

回归旋转设计中的寻优方法 及计算机实现

马 永

(西北农业大学计算机中心,陕西杨陵 712100)

摘 要 对二次旋转设计中回归方程优化的几种主要方法进行了简要分析,采用了一种比较好的、可称作梯度法的寻优方法,并对此法的应用及其在计算机上实现作了一些研究与探讨。

关键词 最优回归设计,回归旋转设计,优化,梯度法

中图分类号 O212.6

在最优回归设计方法中,回归旋转设计是一种较好的方法,它不仅具有试验次数比较少、计算简便、部分的消除了回归系数间的相关性等优点,还能使二次设计具有旋转性,有助于克服回归预测值的方差依赖于试验点在因子空间中的位置的缺点^[1]。为方便各类科技人员的应用,研制一个可用于二次回归旋转设计分析的计算机应用软件是十分必要的。在软件研制过程中,作者对回归方程的优化方法和在计算机上的实现作了一些研究和探索,并采用了一种比较好的方法——梯度法。下面仅对二次回归方程的优化进行一些讨论。

1 回归方程优化的一般方法

二次回归方程的优化,就是在给定的约束条件下,按一定的准则寻求通过回归方法获得的目标函数的最优值(最大或最小值)。显然旋转二次回归设计所获得的目标函数^[2]

$$\hat{Y} = b_0 + \sum_{j=1}^m b_j x_j + \sum_{i < j} b_{ij} x_i x_j + \sum_{j=1}^m b_{jj} x_j^2$$

的最优值可以通过各种数学方法获得。该目标函数优化的一般方法主要有下面几种

1.1 求函数的极值

此方法是先通过数学分析求出函数的驻点,然后根据给定的约束条件和问题的实际意义,通过比较得出函数的极值^[1]。对上述二次回归方程,需先计算出函数的驻点,再确定函数的极值点,最后求出函数的最优点和最优值。但该目标函数可能没有极值点,也可能极值点在限定的区域之外,因此常常无法确定函数的最优值。

1.2 变量搜索法

变量搜索法是通过变量在目标函数约束条件限定的区域 $[-\gamma, +\gamma]$ 内,通过全面搜索获得函数的最优值的一般方法,该法比较可靠,但搜索效率较低。当变量数和搜索区间数较多时,搜索量会急剧增加,例如对有四个变量的函数,当搜索区间数增加一倍时,搜索

量约增加 2^4 倍,因而在实际应用中适宜于在搜索区间数不多时使用。

1.3 变量轮换法^[1]

变量轮换法是从约束条件限定区域内的一点开始,通过只改变某一变量而固定其它变量不变,求以该变量为单变量的目标函数的最优点,然后再在求得的这一点处求另一变量为单变量的目标函数的最优点,依次将各个变量进行轮换,直到全部变量轮换一遍。然后再以最后找到的单变量目标函数的最优点为起点,进行新一轮寻优,直至找到满足给定精度要求的最优点和最优值。由于这种方法仅对限定区域内的一部分点进行搜索,不需全面搜索,因而比前面介绍的全面搜索方法效率要高得多。

2 梯度法

除上述几种方法外,作者在软件设计中还采用了一种可称之为梯度法的方法,其可看成是对变量轮换法的改进。在一个多元函数确定的多维空间中,函数在空间中某一点处梯度 $\vec{G} = (\frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n})$ 的方向,即表示该函数变化率最大的方向^[3],它可作为寻优的最佳搜索方向,如果沿梯度方向(或其反方向)搜索效果一定要好得多。

这种方法也是从约束条件限定的区域内的某一初始点 X^0 开始搜索,搜索方向根据该点处的梯度方向确定,只要计算出函数在该点对各变量的一阶偏导数 $f'_{x_j}(X^0)$, 根据搜索步长 Δh 即可求得它在各变量方向上的分量 $\Delta x_j = \frac{f'_{x_j}(X)}{|\vec{G}|} \Delta h$, 沿此方向搜索可找到该方向上的一个最优点。然后再从这点开始,沿新点处梯度的方向再进行搜索,就这样反复进行搜索直到找到最优点为止。采用这种搜索方法,判断一个点是否是最优点的原则是,如果从某一点开始搜索,其搜索步长在各变量方向上的分量均为零或近似为零,则表示该点为最优点。还应该指出,如果这个点在限定区域的内部,就表明函数在该点对各变量的一阶偏导数均为零,即该点是函数的一个驻点,它可能是一个极点;如果这个点是某一边界上的点 X^m ,当从这点开始搜索时应该规定,当沿梯度方向搜索会超出边界时,不允许其超出边界,即搜索步长在边界方向上的分量应该规定为零,也就是规定函数在该方向上的一阶偏导数 $f'_{x_j}(X^m) = 0$,这样也可以找出边界上的最优点。

从上面的分析可以看出,梯度法是一种比变量轮换法更好的搜索方法,不过它与前面所述的几种方法一样也有一个缺点,即在一些情况下搜索到的点不一定是最优点。

3 程序设计方法

在软件设计中,为了能兼顾搜索法和梯度法的优点而克服它们的缺点,作者对梯度法进行了分析,发现将搜索法与梯度法结合,即先用搜索法进行粗略搜索,确定一个合适的起始点,然后再用梯度法进行精确搜索,这样上述存在的问题一般是不会出现的。

3.1 递归方法在搜索程序设计中的应用

在回归旋转设计中,规格化的因子(变量)水平区间是 $[-\gamma, +\gamma]$,因此所有变量都只在这个区间搜索,搜索方法通常采用循环嵌套的方法实现,有几个变量,设计几层嵌套。然而作为一个应用软件,应该提供各种设计方案供用户选择,所以因子数不是固定的,可以由用户选择,这就给编程带来了一个问题,即不能再采用固定的循环嵌套方法,而只能采

用递归的方法来实现 下面是用 C语言编写的 ,搜索函数主要部分的 C源程序:

```
sous(double e[], double x[], int n, int p, float f[])
{int i;
  for(i= 0; i <= p; i++) /* 循环执行搜索 P次 * /
    {x[n]= - r+ r* (2* r/p); /* 改变搜索变量的当前值 * /
      if(n> 1) sous(e, x, n- 1, p, f); /* 递归调用 sous()函数 * /
      else sous1(e, x, f); /* 调用 sous1()函数搜索 * /
    }
}
```

程序通过改变各变量值进行搜索,当该函数处于最内层 ($n= 1$)时则调用函数 sous1()执行搜索,否则它将递归调用自己直至最内层。形参 n 表示变量个数, p 表示搜索区间数, x 指向存放各搜索变量当前值的数组, f 指向存放搜索结果的数组, e 指向存放回归系数的数组,函数 sous1()是程序中执行搜索的函数。

3. 2 梯度法搜索程序设计中的一些计算方法

二次回归方程的一般形式:

$$f(X) = b_0 + \sum_{j=1}^m b_j x_j + \sum_{i < j} b_{ij} x_i x_j + \sum_{j=1}^m b_{jj} x_j^2 \tag{1}$$

计算函数在 X 点处的偏导数的公式:

$$f'_{x_j}(X) = b_j + \sum_{i \neq j} b_{ij} x_i + 2b_{jj} x_j \tag{2}$$

(当起始点在 X_j 的边界上且可能向区间外搜索时令 $f'_{x_j}(X) = 0$)

计算各变量方向上搜索步长的公式:

$$\Delta X_j = \begin{cases} \frac{f'_{x_j}(X)}{|G|} \Delta h & \text{寻找最大值点} \\ - \frac{f'_{x_j}(X)}{|G|} \Delta h & \text{寻找最小值点} \end{cases} \tag{3}$$

在梯度法搜索程序设计中,上述公式 (1),(2)用于二次回归方程及其偏导数的计算,公式 (3)用于各变量方向上搜索步长的计算,在搜索最大值和最小值时其值符号相反

4 应用实例分析

回归旋转设计软件已在实际应用中取得良好效果,尤其是寻优的精度与搜索速度均有明显提高,下面通过一个例子来进行比较说明。

例.利用正交旋转组合设计研究冶炼厂铅鼓风炉经济合理高锌渣型性能^[2]。其主要数据见表 1。

表 1 二次旋转设计因素水平编码 %

	x_1 (Zn)	x_2 (CaO ₂)	x_3 (SiO)	x_4 (Fe)
上星号臂+ γ (+ 2)	16	26	9	24
上水平 (+ 1)	14	23	26	21
零水平 (0)	12	20	23	18
下水平 (- 1)	10	17	20	15
下星号臂- γ (- 2)	8	14	17	12

根据试验数据 (略),通过二次正交旋转组合设计方法得出下面回归方程:

$$y = 1081.9167 + 5.5417x_1 + 14.7917x_2 - 20.375x_3 - 0.0417x_4 + 4.3125x_1x_2 - 9.5625x_1x_3 + 7.4375x_1x_4 - 6.3125x_2x_3 - 3.0625x_2x_4 + 0.5625x_3x_4 + 6.7604x_1^2 + 4.8854x_2^2 + 8.2604x_3^2 - 4.4896x_4^2$$

对上述回归方程用不同方法进行优化,结果见表 2

表 2 不同寻优方法的优化结果

	最优值	最佳工艺条件				搜索精度	运行时间 (s)
		x_1	x_2	x_3	x_4		
梯度法	最大: 1326.910	2.000(16.0)	2.000(26.0)	-2.000(17.0)	0.848(20.544)	0.002	65
	最小: 1009.114	2.000(16.0)	-1.904(14.289)	1.733(28.198)	-2.000(12.0)		
搜索法	最大: 1326.901	2.0(16.0)	2.0(26.0)	-2.0(17.0)	0.8(20.4)	0.2	700
	最小: 1009.161	2.0(16.0)	-1.8(14.6)	1.8(28.4)	-2.0(12.0)		

注: 未加括号的数字为编码后的变量值,括号中的数字表示原变量值.

表 2 中给出的是搜索步长为 0.002 的梯度法和搜索区间数为 20 的一般搜索方法寻优的结果,它们均是在主频为 33 MHz 的同一台 386SX 机上运行获得的.从表中可以看出,在同样条件下梯度法的搜索精度和速度远较一般搜索法好,因此它是一种搜索精度和效率都非常高的好方法.

参 考 文 献

1 徐中儒.农业试验最优回归设计.哈尔滨:黑龙江科学技术出版社,1988 131~ 134,340~ 349,354~ 356
2 朱伟勇,胡晨江.最优设计的计算机证明与构造.沈阳:东北工学院出版社,1987 461,465~ 467
3 谢树艺.矢量分析与场论.北京:人民教育出版社,1978 20~ 22

Optimization in Regress Rotatable Designs
and Realization with Computer

Ma Yong

(Computer Center, The Northwestern Agricultural University, Yangling, Shaanxi, 712100)

Abstract The paper gives a brief analysis of several main methods of regress function optimization in the second rotatable designs and suggests an improved optimization method called Gradient Method. And its computer application and realization of the method has also been discussed.

Key words optimal regression designs, regress rotatable designs, optimization, gradient method