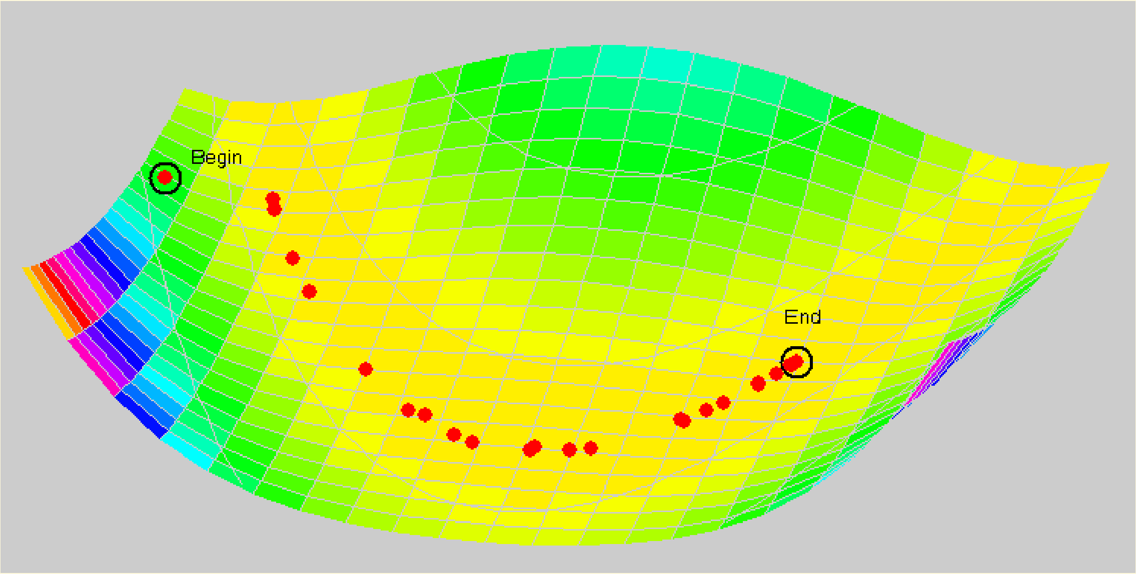
(5) 置$k = k + 1$, 转(2).

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

例5.3.3 用变度量法(BFGS算法)求解无约束问题

$$\min\ f(x) = 100 * (x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2,$$

取$x^{(1)} = (-1.9, 2)^T$.



上述结果是经过25次迭代，105次函数值计算得到的。

从各种指标综合来看，拟Newton算法（BFGS算法）是求解无约束最优化问题最优秀的算法。

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

3.4. 共轭梯度法

定义5.3.3 设G为$n \times n$阶正定对称矩阵. 若$d^{(1)}, d^{(2)}$满足

$$(d^{(1)})^T G d^{(2)} = 0,$$

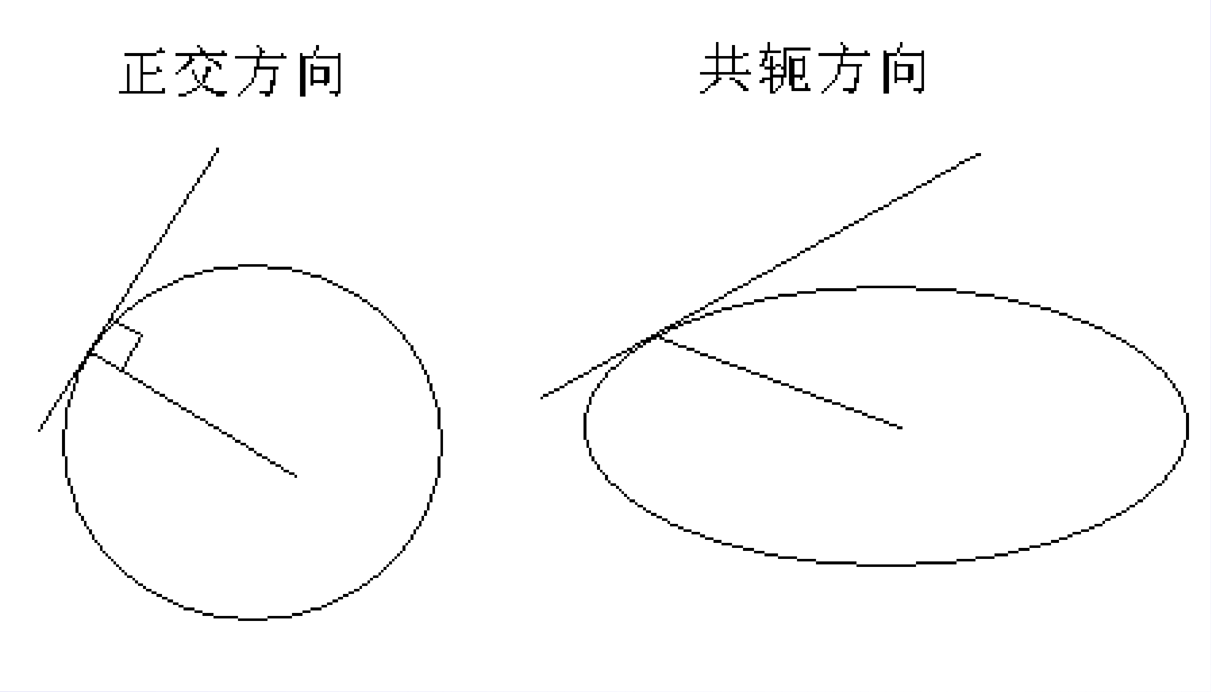
则称$d^{(1)}, d^{(2)}$关于G共轭. 若$d^{(1)}, d^{(2)}, \cdots, d^{(k)}(k \leq n)$ 两两关于G共轭, 即

$$(d^{(i)})^T G d^{(i)} = 0, \ \ i \neq j, \ \ i, j = 1, 2, \cdots, k,$$

则称$d^{(1)}, d^{(2)}, \cdots, d^{(k)}$为$G$的$k$个共轭方向. 若$d^{(i)} \neq 0$, $i = 1, 2, \cdots, k$, 则称为G的k个非零共轭方向.

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优. . .
实例分析— 飞行管理问题

共轭方向的几何意义：



最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

对于共轭方向，有一个重要的定理。

定理5.3.2 (扩展子空间定理) 设目标函数为

$$f(x) = \frac{1}{2}x^T Gx + r^T x + \delta,$$

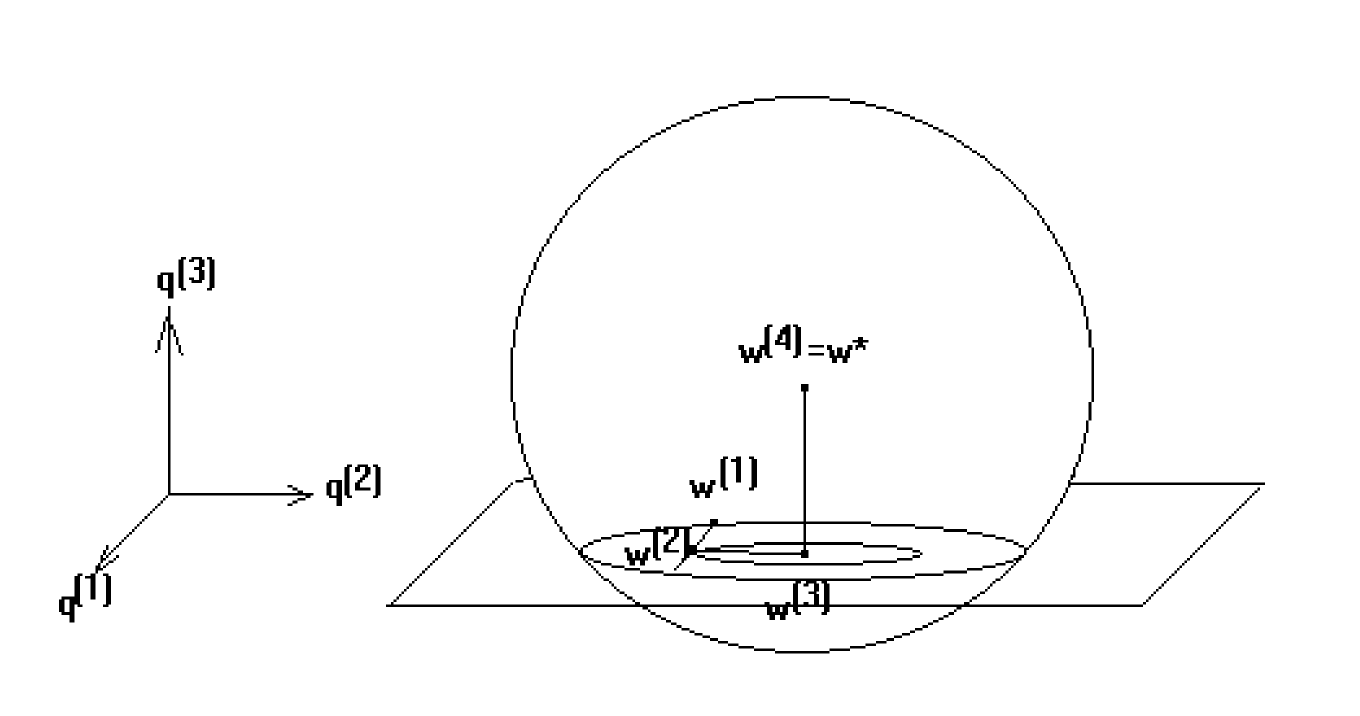
$\{d^{(1)}, d^{(2)}, \cdots, d^{(k)}\}$是$G$的$k(k \le n)$个非零的共轭方向. 从任意的初始点$x^{(1)}$出发, 依次沿$\{d^{(1)}, d^{(2)}, \cdots, d^{(k)}\}$作精确一维搜索, 得到$\{x^{(2)}, x^{(3)}, \cdots, x^{(k+1)}\}$, 则$x^{(k+1)}$是$f(x)$ 在线性流形

$$X_k = \left\{ x = x^{(1)} + \sum_{i=1}^{k} \alpha_i d^{(i)} \mid -\infty < \alpha_i < +\infty \right\}$$

上的唯一极小点. 特别当$k = n$时,则$x^{(n+1)}$是$f(x)$在整个空间上的唯一极小点.

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

扩展子空间定理的几何意义：



最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

经过推导得到：若在点$x^{(k)}$处, $\nabla f(x^{(k)}) \neq 0$, 则$x^{(k)}$处的搜索方向为

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

其中

$$\beta_{k-1} = \frac{\nabla f(x^{(k)})^T \left(\nabla f(x^{(k)}) - \nabla f(x^{(k-1)})\right)}{\nabla f(x^{(k)})^T \nabla f(x^{(k)})}, \quad (3.12)$$

$$\beta_{k-1} = \frac{\left\|\nabla f(x^{(k)})\right\|^2}{\left\|\nabla f(x^{(k-1)})\right\|^2}. \quad (3.13)$$

式(3.12)是由Plak, Ribir 和Polyak三人提出来的, 因此称为PRP公式, 式(3.13)是由Fletcher和Reeves提出来的, 因此称为FR公式.

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

算法5.3.4 (FR算法或PRP算法)

(1) 取初始点$x^{(1)}$, 置精度要求ε, 置$k=1$.

(2) 如果$\|\nabla f(x^{(k)})\| \le \varepsilon$, 则停止计算($x^{(k)}$作为无约束问题的解); 否则置

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

其中

$$\beta_{k-1} = \begin{cases} 0, & k=1, \\ \dfrac{\left\|\nabla f(x^{(k)})\right\|^2}{\left\|\nabla f(x^{(k-1)})\right\|^2}, & k>1, \end{cases}$$

或

$$\beta_{k-1} = \begin{cases} 0, & k=1, \\ \dfrac{\nabla f(x^{(k)})^T\left(\nabla f(x^{(k)}) - \nabla f(x^{(k-1)})\right)}{\nabla f(x^{(k-1)})^T \nabla f(x^{(k-1)})}, & k>1. \end{cases}$$

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

(3) 一维搜索. 求解一维问题

$$\min \phi(\alpha) = f(x^{(k)} + \alpha d^{(k)})$$

得α_k, 置

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k d^{(k)}.$$

(4) 置$k = k + 1$, 转(2).

4 惩罚函数法

求解约束最优化问题

$$\min \quad f(x), \quad x \in R^n, \tag{4.1}$$

$$s.t. \quad c_i(x) = 0, \quad i \in E = \{1, 2, \cdots, l\}, \tag{4.2}$$

$$c_i(x) \leq 0, \quad i \in I = \{l+1, l+2, \cdots, l+m\} \tag{4.3}$$

有两类方法. 一类是利用约束问题本身的性质, 直接求解约束问题（方法介绍略）. 另一类方法是将约束问题转化为一系列无约束问题, 通过求解一系列无约束最优化问题, 来得到约束问题的最优解. 这类方法称为序列无约束极小化方法. 本节介绍的惩罚函数法.

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优. . .
实例分析— 飞行管理问题

先给一个简单的例子, 来阐明罚函数法的基本思想. 考虑一个变量, 仅有一个不等式约束的问题

$$\min \quad f(x) = x^2 \tag{4.4}$$

$$s.t. \quad c(x) = x + 1 \leq 0 \tag{4.5}$$

其可行域为$(-\infty, -1]$, 最优解为$x^* = -1$.

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

现将问题(4.4)–(4.5)转化为无约束问题, 也就是说, 希望构造相应的无约束问题, 而该无约束问题的解恰好是约束问题的最优解. 从直观上看, 要做到这一点就必须增大在非可行域处的目标函数值, 即对非可行域处的目标函数加以惩罚. 现构造惩罚函数, 一种较为简单而又能保证函数具有连续的偏导数的方法为:

$$
\begin{aligned}
P(x,\sigma) &= \begin{cases} f(x), & c(x) \le 0 \\ f(x) + \dfrac{\sigma}{2}[c(x)]^2, & c(x) > 0 \end{cases} \\
&= \begin{cases} x^2, & x+1 \le 0, \\ x^2 + \dfrac{\sigma}{2}(x+1)^2, & x+1 > 0, \end{cases}
\end{aligned}
$$

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

其无约束问题

$$\min \; P(x,\sigma)$$

的最优解为

$$\bar{x}(\sigma) = -\frac{\sigma}{2+\sigma}.$$

当$\sigma \to +\infty$时, 有

$$\bar{x}(\sigma) \to -1 = x^*,$$

即约束问题的最优解.

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

因此, 对于不等式约束问题

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x), \\ s.t. \quad & c(x) \le 0, \end{aligned}$$

其罚函数定义为

$$\begin{aligned} P(x,\sigma) &= \begin{cases} f(x), & c(x) \le 0 \\ f(x) + \dfrac{\sigma}{2}[c(x)]^2, & c(x) > 0 \end{cases} \\ &= f(x) + \frac{\sigma}{2}\left(\max\{0, c(x)\}\right)^2 . \end{aligned}$$

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

对于等式约束问题

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x), \\ s.t. \quad & c(x) = 0, \end{aligned}$$

其罚函数定义为

$$P(x, \sigma) = f(x) + \frac{\sigma}{2}(c(x))^2,$$

即不满足等式方程就加以惩罚.

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

由上面的分析可以得到, 对于一般约束问题(4.1)–(4.3), 其罚函数定义为

$$P(x,\sigma) = f(x) + \frac{\sigma}{2}\left(\sum_{i\in E}[c_i(x)]^2 + \sum_{i\in I}[\max\{0, c_i(x)\}]^2\right)$$
$$= f(x) + \frac{\sigma}{2}S(x),$$

其中

$$S(x) = \left(\sum_{i\in E}[c_i(x)]^2 + \sum_{i\in I}[\max\{0, c_i(x)\}]^2\right),$$

称σ为惩罚因子, 称$\frac{\sigma}{2}S(x)$为惩罚项.

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优. . .
实例分析— 飞行管理问题

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

可以期望, 当σ充分大时, 无约束问题

$$\min \ P(x,\sigma) = f(x) + \frac{\sigma}{2} S(x)$$

的最优解$\bar{x} = \bar{x}(\sigma)$接近约束问题的最优解$x^*$.

因此, 可得到如下算法.

算法5.6.1 (惩罚函数法)

(1) 选择序列$\{\sigma_k\}$, σ_k递增趋于$+\infty$, 取初始点$x^{(0)}$, 置精度要求ε, 置$k=1$.

(2) 以$x^{(k-1)}$为初始点, 求解无约束问题

$$\min\ P(x,\sigma_k)=f(x)+\frac{\sigma_k}{2}S(x),$$

得到最优解$x^{(k)}$.

(3) 若$\sigma_k S(x^{(k)})\le\varepsilon$, 则停止计算($x^{(k)}$作为约束问题的最优解); 否则置

$$k=k+1$$

转(2).

例5.4.1 用惩罚函数法求解约束问题

$$\min \quad f(x) = \frac{1}{2}\left(x_1^2 + \frac{1}{3}x_2^2\right), \tag{4.6}$$

$$s.t. \quad c(x) = x_1 + x_2 - 1 = 0. \tag{4.7}$$

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

解:

$$P(x,\sigma)=f(x)+\frac{\sigma}{2}c^2(x)=\frac{1}{2}\left(x_1^2+\frac{1}{3}x_2^2\right)+\frac{\sigma}{2}(x_1+x_2-1)^2$$

所以

$$\frac{\partial P}{\partial x_1}=x_1+\sigma(x_1+x_2-1)$$
$$\frac{\partial P}{\partial x_2}=\frac{1}{3}x_2+\sigma(x_1+x_2-1)$$

令$\nabla_x P(x,\sigma)=0$, 得到

$$\bar{x}_1(\sigma)=\frac{\sigma}{1+4\sigma},\qquad \bar{x}_2(\sigma)=\frac{3\sigma}{1+4\sigma}$$

令$\sigma\to+\infty$, 得到 $x^*=(\frac{1}{4},\frac{3}{4})^T$.

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优. . .
实例分析— 飞行管理问题

无论是问题(4.4)–(4.5), 还是问题(4.6)–(4.7), 其相应的无约束问题的最优解均在可行域的外部. 而对于一般约束问题, 除非它的最优解x^*也是一个无约束问题的最优解, 通常x^*总位于可行域的边界上, 因此, 采用罚函数法得到的无约束问题的最优解$x^{(k)}$均位于可行域的外部, 因此, 罚函数法也称为外罚函数法.

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

5 用LINGO软件包求解最优化问题

在第三章中介绍了用Lingo软件求解线性规划问题的方法，本节介绍用Lingo软件求解最优化问题的方法。在求解方法上，用Lingo软件求解最优化问题与求解线性规划问题基本上是相同的，所不同的是所定的目标函数与约束函数是非线性函数而已。

5.1. 求解无约束最优化问题

用Lingo软件求解无约束最优化问题

$$\min \quad f(x)$$

较为简单，只需直接给出$f(x)$表达式即可。

例如，求解无约束问题

$$\min \quad f(x) = 100\left(x_2 - x_1^2\right)^2 + (1 - x_1)^2.$$

相应的Lingo语句为

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

```
1]model:
2]  sets:
3]    var/1..2/: x;
4]  endsets
5]  @for(var:@free(x));
6]  min=100*(x(2)-x(1)^2)^2+(1-x(1))^2;
7]end
```

第2～4行是变量说明，第5行说明变量x无非负限制，第6行是目标函数。

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

其计算结果为

```
Local optimal solution found at step: 16
Objective value:                -0.5026222E-06

Variable          Value        Reduced Cost
   X( 1)      0.9998498           0.0000000
   X( 2)      0.9996994           0.0000000
```

本题的理论结果是$x^* = (1,1)^T$, $f(x^*) = 0$. 从前面的结果可以看到理论结果与计算结果存在一定的误差，在Lingo软件中可以通过调整参数来控制计算结果的精度。有关Lingo软件中参数的介绍可见第九章。

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

5.2. 求解约束最优化问题

对于一般约束优化问题：

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x), \\ \text{s.t.} \quad & c_i(x) = 0, \;\; i \in E, \\ & c_i(x) \leq 0, \;\; i \in I. \end{aligned}$$

只需在Lingo语句中给出相应的目标函数和约束函数的表达式即可。

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

例如求解约束问题

$$
\begin{aligned}
\max \quad & x_1x_2x_3 \\
\text{s.t.} \quad & -x_1-2x_2-2x_3 \le 0, \\
& x_1+2x_2+2x_3 \le 72, \\
& x_1 \le 20, \\
& x_2 \le 11.
\end{aligned}
$$

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

相应的Lingo语句为

```
 1]model:
 2]  sets:
 3]    var/1..3/: x;
 4]  endsets
 5]  max=x(1)*x(2)*x(3);
 6]  -x(1)-2*x(2)-2*x(3)<=0;
 7]  x(1)+2*x(2)+2*x(3)<=72;
 8]  x(1)<=20;
 9]  x(2)<=11;
10]  @for(var:@free(x));
11]end
```

第2~4行是变量说明，第5行是目标函数，第6~9行是约束函数, 第10行说明变量x无非负限制。

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

其计算结果为

```
Local optimal solution found at step:    7
Objective value:                   3300.000

Variable           Value        Reduced Cost
   X( 1)        20.00000           0.0000000
   X( 2)        11.00000           0.0000000
   X( 3)        15.00000           0.0000000
```

5.3. 求解二次规划问题

对于二次规划问题：

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) = \frac{1}{2}x^T H x + c^T x, \\ \text{s.t.} \quad & Ax \le b. \end{aligned}$$

给出相应的Lingo语句即可.

例如求解二次规划问题

$$\begin{aligned} \min \quad & x_1^2 + x_2^2 - 2x_1 - 4x_2, \\ \text{s.t.} \quad & x_1 + x_2 \le 1, \\ & -x_1 \quad \le 0, \\ & -x_2 \le 0. \end{aligned}$$

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优. . .
实例分析— 飞行管理问题

相应的Lingo语句为

```
model:
  sets:
    var/1..2/: c,x;
    str/1..3/: b;
    matrix(var,var): H;
    constr(str,var): A;
  endsets

  @for(var: @free(x));
  min=@sum(matrix(i,j):
    .5*H(i,j)*x(i)*x(j))+@sum(var(i):c(i)*x(i));
  @for(str(i):
     @sum(var(j):A(i,j)*x(j))<=b(i));
```

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

```
14]  data:
15]    H=2, 0, 0, 2;
16]    c=-2, -4;
17]    A=1, 1, -1, 0, 0, -1;
18]    b=1, 0, 0;
19]  enddata
20]end
```

第$2\sim 7$行是变量说明，定义向量b, c, x和矩阵H, A. 第9行说明变量无限制。第10行是目标函数，第$11\sim 12$行是约束函数。第$13\sim 18$是数据集合。对于其他的二次规划问题，只需更改相应的数据集合即可。

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

其计算结果为

```
Local optimal solution found at step:   4
Objective value:                -3.000000

Variable          Value       Reduced Cost
   X( 1)      0.1130181E-06      0.0000000
   X( 2)      0.9999999          0.0000000
```


最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

5.4. 最优化问题的应用—曲线拟合问题

已知一个量y依赖于另一个量x. 现收集有数据如下：

x	0.0	0.5	1.0	1.5	1.9	2.5	3.0	3.5	4.0	4.5
y	1.0	0.9	0.7	1.5	2.0	2.4	3.2	2.0	2.7	3.5

x	5.0	5.5	6.0	6.6	7.0	7.6	8.5	9.0	10.0
y	1.0	4.0	3.6	2.7	5.7	4.6	6.0	6.8	7.3

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

(1) 求拟合以上数据的直线$y = ax + b$, 目标为使y的各个观察值同按直线关系所预期的值的绝对偏差总和为最小；

(2) 求拟合以上数据的直线，目标为使y的观察值同预期值的最大偏差为最小；

(3) 求拟合以上数据的二次曲线$y = ax^2 + bx + c$, 分别用(1)和(2)两种目标。

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

解：(1) 该问题是不可微优化问题。求常数a, b使得绝对偏差总和达到最小，即

$$\min_{a,b} \sum_{i=1}^{n} |ax_i + b - y_i| .$$

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

相应的Lingo语言如下

```
model:
  sets:
    quantity/1..19/: x,y;
  endsets

  min=@sum(quantity: @abs(a*x+b-y));
   @free(a);
   @free(b);

```


最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

```
 data:
   x=0.0,0.5,1.0,1.5,1.9,2.5,3.0,3.5,4.0,4.5,
     5.0,5.5,6.0,6.6,7.0,7.6,8.5,9.0,10.0;
   y=1.0,0.9,0.7,1.5,2.0,2.4,3.2,2.0,2.7, 3.5,
     1.0,4.0,3.6,2.7,5.7,4.6,6.0,6.8,7.3;
 enddata
end
```

最优解为：$a = 0.6375, b = 0.5813,$ 即

$$y = 0.6375x + 0.58125.$$

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

访问主页
标题页
第 90 页 共 102 页
返 回
全屏显示
关 闭
退 出

(2) 其最优化问题为

$$\min_{a,b} \max_{1\le i\le n} |ax_i + b - y_i|,$$

相应的最优直线方程为:

$$y = 0.6246x - 0.3978.$$

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

(3) 相应的最优化问题为

$$\min_{a,b,c} \sum_{i=1}^{n} \left| a x_i^2 + b x_i + c - y_i \right| ,$$

和

$$\min_{a,b,c} \max_{1 \le i \le n} \left| a x_i^2 + b x_i + c - y_i \right| .$$

相应的最优解为：

$$y = 0.03382x^2 + 0.2940x + 0.9830,$$

和

$$y = 0.1250x^2 - 0.6250x + 2.4750.$$

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

6 实例分析— 飞行管理问题

飞行管理问题是1995年全国大学生数学建模竞赛A题.

6.1. 飞行管理问题

在约10,000米高空的某边长160公理的正方形区域内, 经常有若干架飞机作水平飞行. 区域内每架飞机的位置和速度向量均由计算机记录其数据, 以便进行飞行管理. 当一架飞机欲进入该区域的飞机到达区域的边缘时, 记录其数据后, 要立即计算并判断是否会与区域内的飞机发生碰撞. 如果会碰撞, 则应计算如何调整各架(包括新进入的)飞机飞行的方向角, 以避免碰撞. 现假定条件如下:

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

1) 不碰撞的标准为任意两架飞机的距离大于8公里;

2) 飞机飞行方向角调整的幅度不应超过30度;

3) 所有飞机飞行速度均为每小时800公里;

4) 进入该区域的飞机在达到区域边缘时, 与区域内飞机的距离应在60公里以上;

5) 最多需考虑6架飞机;

6) 不必考虑飞机离开此区域后的状况.

请你对这个避免碰撞的飞行管理问题建立数学模型, 列出计算步骤, 对以下数据进行计算(方向角误差不超过0.01度), 要求飞机飞行方向角调整的幅度尽量小.

设该区域4个顶点的座标为$(0,0)$, $(160,0)$, $(160,160)$, $(0,160)$.

记录数据如表5.6.1所示。

表 5.6.1 飞行数据表

飞机编号	横座标 X	纵座标 Y	方向角 (度)
1	150	140	243
2	85	85	236
3	150	155	220.5
4	145	50	159
5	130	150	230
新进入	0	0	52

注: 方向角指飞行方向与X轴正向的夹角.

试根据实际应用前景对你的模型进行评价与推广.

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

6.2. 数学模型的建立

设$(x_{i0}, y_{i0}, \theta_{i0})$为第$i$架飞机的初始位置和初始方位角, $\Delta\theta_i$为第i架飞机方位角的改变量, 调整后的方位角为

$$\theta_i = \theta_{i0} + \Delta\theta_i, \quad i = 1, 2, \cdots, 6.$$

根据相对运动原理, 两架飞机的相对速度方向为$(v(\cos\theta_i - \cos\theta_j), v(\sin\theta_i - \sin\theta_j))$, 在$t$时刻的相对位置为

$$(x_{i0} - x_{j0} + vt(\cos\theta_i - \cos\theta_j), y_{i0} - y_{j0} + vt(\sin\theta_i - \sin\theta_j)).$$

令$vt = l$, 则有

$$\begin{aligned} c_{ij}(\theta, l) &= (x_{i0} - x_{j0} + l(\cos\theta_i - \cos\theta_j))^2 \\ &+ (y_{i0} - y_{j0} + l(\sin\theta_i - \sin\theta_j))^2, \end{aligned}$$

其中$\theta = (\theta_1, \theta_2, \cdots, \theta_6)$.

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

因此飞行管理问题归纳为

$$\min \quad \sum_{i=1}^{6} [\Delta\theta_i]^2, \tag{6.1}$$

$$s.t. \quad c_{ij}(\theta, l) \geq 64 \;\; 1 \leq i, j \leq 6, \; i \neq j, \tag{6.2}$$

$$|\Delta\theta_i| \leq 30^0 \;\; i = 1, 2, \cdots, 6, \tag{6.3}$$

这是一个非线性规划问题, 但约束中含有参数l, 根据题意, 其范围是$0 \leq l \leq 160\sqrt{2}$, 这实际上是一个参数规划问题.

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

6.3. 问题的求解

如何利用我们前面讲过的方法求解问题(6.1)–(6.3)呢? 一种简单而又直观的方法是将参数l离散化, 得到

$$\min \quad \sum_{i=1}^{6} [\Delta\theta_i]^2 \,, \tag{6.4}$$

$$s.t. \quad c_{ij}(\theta, l_k) \geq 64, \;\; 1 \leq i,j \leq 6, \; i \neq j, \; k = 1, 2, \cdots, m, \tag{6.5}$$

$$|\Delta\theta_i| \leq 30^0, \;\; i = 1, 2, \cdots, 6. \tag{6.6}$$

我们通过求解(6.4)–(6.6)来得到(6.1)–(6.3)的最优解.

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优. . .
实例分析— 飞行管理问题

但这又出现新的问题: (1) 如何确定r和l_k的值? (2) 由问题(6.4)–(6.6) 得到的最优解能否满足问题(6.1)–(6.3)的约束条件? 对于一般情况, 这两个问题是较难解决的, 但对于飞行管理问题, 我们通过分析, 还是能够得到解决的.

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优. . .
实例分析— 飞行管理问题

当任意两架飞机在飞行中达到最近距离时, 其参数l为

$$l = -\frac{(x_{i0} - x_{j0})(\cos\theta_i - \cos\theta_j) + (y_{i0} - y_{j0})(\sin\theta_i - \sin\theta_j)}{(\cos\theta_i - \cos\theta_j)^2 + (\sin\theta_i - \sin\theta_j)^2}.$$

通过计算, 若不改变方位角, 飞机会在区域内有两处会发生碰撞(即不满足$c_{ij}(\theta, l) \geq 64$). 当$c_{ij}(\theta, l)$达到最小时, 其参数为

$$l = 108.4009 \quad \text{和} \quad l = 99.2123$$

时. 因此可先取

$$r = 2, \quad l_1 = 108.4009 \quad \text{和} \quad l_2 = 99.2123.$$

将上述参数代入问题(6.4)–(6.6), 用约束最优化方法求解问题(6.4)–(6.6), 其最优解为

$$\Delta\theta^{(1)} = (0, 0, 1.8879, 0, 0, 1.8809).$$

但此时, 将$\Delta\theta^{(1)}$代入问题(6.1)–(6.3)的约束条件时, 其约束条件并不能满足. 当$c_{ij}(\theta, l)$达到最小时, 其参数为

$$l = 108.3266 \qquad \text{和} \qquad l = 96.5197,$$

因此再取$l_1 = 108.3266$, $l_2 = 96.5197$代入问题(6.4)–(6.6), 求解得到

$$\Delta\theta^{(2)} = (0.0001, 0, 2.1143, -0.4738, 1.6550).$$

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题

但仍不能满足约束条件, 此时参数为

$$l = 108.2841 \qquad \text{和} \qquad l = 96.6512,$$

因此再取$l_1 = 108.2841$, $l_2 = 96.6512$, 第三次求解问题(6.4)–(6.6), 得到

$$\Delta\theta^{(3)} = (0, 0, 2.1203, -0.4701, 0, 1.6492).$$

其结果满足问题(6.1)–(6.3)的约束条件, 因此我们将$\Delta\theta^{(3)}$作为飞行管理问题的最优解, 其总角度改变量为4.2399.

最优化问题的数学模型
一维搜索
求解无约束问题的下降算法
惩罚函数法
用LINGO软件包求解最优...
实例分析— 飞行管理问题