4 无约束优化计算方法

4.1 引言

无约束优化问题的一般形式：

$$\min f(x) \quad x \in R^n$$

非梯度算法： 随机搜索法，坐标轮换法，**Powell**法，模式搜索法，单纯形法；

梯 度 算 法： 梯度法，共轭梯度法，牛顿法，修正牛顿法，变尺度法。

性质：

（1）从初始点开始迭代；

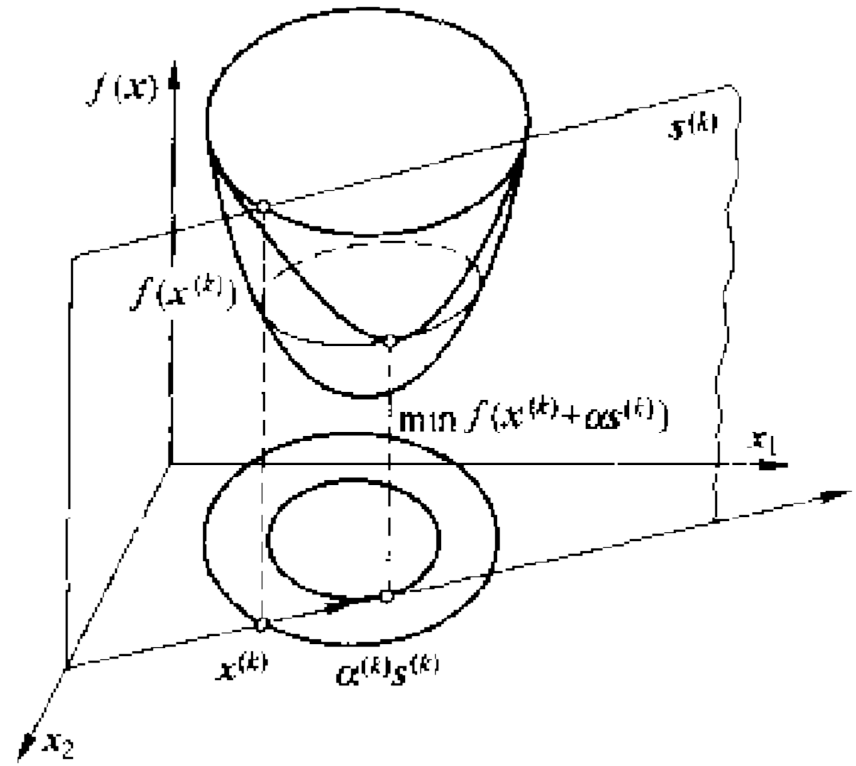
（2）在迭代点邻域内产生新点的函数构造不同；

（3）检验是否最优解的方法不同。

4.2 单变量优化计算方法

一维优化搜索；

$\alpha^{(k)}$：最优步长因子；



解析法：

$$\alpha^{(k)} = -\frac{[\nabla f(x^{(k)})]^T s^{(k)}}{[s^{(k)}]^T H(x^{(k)}) s^{(k)}}$$

数值迭代法：

分数法，格点法，黄金分割法，二次插值法，三次插值法。

4.2.1 搜索区间的确定

一维搜索分两步进行：

（1）在搜索方向上确定最优点所在的区间；

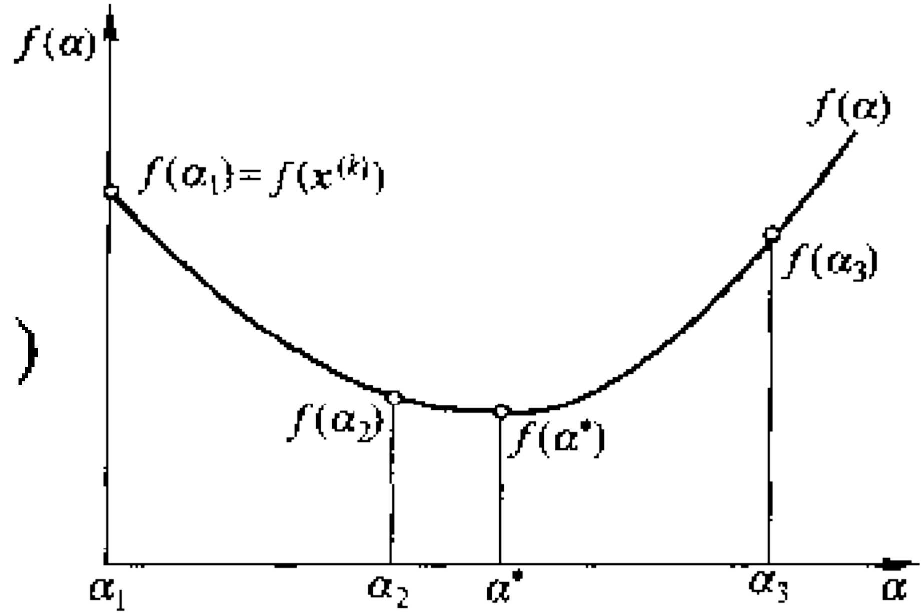
（2）在该区间内找到最优点。

对于任意的α_2：

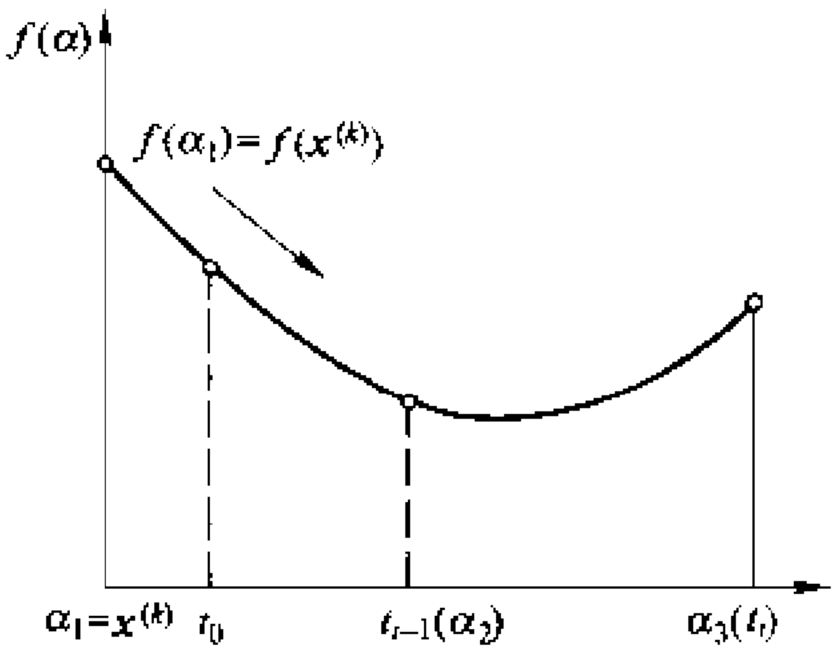
$$\alpha_1 < \alpha_2 < \alpha_3$$

$$f(\alpha_1) > f(\alpha_2) < f(\alpha_3)$$

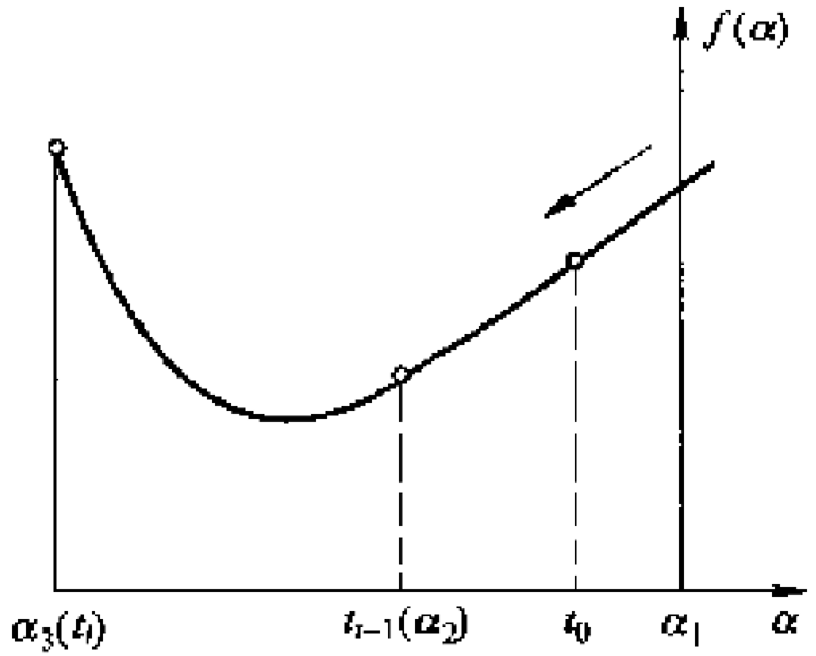
高 ➡ 低 ➡ 高



4.2.1 搜索区间的确定



正向搜索



反向搜索

例题

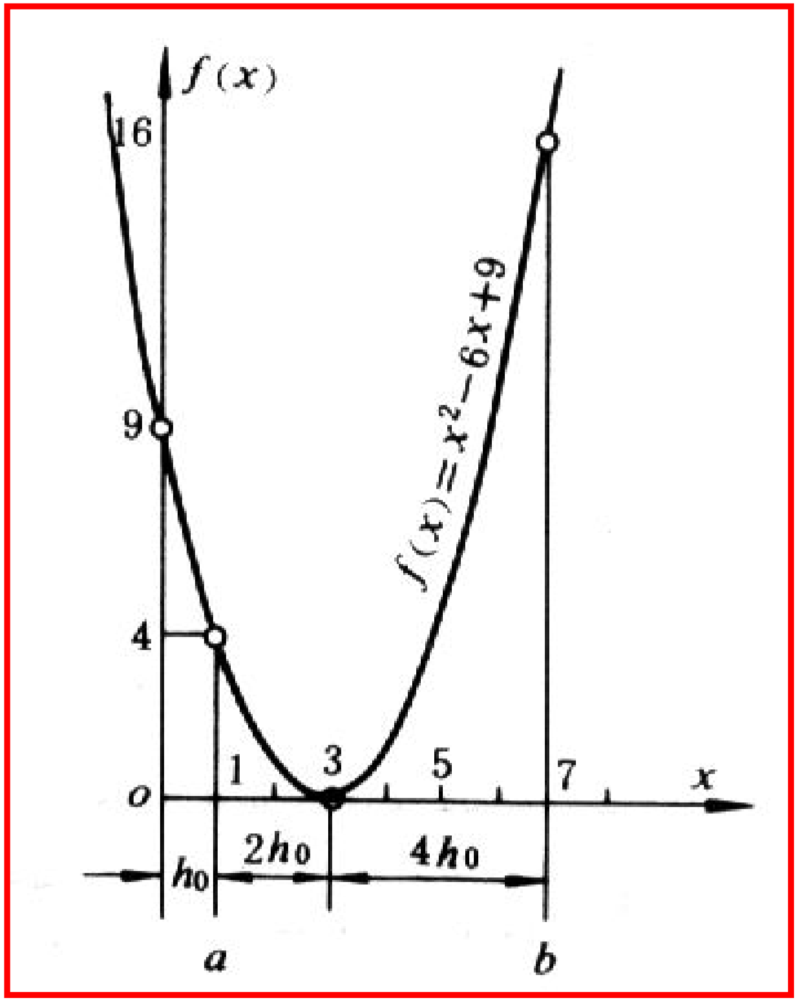
试用进退法确定函数

$$f(x)=x^2-6x+9$$

的一维优化搜索区间[a，b]。

设初始点$x_1=0$，$f(x)=x^2-6x+9$

初始步长$h_0=1$。



解：计算过程如下:

$h \leftarrow h_0=1$

$x_2 \leftarrow x_1+h=1$

$y_1=f(x_1)=9$,$y_2=f(x_2)=4$

由于用$y_2<y_1$，作前进搜索：

$h \leftarrow 2h=2$

$x_3 \leftarrow x_2+h=3$　$y_3=f(x_3)=0$

比较y_2，y_3有$y_2>y_3$，再做前进搜索

$x_1 \leftarrow x_2=1$，$y_1 \leftarrow y_2=4$

$x_2 \leftarrow x_3=3$，$y_2 \leftarrow y_3=0$

$h \leftarrow 2h=4$

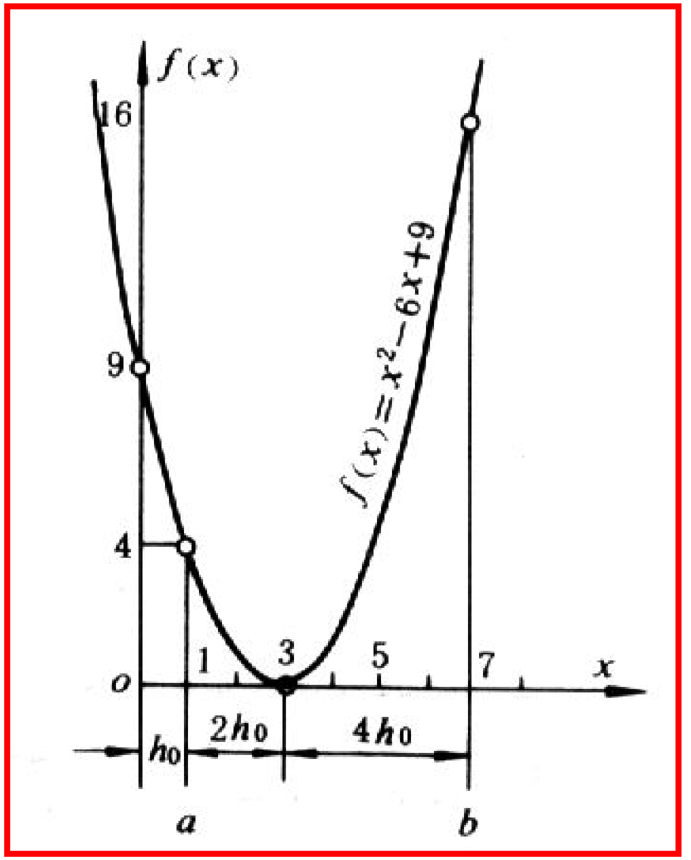
$x_3 \leftarrow x_2+h=7$，$y_3=F(x_3)=16$

在比较y_2，y_3有$y_2<y_3$，则取

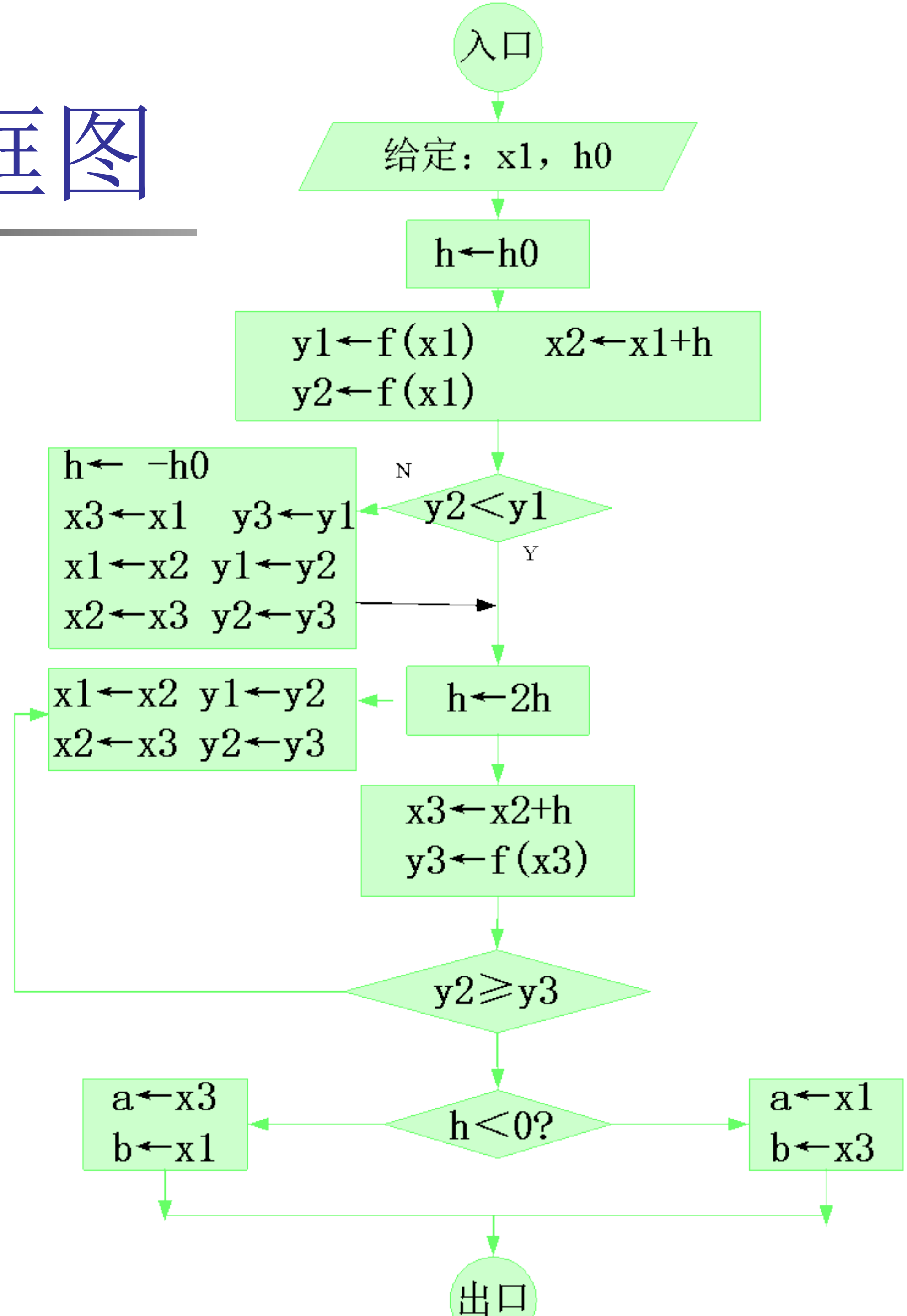
$a \leftarrow x_1=1$，$b \leftarrow x_3=7$

搜索区间a，b为[1，7]

搜索过程见下图

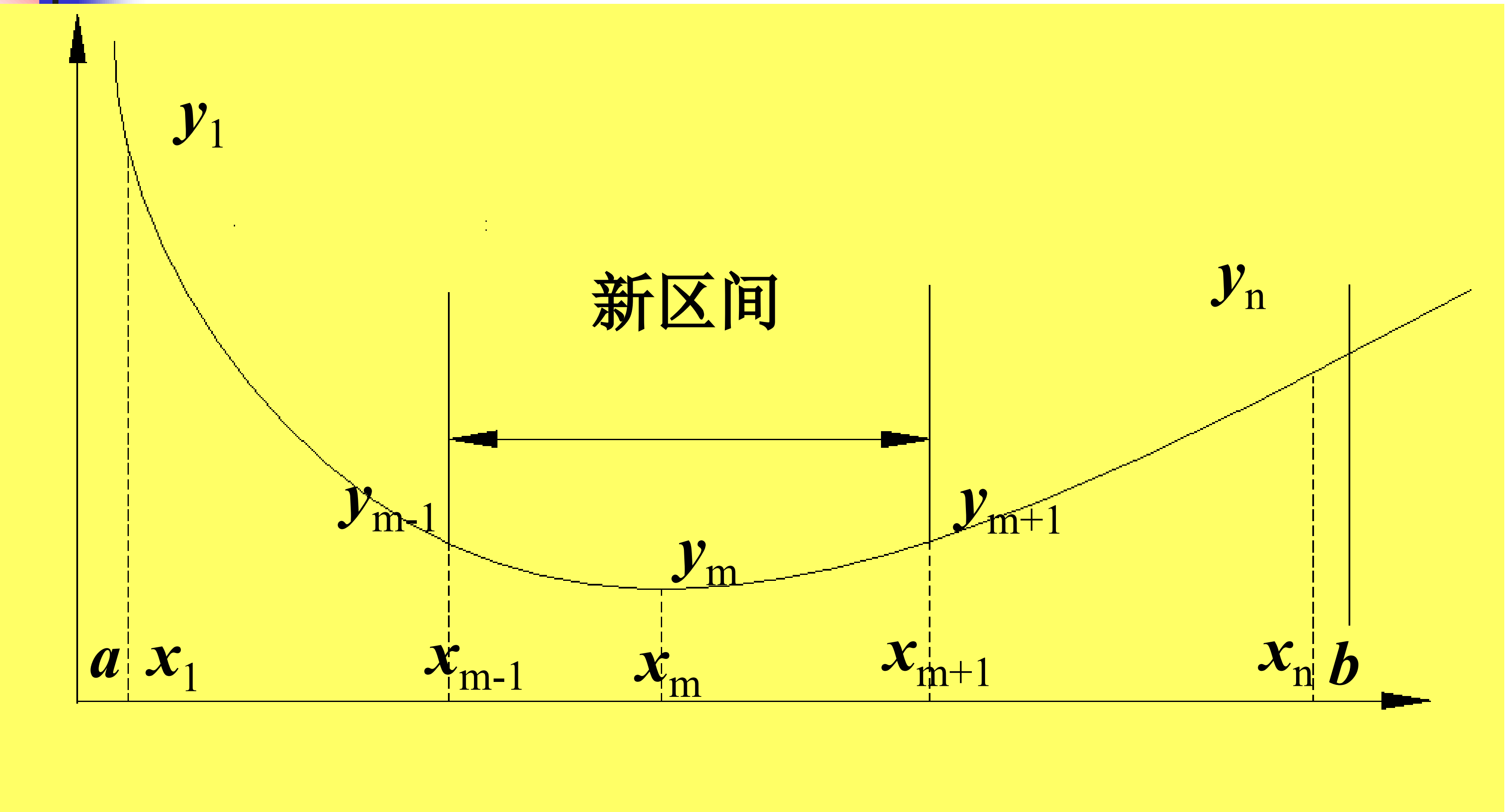


程序框图



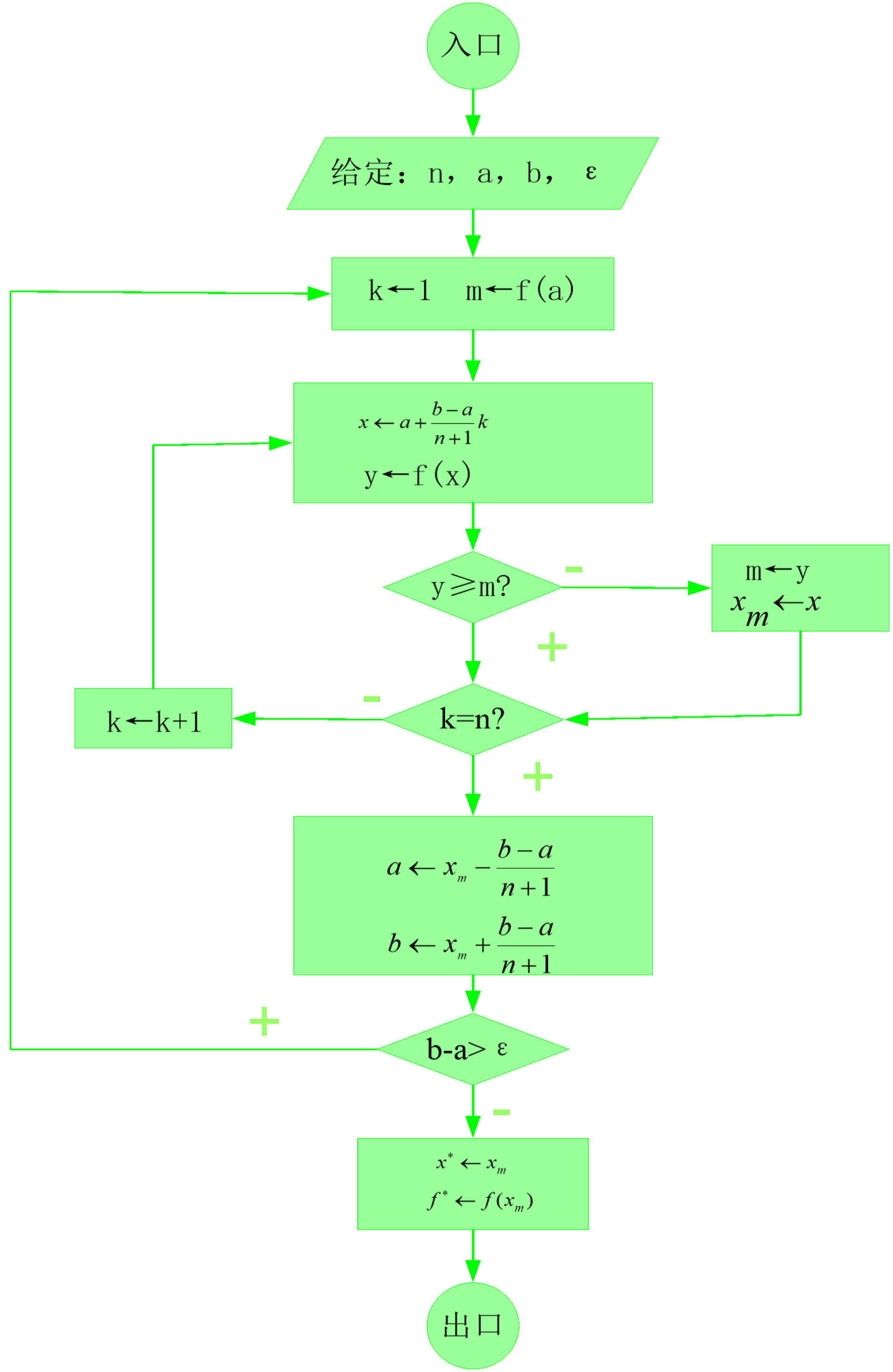
入口
给定：x1，h0
h←h0
y1←f(x1)
x2←x1+h
y2←f(x1)
y2<y1
N
Y
h← −h0
x3←x1 y3←y1
x1←x2 y1←y2
x2←x3 y2←y3
h←2h
x1←x2 y1←y2
x2←x3 y2←y3
x3←x2+h
y3←f(x3)
y2≥y3
h<0?
a←x3
b←x1
a←x1
b←x3
出口

格点法



格点法的区间缩短

格点法流程图


入口
给定：n，a，b，ε
k←1 m←f(a)
$x \leftarrow a + \frac{b-a}{n+1}k$
y←f(x)
y≥m?
-
m←y
$x_m \leftarrow x$
+
k=n?
-
k←k+1
+
$a \leftarrow x_m - \frac{b-a}{n+1}$
$b \leftarrow x_m + \frac{b-a}{n+1}$
b-a>ε
+
-
$x^* \leftarrow x_m$
$f^* \leftarrow f(x_m)$
出口

例题：用格点法求一维目标函数 $f(x)=4x^2-12x+10$ 的最优解。给定搜索区间[a，b]为[1，2.2]，迭代精度ε=0.2，内分点数n=4。

解：计算区间端点的函数值

f(a)=2　　　　f(b)=2.96

$$x_k=a+\frac{b-a}{n+1}k \qquad (k=1,2,\ldots,n)$$

由上式确定四个内分点的位置，并计算其函数值，计算结果见下页表。其中最小的函数值为：

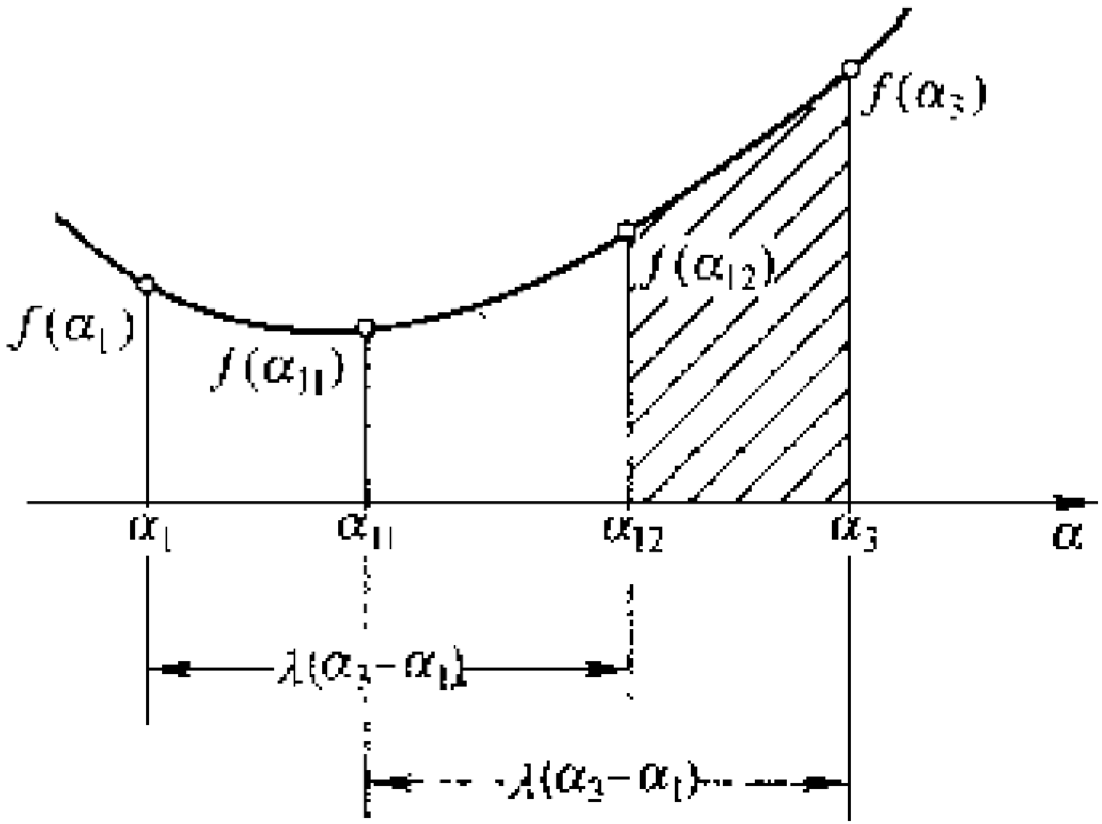
$$y_m^{(1)}=y_2=1.0016$$

对应的点

$$x_m^{(1)}=1.48$$

区间缩短次数	x_k	y_k	x_m	a	b	b-a
第一次	1.24 1.48 1.72 1.96	1.2704 1.0016 1.1936 1.846	1.48	1.24	1.72	0.48
第二次	1.336 1.432 1.528 1.624	1.107584 1.018496 1.003136 1.061504	1.528	1.432	1.624	0.192

黄金分割法



$f(\alpha_1)$
$f(\alpha_{11})$
$f(\alpha_{12})$
$f(\alpha_3)$
α_1
α_{11}
α_{12}
α_3
α
$\lambda(\alpha_3-\alpha_1)$
$\lambda(\alpha_3-\alpha_1)$

黄金分割法

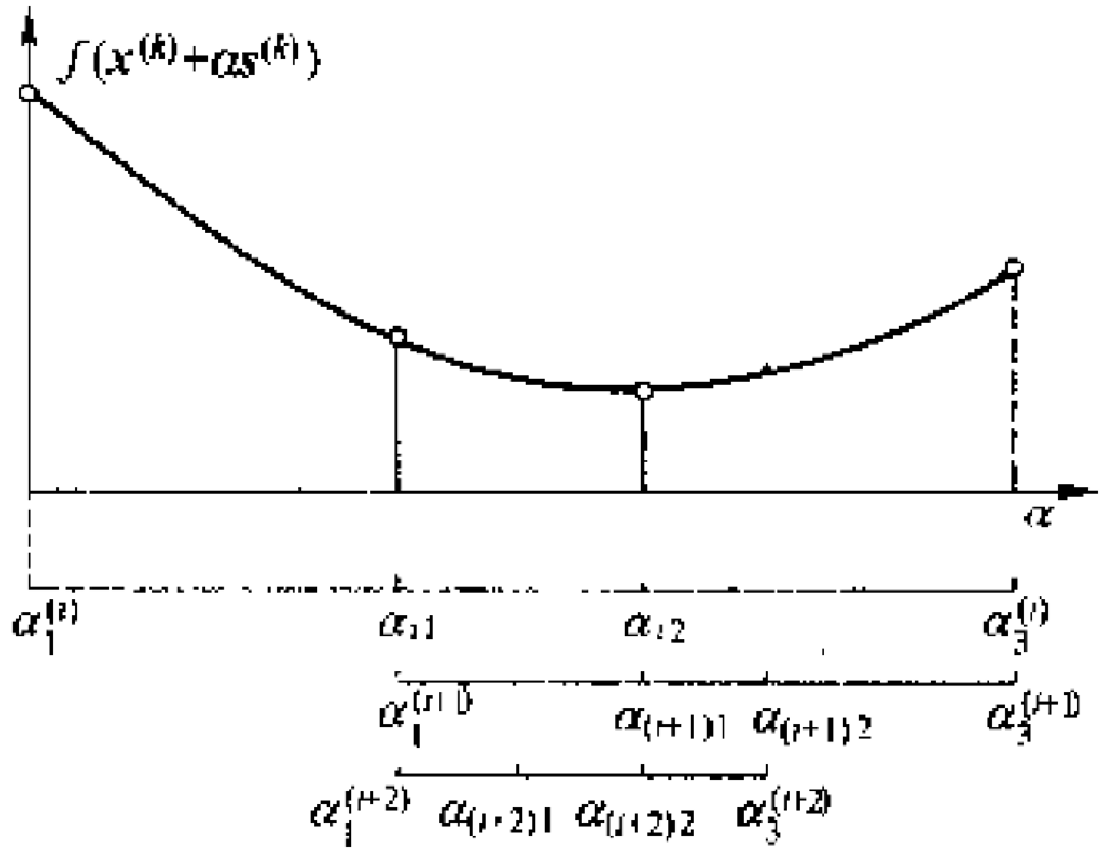


图 4-7　0. 618 分割法

例题： 试用黄金分割法求目标函数 $f(x)=x^2-6x+9$ 的最优解。给定初始区间[1，7]，收敛精度ε=0.4。

解：第一次区间缩短计算过程：

计算两内点及对应函数值：

$X_1=a+0.382(b-a)=3.292$　　$y_1=f(x_1)=0.085264$

$X_2=a+0.618(b-a)=4.708$　　$y_2=f(x_2)=2.917264$

作数值比较，可见$y_1<y_2$,再做置换：

$$a^{(1)} \leftarrow a=1 \qquad b^{(1)} \leftarrow x_2=4.708$$

用终止准则判断

$$b^{(1)}-a^{(1)}=4.708-1=3.708>\varepsilon$$

为第二次区间缩短做准备，做置换：

$x_2 \leftarrow x_1 = 3.292$ ， $y_2 \leftarrow y_1 = 0.085264$

$$x_1 = a^{(1)} + 0.382(b^{(1)} - a^{(1)}) = 2.416456$$

$$y_1 = f(x_1) = 0.340524$$

各次缩短区间的计算数据见下页表。第六次区间缩短的端点：

$$a^{(6)} = 2.750917 \qquad b^{(6)} = 3.085305$$

$$b^{(6)} - a^{(6)} = 0.334388 < \varepsilon$$

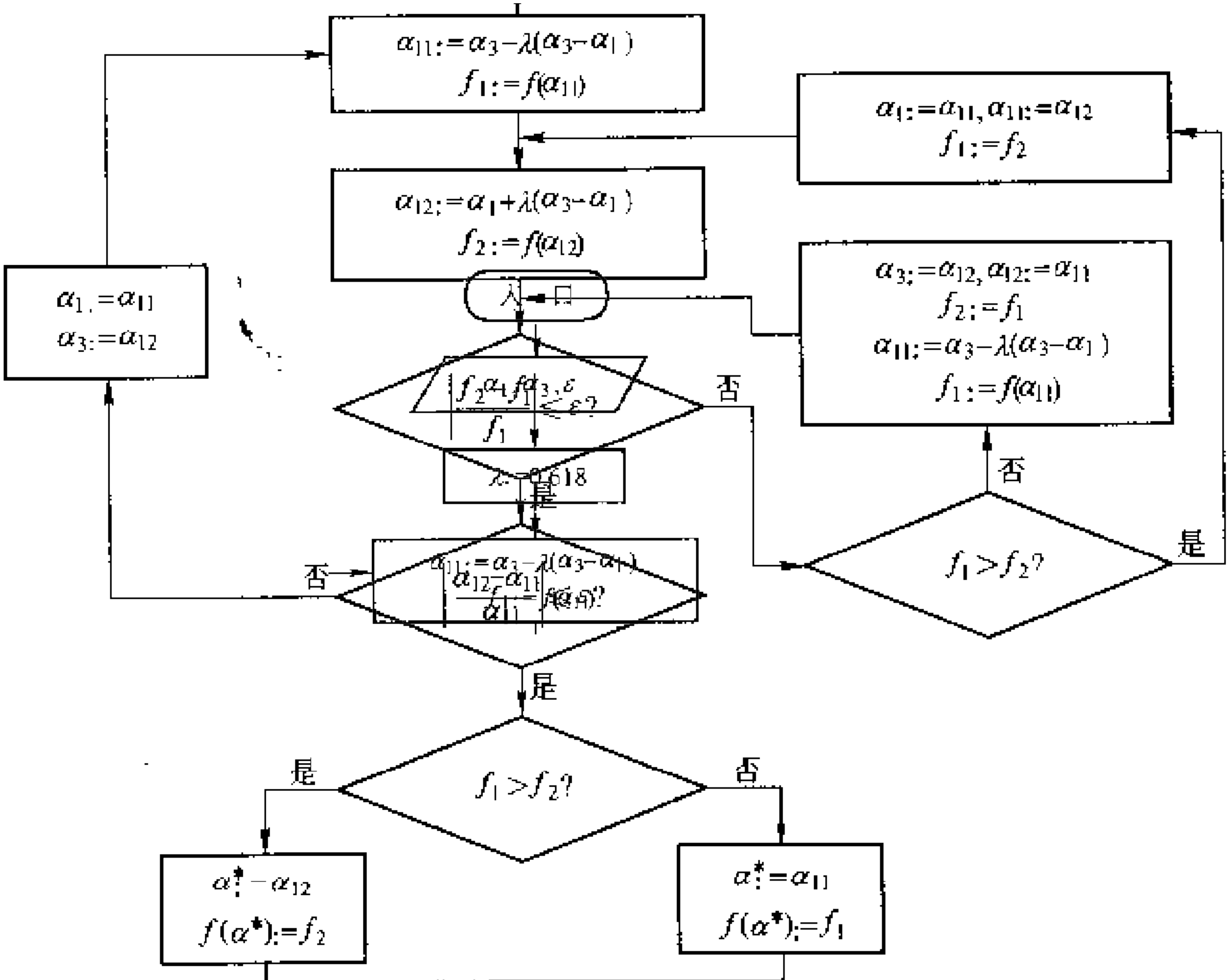
满足精度要求，终止计算。取最优解为

$$x^* = \frac{1}{2}(a^{(6)} + b^{(6)}) = 2.91811$$

$$y^* = f(x^*) = 0.00670$$

黄金分割法例题计算数据

区间缩短次数	a	b	x1	x2	y1	y2
原区间	1	7	3.292	4.708	0.085264	2.917264
1	1	4.708	2.416456	3.292	0.340524	0.085264
2	2.416456	4.708	3.292	3.832630	0085264	0.693273
3	2.416456	3.832630	2.957434	3.292	0.001812	0.085264
4	2.416456	3.292	2.750917	2.957434	0.062044	0.001812
5	2.750917	3.292	2.957434	3.085305	0.001812	0.007277
6	2.750917	3.085305	2.878651	2.957434	0.014725	0.001812



$\alpha_{11}:=\alpha_3-\lambda(\alpha_3-\alpha_1)$
$f_1:=f(\alpha_{11})$
$\alpha_1:=\alpha_{11}, \alpha_{11}:=\alpha_{12}$
$f_1:=f_2$
$\alpha_{12}:=\alpha_1+\lambda(\alpha_3-\alpha_1)$
$f_2:=f(\alpha_{12})$
$\alpha_1:=\alpha_{11}$
$\alpha_3:=\alpha_{12}$
$\alpha_3:=\alpha_{12}, \alpha_{12}:=\alpha_{11}$
$f_2:=f_1$
$\alpha_{11}:=\alpha_3-\lambda(\alpha_3-\alpha_1)$
$f_1:=f(\alpha_{11})$
否
$\lambda:=0.618$
是
否
$f_1>f_2$?
是
否
是
$f_1>f_2$?
是
否
$\alpha^*:=\alpha_{12}$
$f(\alpha^*):=f_2$
$\alpha^*:=\alpha_{11}$
$f(\alpha^*):=f_1$

二次插值法

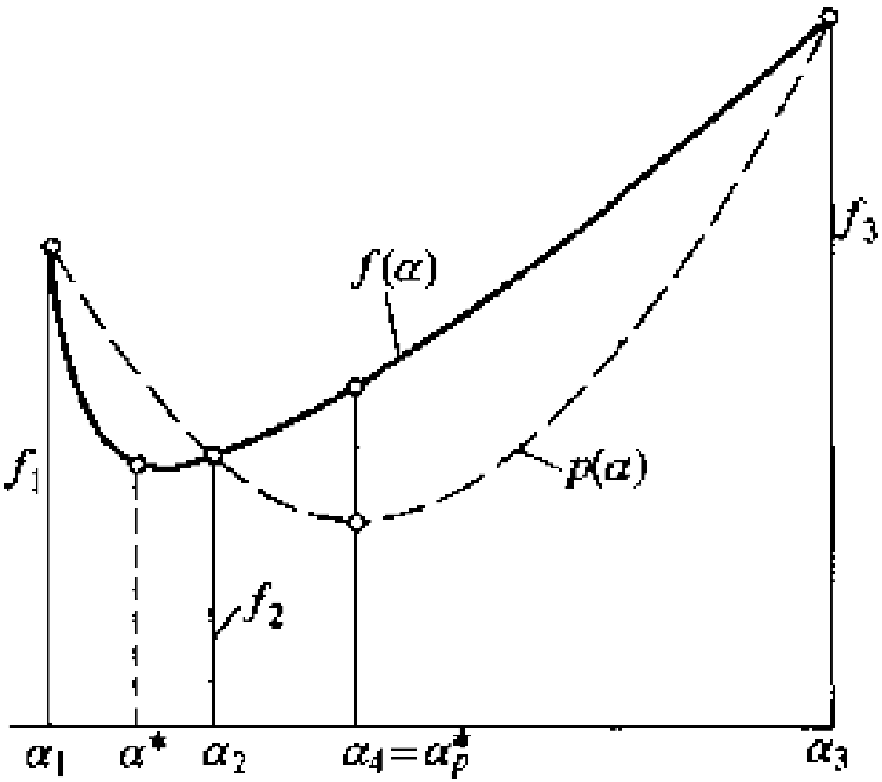


图 4-9　二次插值法原理图

$$f(x^{(k+1)}) = f(x^{(k)} + \alpha s^{(k)}) = f(\alpha)$$

$$p(\alpha) = a + b\alpha + c\alpha^2$$

$$\alpha_p^* = -\frac{b}{2c}$$

$$\left.\begin{aligned} p(\alpha_1) &= a + b\alpha_1 + c\alpha_1^2 = f_1 \\ p(\alpha_2) &= a + b\alpha_2 + c\alpha_2^2 = f_2 \\ p(\alpha_3) &= a + b\alpha_3 + c\alpha_3^2 = f_3 \end{aligned}\right\}$$

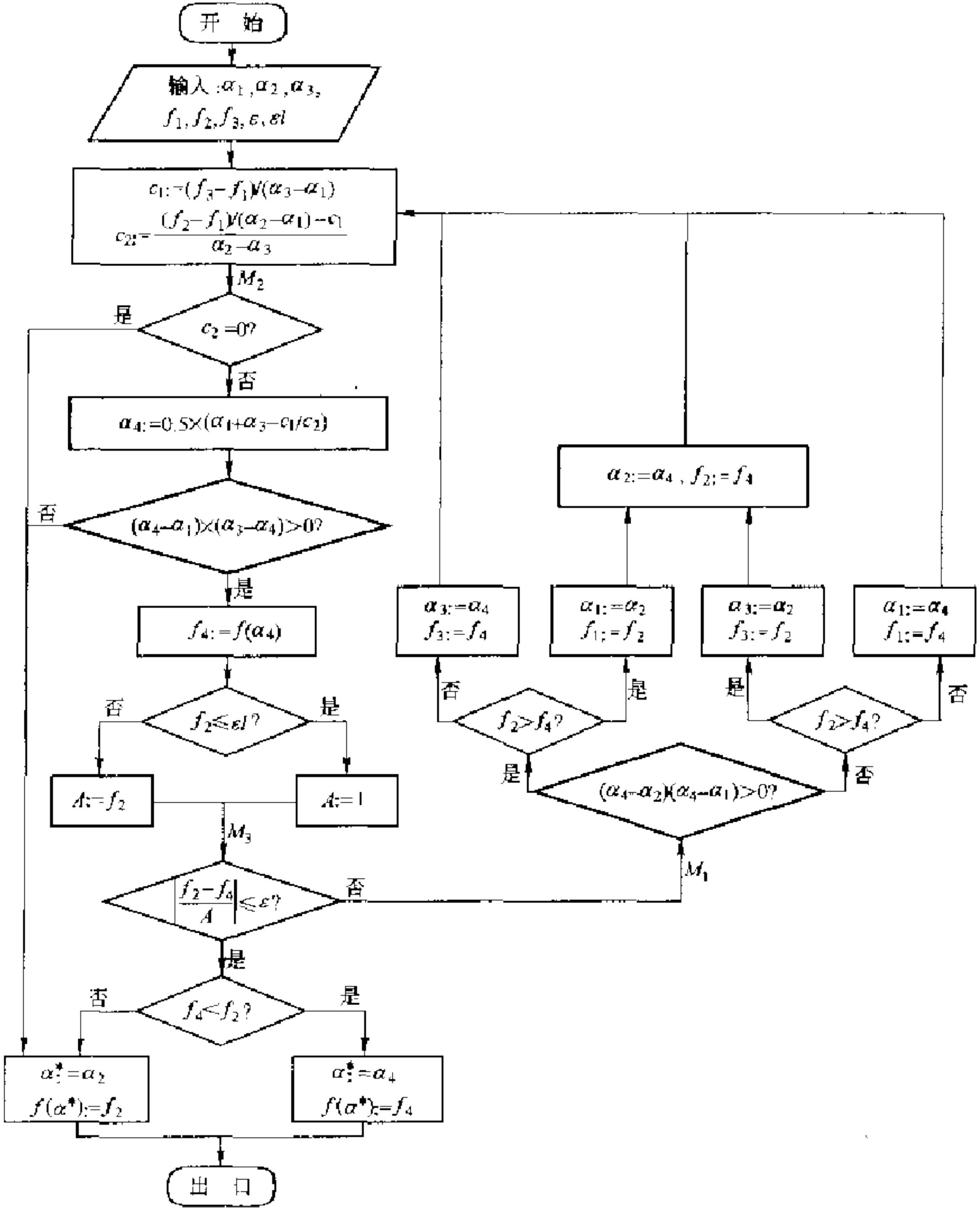
$$\alpha_p^* = -\frac{b}{2c} = \frac{1}{2}\frac{(\alpha_2^2 - \alpha_3^2)f_1 + (\alpha_3^2 - \alpha_1^2)f_2 + (\alpha_1^2 - \alpha_2^2)f_3}{(\alpha_2 - \alpha_3)f_1 + (\alpha_3 - \alpha_1)f_2 + (\alpha_1 - \alpha_2)f_3}$$

$$c_1 = (f_3 - f_1)/(\alpha_3 - \alpha_1)$$

$$c_2 = [(f_2 - f_1)/(\alpha_2 - \alpha_1) - c_1]/(\alpha_2 - \alpha_3)$$

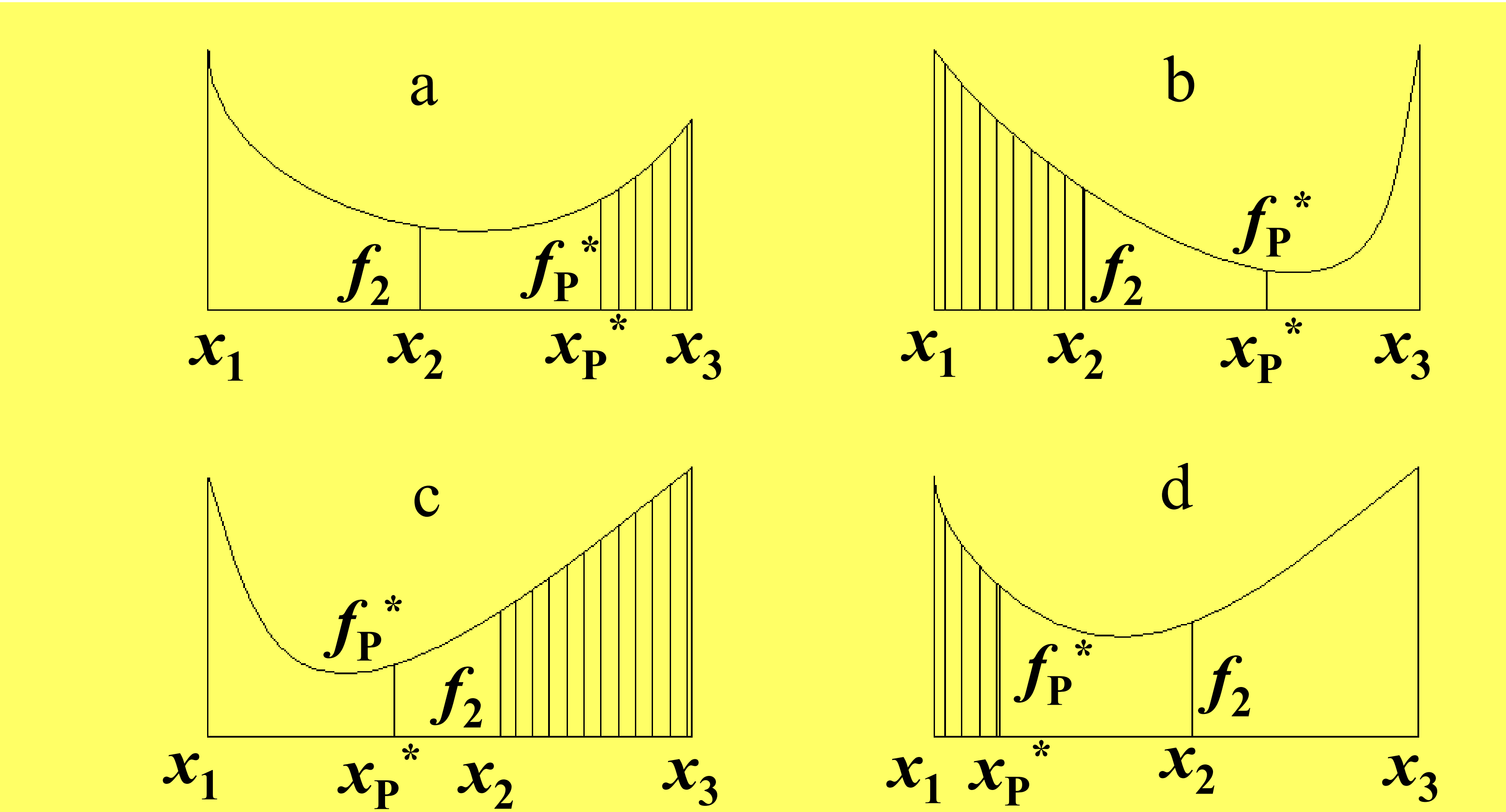
$$\alpha_p^* = 0.5(\alpha_1 + \alpha_3 - c_1/c_2)$$

$$\left|\frac{f_2 - f_4}{f_2}\right| \leqslant \varepsilon$$



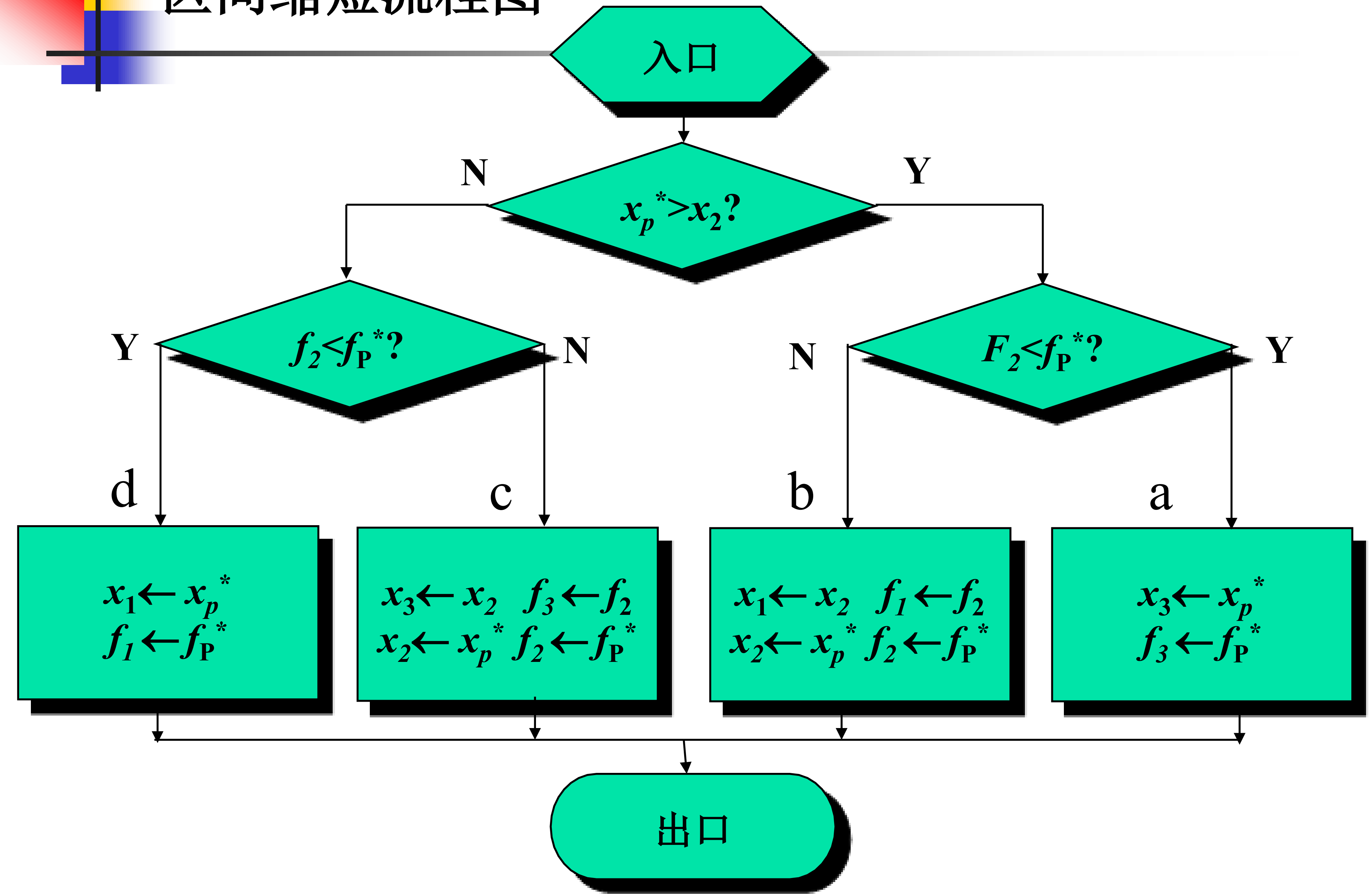
开 始
输入：$\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3$, $f_1,f_2,f_3,\varepsilon,\varepsilon l$
$c_1:=(f_3-f_1)/(\alpha_3-\alpha_1)$
$c_2:=\dfrac{(f_2-f_1)/(\alpha_2-\alpha_1)-c_1}{\alpha_2-\alpha_3}$
M_2
是
$c_2=0$?
否
$\alpha_4:=0.5\times(\alpha_1+\alpha_3-c_1/c_2)$
否
$(\alpha_4-\alpha_1)\times(\alpha_3-\alpha_4)>0$?
是
$f_4:=f(\alpha_4)$
否
$f_2\leq\varepsilon l$?
是
$A:=f_2$
$A:=1$
M_3
$\left|\dfrac{f_2-f_4}{A}\right|\leq\varepsilon$?
否
是
否
$f_4<f_2$?
是
$\alpha^*:=\alpha_2$ $f(\alpha^*):=f_2$
$\alpha^*:=\alpha_4$ $f(\alpha^*):=f_4$
出 口
$\alpha_2:=\alpha_4$, $f_2:=f_4$
$\alpha_3:=\alpha_4$ $f_3:=f_4$
$\alpha_1:=\alpha_2$ $f_1:=f_2$
$\alpha_3:=\alpha_2$ $f_3:=f_2$
$\alpha_1:=\alpha_4$ $f_1:=f_4$
否
$f_2>f_4$?
是
是
$f_2>f_4$?
否
是
$(\alpha_4-\alpha_2)(\alpha_4-\alpha_1)>0$?
否
M_1

区间的缩短分四种情况



a
f_2
f_P^*
x_1
x_2
x_P^*
x_3
b
f_P^*
f_2
x_1
x_2
x_P^*
x_3
c
f_P^*
f_2
x_1
x_P^*
x_2
x_3
d
f_P^*
f_2
x_1
x_P^*
x_2
x_3

区间缩短流程图


入口
$x_p^* > x_2$?
N
Y
$f_2 < f_P^*$?
Y
N
$F_2 < f_P^*$?
N
Y
d
c
b
a
$x_1 \leftarrow x_p^*$
$f_1 \leftarrow f_P^*$
$x_3 \leftarrow x_2 \quad f_3 \leftarrow f_2$
$x_2 \leftarrow x_p^* \quad f_2 \leftarrow f_P^*$
$x_1 \leftarrow x_2 \quad f_1 \leftarrow f_2$
$x_2 \leftarrow x_p^* \quad f_2 \leftarrow f_P^*$
$x_3 \leftarrow x_p^*$
$f_3 \leftarrow f_P^*$
出口

例题 试用二次插值法求函数 $f(x)=(x-3)^2$ 的最优解，初始区间为[1，7]，精度ε=0.01。

解： **(1)初始插值节点：**

x1=a=1,　　f1=f(x1)=4

x2=0.5(a+b)=4,　　f2=f(x2)=1

x3=b=7,　　f3=f(x3)=16

(2)计算插值函数的极小点与极小值

$$c_1=\frac{f_3-f_1}{x_3-x_1}=2$$

$$x_p^{*(1)}=\frac{1}{2}(x_1+x_3-\frac{c_1}{c_2})=3$$

$$c_2=\frac{(f_2-f_1)/(x_2-x_1)-c_1}{x_2-x_3}=1$$

$$f_p^{*(1)}=f(x_p^{*(1)})=0$$

(3)缩短区间

因有 $x_p^{*(1)} < x_2$ $f_2 > f_p^{*(1)}$，故有

x1=1, f1=4

x3←x2=4, f3=1

x2← $x_p^{*(1)}$ =3, f2=0

(4)重复步骤(2)

c1=-1, c2=1

$x_p^{*(2)} = 3$ $f_p^{*(2)} = 0$

(5)检查终止条件

$$\left| x_p^{*(2)} - x_p^{*(1)} \right| = |3-3| = 0 < \varepsilon$$

获得最优解 $x^* = x_p^{*(2)} = 3$ $f^* = f_p^{*(1)} = 0$

例题 用二次差值法求 $f(x)=e^{x+1}-5(x+1)$ 的最优解。初始区间端点为a=-0.5，b=2.5。精度要求ε=0.005。

解:

(1)初始差值结点

x1=a=-0.5,　　　f1=f(x1)=-0.851279

x2=0.5(a+b)=1,　　　f2=f(x2)=-2.610944

x3=b=2.5,　　　f3=f(x3)=15.615452

(2)计算 $x_p^{*(1)}$ 与 $f_p^{*(1)}$

c1=5.488910,　　　c2=4.441347

$$x_p^{*(1)}=\frac{1}{2}(x_1+x_3-\frac{c_1}{c_2})=0.382067$$

(3)缩短区间

因有 $x_p^{*(1)} < x_2$， $f_2 > f_p^{*(1)}$ 故取

x1=-0.5, f1=-0.851279

x2=0.382067, f2=-20927209

x3=1, f3=-2.610944

(4)对新区间重复步骤(2)

c1=-1.17311, c2=1.910196

$x_p^{*(2)} = 0.557065$ $f_p^{*} = -3.040450$

(5)检查终止条件

$$\left|x_p^{*(2)} - x_p^{*(1)}\right| = \left|0.557065 - 0.382067\right| = 0.174998 > \varepsilon$$

未满足终止条件，返回步骤（3）。

计算结果表

计算次数	1	2	3	4	5
x_1	-0.5	-0.5	0.382067	0.557065	0.593226
x_2	1.0	0.382067	0.557065	0.593226	0.605217
x_3	2.5	1.0	1.0	1.0	1.0
f_1	-0.851279	-0.851279	-2.927209	-3.040450	-3.046534
f_2	-2.610944	-2.927209	-3.040450	-3.046534	-3.047145
f_3	15.61545	-2.610944	-2.610944	-2.610944	-2.610944
c_1	5.488910	-1.17311	0.511811	0.969682	1.070840
c_2	4.441347	1.910196	2.616433	2.797449	2.841548
x^*_p	0.382067	0.557065	0.593226	0.605217	0.608188
f^*_p	-2.927209	-3.040450	-3.046534	-3.047145	-3.047188
$\left\|x_p^{*(k)} - x_p^{*(k-1)}\right\|$		0.174998	0.036161	0.011991	0.002971

经五次差值计算后，得

$$\left|x_p^{*(5)} - x_p^{*(4)}\right| = 0.002971 < \varepsilon$$

得最优解

$$x^* = x_p^{*(5)} = 0.608188$$

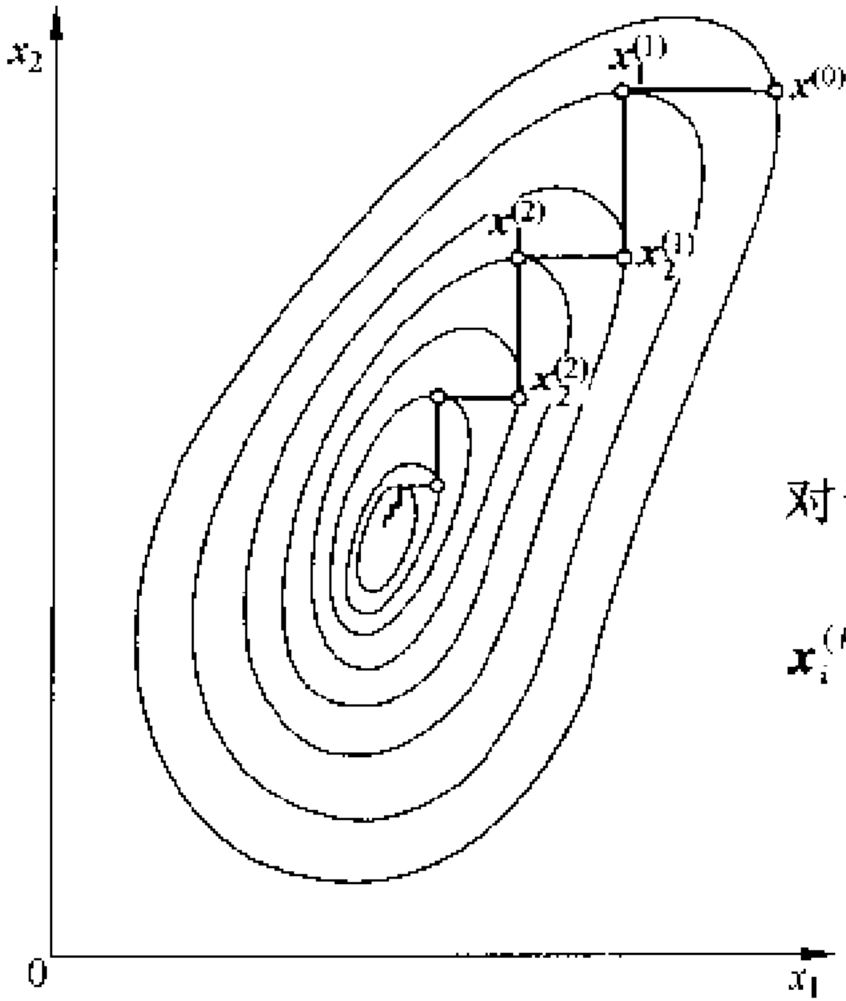
$$f^* = f_p^{*(5)} = -3.047188$$

几种方法的比较

- 格点法的结构及程序很简单，但效率偏低；
- 黄金分割法的结构简单，使用可靠，但效率也不高；
- 格点法和黄金分割法适于低维优化问题中的一维搜索；
- 二次插值法及三次插值法的搜索效率较高，收敛速度快；
- 三次插值法的效率更高于二次插值法。在同样搜索次数下，其计算精度更高，但程序略复杂，可靠性差些，对高维数的优化问题更适宜，经过某些技术处理，方法的可靠度可大为提高。

4.3 多变量优化计算的非梯度方法

4.3.1 坐标轮换法



对于第 k 轮 第 i 维搜索的计算公式为

$$\boldsymbol{x}_i^{(k)} = \boldsymbol{x}_{i-1}^{(k)} + \alpha_i^{(k)} \boldsymbol{s}_i^{(k)} \quad i = 1,2,\cdots,n$$

4.3.1 坐标轮换法

关于 $\alpha_i^{(k)}$ 值通常有以下两种取法：

(1) 加速步长法。

1) 取初始点 $x_0 = [-2.5, 4.2]^T$，$f(x_0) = 25.042$。试验步长取 $\varepsilon = 0.0625$。先判断沿 x_1 轴的移动方向：

$$x_1 = x_0 + \alpha s_1 = \begin{bmatrix} -2.5 \\ 4.2 \end{bmatrix} + 0.25 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2.25 \\ 4.2 \end{bmatrix}$$

$f(x_1) = 20.76 < f(x_0)$，试验步长应正值。

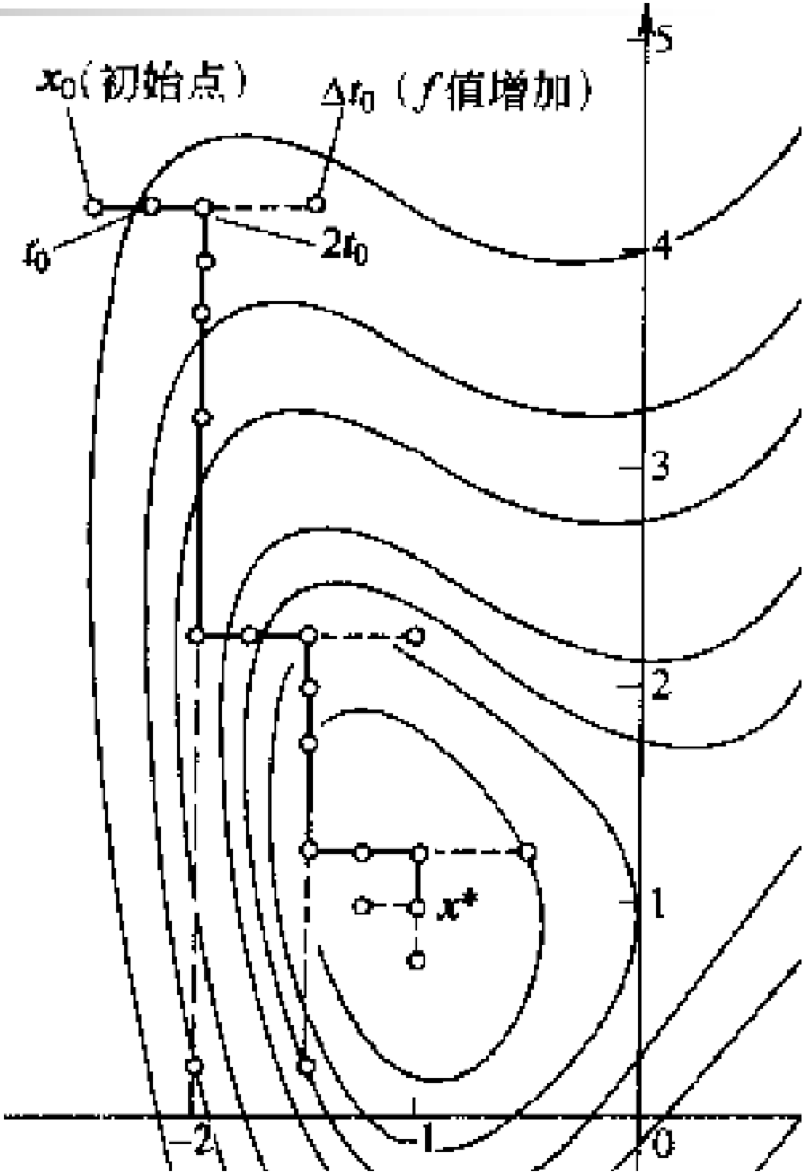
2) 取 $t = \beta\varepsilon = 4 \times 0.0625 = 0.25$，$\alpha = t = 0.25$

$$x_1^{(1)} = x_0 + \alpha s_1 = \begin{bmatrix} -2.5 \\ 4.2 \end{bmatrix} + 0.25 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2.25 \\ 4.2 \end{bmatrix}$$

$f(x_1^{(1)}) = 19.4125 < f(x_1)$

加大步长取 $\alpha = 2\alpha = 2 \times 0.25 = 0.5$

$$x_1^{(1)} = \begin{bmatrix} -2.5 \\ 4.2 \end{bmatrix} + 2 \times 0.25 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2.0 \\ 4.2 \end{bmatrix}$$



4.3.1 坐标轮换法

（2）最优步长法。

$$\left\| \alpha s_i^{(k)} \right\| \leqslant \varepsilon$$