



采用二次近似 (Quadratic Approximation) 法求解边界优化

NAG Fortran 算法库第 23 版扩充原来优化函数 (E04) 章节的功能。剑桥大学 Mike Powell 教授所提出的 BOBYQA (Bound Optimization BY Quadratic Approximation) 算法已经在新版算法库中提供了。这是一个强大且容易使用的算法，采用二次近似与信任区间方式，求取具边界条件的目标函数优化。其不需要目标函数的导数，对于大尺度问题求解有很高的效率。

举例来说，在球面中有最大分隔、成对、等距，并起始于赤道处的 50 个散布点的优化问题 (参阅 Powell 2009)，需 4633 次函数求值。相较于采用 NAG 中 Nelder-Mead 算法的 16757 来说，其具有很高的性能。(采用 GCC 4.5.2, Fedora 10, 四个双核 2.00GHz Intel® Xeon® E5405 处理器与 8Gb RAM 环境)。

参考资料：Powell M.J.D. (2009), "The BOBYQA algorithm for bound constrained optimization without derivatives", Report DAMTP 2009/NA06, University of Cambridge.