Advances in Applied Mathematics 应用数学进展, 2026, 15(4), 286-297
Published Online April 2026 in Hans. https://www.hanspub.org/journal/aam
https://doi.org/10.12677/aam.2026.154157

一个新的单参数填充函数及其在非线性数据拟合中的应用

郑文胜[1]，曹安维[2]，张　莹[1*]

[1]浙江师范大学数学科学学院，浙江　金华
[2]锐志(宁波)智能科技有限公司，浙江　宁波

收稿日期：2026年3月8日；录用日期：2026年4月2日；发布日期：2026年4月9日

摘　要

填充函数法是一类求解全局优化问题的高效确定性方法。本文针对无约束全局优化问题，基于填充函数定义，构造了一个新的单参数填充函数，并且给出了相应的填充函数算法，多个经典的数值算例实验结果表明，该算法是有效可行的。同时利用此填充函数处理非线性数据拟合问题，发现相较于传统的非线性回归方法而言，其拟合效果更优。

关键词

全局优化，填充函数，非线性数据拟合

A New Filled Function with One Parameter and Its Application in Nonlinear Data Fitting

Wensheng Zheng[1], Anwei Cao[2], Ying Zhang[1*]

[1]School of Mathematical Sciences, Zhejiang Normal University, Jinhua Zhejiang
[2]Rui Zhi (Ningbo) Intelligent Technology Co., Ltd., Ningbo Zhejiang

Received: March 8, 2026; accepted: April 2, 2026; published: April 9, 2026

Abstract

The filled function method is a class of efficient deterministic methods for solving global optimization

[*]通讯作者。

文章引用: 郑文胜, 曹安维, 张莹. 一个新的单参数填充函数及其在非线性数据拟合中的应用[J]. 应用数学进展, 2026, 15(4): 286-297. DOI: 10.12677/aam.2026.154157

problems. In this paper, we focus on unconstrained global optimization problems and construct a new filled function with one parameter based on the definition of the filled function. A corresponding filled function algorithm is also presented. Numerical experiments with several classical examples demonstrate the effectiveness and feasibility of the algorithm. Moreover, when this filled function is applied to nonlinear data fitting problems, it is found that the fitting results are superior to those obtained by traditional nonlinear regression methods.

Keywords

Global Optimization, Filled Function, Nonlinear Data Fitting

1. 引言

全局优化问题在诸如经济、金融、工业生产等多个领域和行业中有着广泛的应用背景，已成为一个重要的研究分支。目前，对于全局优化算法的研究主要分为两类：一类是确定性算法，如填充函数法、打洞函数法、区间方法、分支定界法等；还有一类是随机性算法，如模拟退火算法、遗传算法等。填充函数法这种确定性方法最初是由西安交通大学的葛人溥教授提出的，该方法的特点是能够跳出目标函数原有的局部极小点从而找到比原有极小点更优的局部极小点，因而对于解决全局优化问题具有可行性。

最早由葛人溥教授所提出的第一代填充函数[1]形式如下：

$$P\left(x,x_k^*,r,\rho\right)=\frac{1}{r+f\left(x\right)}\exp\left(-\frac{\left\|x-x_k^*\right\|^2}{\rho^2}\right),$$

其中，r 和 ρ 是参数，理论分析和数值实验表明该填充函数能够成功解决一些高维的标准测试问题，但该填充函数主要存在两点不足：(1) 指数项中的 $\left\|x-x_k^*\right\|^2$ 很大或者 ρ 很小时，该填充函数会出现假的平稳点；(2) 有 r 和 ρ 两个参数需要调节，较为繁琐。

随后，葛和秦等人根据 $P\left(x,x_k^*,r,\rho\right)$ 的不足提出了一个新的填充函数[2]：

$$Q\left(x,x_k^*,A\right)=-\left[F\left(x\right)-F\left(x_k^*\right)\right]\exp\left(-A\left\|x-x_k^*\right\|^2\right),$$

其中，$A>0$ 是参数。该填充函数克服了函数 $P\left(x,x_k^*,r,\rho\right)$ 中对项 $\left\|x-x_k^*\right\|$ 和双参数依赖性过强的不足，并且形式更简洁，对于数值算例的实验效果更优。然而，当该填充函数可行域足够大或者参数 A 的值足够大的时候，指数项的存在仍然会产生假的平稳点。

之后，针对上述填充函数所出现的问题，刘等人提出了如下形式的填充函数[3]：

$$H\left(x,x_k^*,a\right)=1\big/\ln\left[1+f\left(x\right)-f\left(x_k^*\right)\right]-a\left\|x-x_k^*\right\|^2,$$

其中，$a>0$ 是参数。该填充函数不含指数项，并且只含有一个参数。不过，由于自变量 x 的取值在 $f\left(x\right)<f\left(x_k^*\right)-1$ 的地方没有定义，造成该填充函数不连续可微，因此可能导致找到的局部极小点无法落入该区域。

受此影响，为了应用寻找局部极小点的局部搜索方法，一个连续可微的填充函数在文献[4]中被提出，

其具体形式如下：

$$W\left(x,x_k^*,\tau,\rho\right)=\eta\left(\frac{1}{2}\|x-x_0\|^2\right)\varphi\left(\tau\left[f\left(x\right)-f\left(x_k^*\right)+\rho\right]\right),$$

其中，$x_0\in\mathbb{R}^n$，$\tau\geq1$ 和 $\rho>0$ 是两个参数。同时，$\eta(t)=\gamma_1 t$，$\varphi(t)=\gamma_2\arctan(t)$，其中，$\gamma_1$ 和 γ_2 是正实数。该填充函数虽然连续可微，但仍然避免不了双参数调节这一难题。随着研究的深入，不少专家学者相继提出了各种含有双参数[5]-[8]、单参数[9]-[12]和无参数[13]-[17]的填充函数，它们的提出极大丰富了填充函数的形式，在一定程度上为后续研究者提供了新的思路。

2. 定义与假设

本文考虑如下无约束全局优化问题：

$$(P)\begin{cases}\min & f(x)\\ \text{s.t.} & x\in\mathbb{R}^n,\end{cases}$$

其中 $f(x):\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}$ 连续可微。

假设 1 目标函数 $f(x)$ 是强制性的，即当 $\|x\|\to+\infty$ 时，有 $f(x)\to+\infty$。

注 1 假设 1 表明，一定存在一个紧集 $\Omega\subset\mathbb{R}^n$，它的内部包含了 $f(x)$ 的所有全局极小点和局部极小点，其中 $\Omega=\left\{x=\left(x_1,x_2,\cdots,x_n\right)\mid c_i\leq x_i\leq d_i,i=1,2,\cdots,n\right\}$。因此，原问题 (P) 可以转化成如下等价问题：

$$(\bar{P})\begin{cases}\min & f(x)\\ \text{s.t.} & x\in\Omega.\end{cases}$$

假设 2 集合 μ 表示问题 $(\bar{P})$ 中所有局部极小点构成的集合，并且 $M^*=\left\{f(x)\mid x\in\mu\right\}$ 是有限的。

注 2 问题 $(\bar{P})$ 中的局部极小点可以为无穷多个，但局部极小值个数有限。

假设 3 目标函数 $f(x)$ 的所有局部极小值点都在集合 Ω 的内部，并且对于 $\forall y\in\partial\Omega$，都有 $f(y)>l$，其中 $l=\max\left\{f(x)\mid x\in\mu\right\}$。

设 x_k^* 是目标函数当前的一个局部极小点，葛仁溥教授给出填充函数的定义[1]如下：

定义 1 称函数 $P\left(x,x_k^*\right)$ 为目标函数 $f(x)$ 在局部极小点 x_k^* 处的填充函数，如果它满足下列条件：

(1) x_k^* 是 $P\left(x,x_k^*\right)$ 的一个严格局部极大点，$f(x)$ 在 x_k^* 处的盆谷 B_k^* 成为 $P\left(x,x_k^*\right)$ 的峰的一部分；

(2) $P\left(x,x_k^*\right)$ 在比 B_k^* 高的盆谷 B_i^* 处不存在局部极小点或者鞍点，即 $\nabla P\left(x_i,x_k^*\right)\neq\mathbf{0}$，对任意的 $x_i\in B_i^*$；

(3) 若 $f(x)$ 存在比 B_k^* 更低的盆谷 B_{k+1}^*，则存在 $\bar{x}\in B_{k+1}^*$，使得 $P\left(x,x_k^*\right)$ 在 $\bar{x}$ 和 x_k^* 的连线上有极小点。

注 3 由于能够满足定义 1 中第三个条件的填充函数 $P\left(x,x_k^*\right)$ 构造起来较为困难，并且通过局部搜索方法不容易找到比当前局部极小点更好的点。在此基础之上，吴至友等人通过对定义 1 中第三个条件的改良，给出了填充函数新的定义[6]，并且这个定义被广泛使用，如定义 2 所示。

定义 2 假设 x_k^* 是目标函数 $f(x)$ 的一个局部极小点，称 $P\left(x,x_k^*,r\right)$ 是 $f(x)$ 在点 x_k^* 处的一个填充函数。如果函数 $P\left(x,x_k^*,r\right)$ 满足如下三个条件：

(1) 点 x_k^* 是函数 $P\left(x,x_k^*,r\right)$ 的一个严格局部极大点。

(2) 对任意的 $x\in S_1,\nabla P\left(x,x_k^*,r\right)\neq\mathbf{0}$。其中，$S_1=\left\{x\in\Omega\mid f(x)\geq f\left(x_k^*\right),x\neq x_k^*\right\}$。

(3) 如果 x_k^* 不是 $f(x)$ 的一个全局极小点，那么在集合 $x\in S_2$ 上一定存在局部极小点。其中，$S_1=\left\{x\in\Omega\mid f(x)<f\left(x_k^*\right)\right\}$ 非空。

3. 单参数填充函数及其解析性质

针对问题 $(\bar{P})$，同时基于定义 2 中填充函数所要满足的三个条件，我们构造如下单参数填充函数：

$$P\left(x,x_k^*,r\right)=-\left\|x-x_k^*\right\|^2\phi\left[r\left(f\left(x\right)-f\left(x_k^*\right)\right)\right]+\min\left(0,f\left(x\right)-f\left(x_k^*\right)\right)^3,$$

其中，r 是一个大于 0 的参数，$\phi(t)$ 是一个分段函数具体定义如下：

$$\phi(t)=\begin{cases}1, & t\geq 0,\\ 1+\sin\left(\dfrac{\pi}{2}t\right), & -1<t<0,\\ 0, & t\leq -1.\end{cases}$$

容易验证，函数 $P\left(x,x_k^*,r\right)$ 是连续可微的。

定理 1 如果 x_k^* 是目标函数 $f(x)$ 的一个局部极小点，则 x_k^* 是填充函数 $P\left(x,x_k^*,r\right)$ 的一个严格局部极大点。

证明： 由于 x_k^* 是函数 $f(x)$ 的一个局部极小点，则存在 $\varepsilon>0$，使得对于 $\forall x\in\Omega\cap \mathrm{N}\left(x_k^*,\varepsilon\right)$，都有 $f(x)\geq f\left(x_k^*\right)$。因此，对于任意的 $r>0$ 和任意的 $x\in\Omega\cap \mathrm{N}\left(x_k^*,\varepsilon\right)$ 且 $x\neq x_k^*$，有

$$P\left(x,x_k^*,r\right)=-\left\|x-x_k^*\right\|^2<0=P\left(x_k^*,x_k^*,r\right).$$

因此，x_k^* 是 $P\left(x,x_k^*,r\right)$ 的严格局部极大点。证毕。

定理 2 对于 $\forall x_a,x_b\in\Omega$，若 $f\left(x_a\right)\geq f\left(x_k^*\right)$，$f\left(x_b\right)\geq f\left(x_k^*\right)$ 并且 $\left\|x_a-x_k^*\right\|<\left\|x_b-x_k^*\right\|$，则 $P\left(x_b,x_k^*,r\right)<P\left(x_a,x_k^*,r\right)<0=P\left(x_k^*,x_k^*,r\right)$。

证明： 由所构造的填充函数 $P\left(x,x_k^*,r\right)$ 可知，对任意满足 $f(x)\geq f\left(x_k^*\right)$ 的 x，都有

$$P\left(x,x_k^*,r\right)=-\left\|x-x_k^*\right\|^2.$$

结合已知条件 $\left\|x_a-x_k^*\right\|<\left\|x_b-x_k^*\right\|$ 可得，

$$P\left(x_b,x_k^*,r\right)-P\left(x_a,x_k^*,r\right)=-\left\|x_b-x_k^*\right\|^2-\left(-\left\|x_a-x_k^*\right\|^2\right)<0.$$

于是可得 $P\left(x_b,x_k^*,r\right)<P\left(x_a,x_k^*,r\right)<0=P\left(x_k^*,x_k^*,r\right)$。证毕。

注 3 定理 2 表明，对于集合 S_1 中的任意两点，距离点 x_k^* 越远，则在该点处的填充函数值越小，这表明极小化填充函数 $P\left(x,x_k^*,r\right)$ 的过程总是能够被实现。

定理 3 假设 x_k^* 是目标函数 $f(x)$ 的一个局部极小点，对于满足条件 $f(x)\geq f\left(x_k^*\right)$ 且 $x\neq x_k^*$ 的 $x\in\Omega$ 和任意的 $r>0$，x 都不是填充函数 $P\left(x,x_k^*,r\right)$ 的稳定点。更进一步地，若令 $d(x)=x-x_k^*$，则有 $\nabla P\left(x,x_k^*,r\right)^{\mathrm{T}}d(x)<0$。

证明： 由于 $f(x)\geq f\left(x_k^*\right)$ 且 $x\neq x_k^*$，因此有

$$P\left(x,x_k^*,r\right)=-\left\|x-x_k^*\right\|^2,\nabla P\left(x,x_k^*,r\right)=-2\left(x-x_k^*\right)\neq\mathbf{0}.$$

$$\nabla P\left(x,x_k^*,r\right)^{\mathrm{T}}d(x)=-2\left(x-x_k^*\right)^{\mathrm{T}}\left(x-x_k^*\right)=-2\left\|x-x_k^*\right\|^2<0.$$

因此 x 不是填充函数 $P\left(x,x_k^*,r\right)$ 的平稳点，并且 $\nabla P\left(x,x_k^*,r\right)^{\mathrm{T}}d(x)<0$。证毕。

注 4 定理 3 表明：(1) 对于 $\forall x\in S_1$，均有 $\nabla P\left(x,x_k^*,r\right)\neq\mathbf{0}$。此时，$x$ 不是一个驻点或者鞍点；(2) 对于 $\forall x\in S_1$，填充函数在 x 处所定义的可行方向 $d(x)$ 是一个下降方向；(3) 填充函数 $P\left(x,x_k^*,r\right)$ 的极小化过程将不会在 S_1 上中止。

定理 4 假设 $x_k^*\in\Omega$ 是目标函数 $f(x)$ 的一个局部极小点但不是 $f(x)$ 的全局极小点，即集合 $S_2\neq\varnothing$，当 $r>\dfrac{1}{m}$ 时，一定存在一点 $\bar{x}\in S_2$，使得 $\bar{x}$ 是 $P\left(x,x_k^*,r\right)$ 的一个局部极小点。其中，

$m=\min_{x,y\in M^*}\left|f(x)-f(y)\right|$。

证明： 由于 x_k^* 是目标函数 $f(x)$ 的一个局部而非全局极小点，因此，一定存在比 x_k^* 更好的局部极小点 $x^*\in S_2$，使得 $f(x^*)<f(x_k^*)$。结合 m 的取值以及填充函数 $P(x,x_k^*,r)$ 的定义可知，当 $r>\frac{1}{m}$ 时，就有 $r\left(f(x^*)-f(x_k^*)\right)\le -mr<-1$。此时有

$$P(x,x_k^*,r)=\left(f(x)-f(x_k^*)\right)^3.$$

又根据 $f(x)$ 的连续性可知，存在邻域 $\mathrm{N}(x^*,\varepsilon)\cap S_2$，其中，$\varepsilon>0$，使得

$$f(x_k^*)>f(x)\ge f(x^*),\forall x\in\mathrm{N}(x^*,\varepsilon)\cap S_2,$$

于是

$$P(x,x_k^*,r)=\left(f(x)-f(x_k^*)\right)^3\ge\left(f(x^*)-f(x_k^*)\right)^3=P(x^*,x_k^*,r).$$

由此得 x^* 是填充函数 $P(x,x_k^*,r)$ 的一个局部极小点。取 $\bar{x}=x^*$，则 $\bar{x}$ 是填充函数 $P(x,x_k^*,r)$ 的一个局部极小点。于是，若 x_k^* 是目标函数 $f(x)$ 的一个局部极小点而非全局极小点，那么一定存在一点 $\bar{x}\in S_2$，使得 $\bar{x}$ 是 $P(x,x_k^*,r)$ 的一个局部极小点。证毕。

综上，由定理 1~4 证得 $P(x,x_k^*,r)$ 是一个新的含有单参数的填充函数。

4. 填充函数算法

结合前面所构造的填充函数，给出如下单参数填充函数法(One-Parameter Filled Function Algorithm, 简记为 OPFF)。

步骤 0 选择 U_r 作为 r 的上确界(本文取 $U_r=10^8$)；选择常数 $\eta>1$ (本文取 $\eta=10^2$)；提前给出一些方向向量记作 e_i，$i=1,2,\cdots,K$，$K\ge 2n$。其中，n 是目标函数中变量的维数。选择 $x_0\in\Omega$ 作为极小化问题 $(\bar{P})$ 的初始点；置 $k=1$，转步骤 1。

步骤 1 以 $x_0\in\Omega$ 作为初始点极小化目标函数，得到一个关于问题 $(\bar{P})$ 的局部极小点 x_k^*。

步骤 2 在局部极小点 x_k^* 处构造单参数填充函数

$$P(x,x_k^*,r)=-\left\|x-x_k^*\right\|^2\phi\left[r\left(f(x)-f(x_k^*)\right)\right]+\min\left(0,f(x)-f(x_k^*)\right)^3.$$

令 $i=1$，转步骤 3。

步骤 3 若 $i\le K$，选取 $0\le\delta\le 1$，并令 $y=x_k^*+\delta e_i$，然后转步骤 4；否则，转步骤 5。

步骤 4 用 y 作为极小化 $P(x,x_k^*,r)$ 的初始点，可得到局部极小点 $\bar{x}$。若 $\bar{x}\notin\Omega$，令 $i=i+1$，转步骤 3；否则，令 $k=k+1$，同时令 $x_k^*=\bar{x}$，转步骤 2。

步骤 5 若 $r<U_r$，则令 $r=\eta\times r$，转步骤 2；否则，算法终止，x_k^* 就被视为问题 $(\bar{P})$ 的全局极小点。

注 5 需要对该填充函数算法作以下说明：

(1) 在步骤 0 中，需要选取 K 个方向向量，一般地，取 $K=2n$，$e_i=\left(0,\cdots,\underset{i}{1},\cdots,0\right)^{\mathrm{T}}$，$i=1,2,\cdots,n$，$e_i=-e_{n-i}$，$i=n+1,\cdots,2n$。

(2) 在极小化目标函数 $f(x)$ 和填充函数 $P(x,x_k^*,r)$ 的过程中，首先需要选择一种局部搜索算法。在本算法中，我们选择拟牛顿方法。

5. 数值算例及其实验结果

根据上述填充函数算法，通过对 Matlab R2016a (Version 9.0)软件进行编程，得到一些经典数值算例

的实验结果。以下是符号说明：

k：经过外循环对目标函数局部极小化的迭代次数；

x_0：目标函数局部极小化时的初始点；

x_k^*：目标函数的第 k 个局部极小点；

$f\left(x_k^*\right)$：目标函数在第 k 个局部极小点处的局部极小值。

算例 1 (Six-hump back camel function)

$$\begin{aligned}&\min \quad f(x)=4x_1^2-2.1x_1^4+\frac{1}{3}x_1^6-x_1x_2-4x_2^2+4x_2^4\\&\text{s.t.} \quad -3\le x_1\le 3,\ \ -3\le x_1\le 3.\end{aligned}$$

已知该函数的全局极小点为 $x^*=(-0.0898,-0.7127)^{\mathrm{T}}$ 或者 $x^*=(0.0898,0.7127)^{\mathrm{T}}$，全局极小值 $f\left(x^*\right)=-1.0136$。该算例的实验结果见表 1。

Table 1. The experimental results of Example 1

表 1. 算例 1 实验结果

x_0	k	x_k^*	$f\left(x_k^*\right)$
$(-2,2)^{\mathrm{T}}$	1	$(-1.6071,0.5686)^{\mathrm{T}}$	2.1043
	2	$(-0.0898,0.7127)^{\mathrm{T}}$	−1.0136

算例 2 (Two-dimensional Shubert function)

$$\begin{aligned}&\min \quad f(x)=\left(\sum_{i=1}^{5} i\cos\left((i+1)x_1+1\right)\right)\left(\sum_{i=1}^{5} i\cos\left((i+1)x_2+1\right)\right)\\&\text{s.t.} \quad -10\le x_1\le 10,\ \ -10\le x_2\le 10.\end{aligned}$$

已知该函数在可行域内存在 $x^*=(4.8581,5.4829)^{\mathrm{T}}$ 或者 $x^*=(5.4829,4.8581)^{\mathrm{T}}$ 等其余 760 个全局极小点，全局极小值 $f\left(x^*\right)=-186.7309$。该算例的实验结果见表 2。

Table 2. The experimental results of Example 2

表 2. 算例 2 实验结果

x_0	k	x_k^*	$f\left(x_k^*\right)$
$(2,2)^{\mathrm{T}}$	1	$(3.0116,3.0116)^{\mathrm{T}}$	9.51111e−17
	2	$(3.7723,3.2800)^{\mathrm{T}}$	−12.9648
	3	$(4.8581,3.2800)^{\mathrm{T}}$	−46.5113
	4	$(4.8581,5.4829)^{\mathrm{T}}$	−186.7309

算例 3 (Treccani function)

$$\begin{aligned}&\min \quad f(x)=x_1^4+4x_1^3+4x_1^2+x_2^2\\&\text{s.t.} \quad -3\le x_1\le 3,\ \ -3\le x_2\le 3.\end{aligned}$$

在算例 3 中，已知该函数的全局极小点为 $x^*=(0,0)^{\mathrm{T}}$ 或者 $x^*=(-2,0)^{\mathrm{T}}$，全局极小值 $f\left(x^*\right)=0$。该算例的实验结果见表 3。

Table 3. The experimental results of Example 3
表 3. 算例 3 实验结果

x_0	k	x_k^*	$f(x_k^*)$
$(-1,-2)^{\mathrm{T}}$	1	$(-1.0000,-0.0000)^{\mathrm{T}}$	1.0000
	2	$(0.8288\mathrm{e}{-8},0.3249\mathrm{e}{-8})^{\mathrm{T}}$	2.8534e−16

算例 4 (Rastrigin function)

$$\begin{aligned}&\min \quad f(x)=x_1^2+x_2^2-\cos(18x_1)-\cos(18x_2)\\&\text{s.t.} \quad -3\le x_1\le 3,\ \ -3\le x_2\le 3.\end{aligned}$$

已知在该算例中，在可行域内大约存在 50 个局部极小点，且该函数的全局极小点为 $x^*=(0,0)^{\mathrm{T}}$，全局极小值 $f(x^*)=-2$。该算例的实验结果见表 4。

Table 4. The experimental results of Example 4
表 4. 算例 4 实验结果

x_0	k	x_k^*	$f(x_k^*)$
$(1,1)^{\mathrm{T}}$	1	$(1.0408,1.0408)^{\mathrm{T}}$	0.1798
	2	$(-0.3496,-0.3496)^{\mathrm{T}}$	−1.7578
	3	$(6.2500\mathrm{e}{-9},1.0790\mathrm{e}{-8})^{\mathrm{T}}$	−2

算例 5 (Two-dimensional function)

$$\begin{aligned}&\min \quad f(x)=\left(1-2x_2+c\sin(4\pi x_2)-x_1\right)^2+\left(x_2-0.5\sin(2\pi x_1)\right)^2\\&\text{s.t.} \quad 0\le x_1\le 10,\ \ -10\le x_2\le 0.\end{aligned}$$

在算例 5 中，当参数 c 分别取 0.5、0.2、0.05 时，其数值算例结果分别如表 5~7 所示。已知该函数的全局极小点为 $x^*=(1,0)^{\mathrm{T}}$，全局极小值 $f(x^*)=0$。

Table 5. The experimental results of Example 5 (c = 0.5)
表 5. 算例 5 (c = 0.5)实验结果

c	x_0	k	x_k^*	$f(x_k^*)$
0.5	$(1,-1)^{\mathrm{T}}$	1	$(0.8876,-1.0936)^{\mathrm{T}}$	3.9699
		2	$(0.9056,-0.5940)^{\mathrm{T}}$	0.7711
		3	$(0.9432,-0.1746)^{\mathrm{T}}$	1.6031e−14

Table 6. The experimental results of Example 5 (c = 0.2)
表 6. 算例 5 (c = 0.2)实验结果

c	x_0	k	x_k^*	$f(x_k^*)$
0.2	$(1,1)^{\mathrm{T}}$	1	$(1.0860,1.0269)^{\mathrm{T}}$	4.8917
		2	$(1.0000,-0.0000)^{\mathrm{T}}$	1.3056e−14

Table 7. The experimental results of Example 5 (c = 0.05)
表 7. 算例 5 (c = 0.05)实验结果

c	x_0	k	x_k^*	$f\left(x_k^*\right)$
0.05	$(2,0)^{\mathrm{T}}$	1	$(1.8513,-0.4021)^{\mathrm{T}}$	7.0592e−14

算例 6 (N-dimensional function)

$$\min \quad f(x)=\sum_{i=1}^{n}\left[x_i^2-10\cos(2\pi x_i)+10\right]$$
$$\text{s.t.} \quad -5\le x_i\le 5.$$

在数值算例 6 中，分别取 $n=5,10$，其数值算例结果如表 8 所示。已知该函数的全局极小点为 $x^*=(0,0,\cdots,0)^{\mathrm{T}}$，全局极小值 $f\left(x^*\right)=0$。

Table 8. The experimental results of Example 6
表 8. 算例 6 实验结果

x_0	k	x_k^*	$f\left(x_k^*\right)$
$(1,0,1,0,1)^{\mathrm{T}}$	1	$1.0\text{e}{-08}*(0.2555,-0.3897,0.2555,-0.3897,0.2555)^{\mathrm{T}}$	1.2434e−14
$(1,0,1,0,-1,0,-1$	1	$1.0\text{e}{-08}*(-0.7269,-0.0675,-0.7269,-0.0675,-0.7026,$ $-0.0675,-0.7026,-0.0675,-0.7269,-0.7026)^{\mathrm{T}}$	7.1054e−14

本文将 OPFF 算法应用于算例 1~5，通过与文献[8] [10] [12] [17]中其他填充函数算法的实验结果进行对比分析，验证了其有效性，详细对比数据如表 9 所示。

可以发现，对于算例 1 而言，本文中 OPFF 算法的循环次数比文献[8]中的循环次数少；算例 2 和算例 3 的循环次数与文献[10]中的循环次数一致；对于算例 4 而言，本文中的 OPFF 算法较文献[12]循环次数多了 1 次；对于算例 5 而言，不难看出本文中的 OPFF 算法运行效果整体上优于文献[10]和文献[17]中的填充函数算法。

Table 9. Comparison of experimental results between the OPFF algorithm and other algorithms from literature
表 9. OPFF 算法与其他文献算法实验结果对比

算例	对比	循环次数	初始点	全局极小点	全局极小值
1	OPFF 算法	2	$(-2,2)^{\mathrm{T}}$	$(-0.0898,-0.7127)^{\mathrm{T}}$	−1.0136
1	文献[8]	3	$(-2,1)^{\mathrm{T}}$	$(-0.0898,-0.7127)^{\mathrm{T}}$	−1.0136
2	OPFF 算法	4	$(2,2)^{\mathrm{T}}$	$(4.8581,5.4829)^{\mathrm{T}}$	−186.7309
2	文献[10]	4	$(1,1)^{\mathrm{T}}$	$(5.4829,4.8581)^{\mathrm{T}}$	−186.7309
3	OPFF 算法	2	$(-1,-2)^{\mathrm{T}}$	$(0.8288\text{e}{-8},0.3249\text{e}{-8})^{\mathrm{T}}$	2.8534e−16
3	文献[10]	2	$(-1,0)^{\mathrm{T}}$	$(0,0)^{\mathrm{T}}$	0
4	OPFF 算法	3	$(1,1)^{\mathrm{T}}$	$(6.2500\text{e}{-9},1.0790\text{e}{-8})^{\mathrm{T}}$	−2
4	文献[12]	2	$(1,1)^{\mathrm{T}}$	$(-5.4495\text{e}{-5},1.6712\text{e}{-5})^{\mathrm{T}}$	−2.0000

续表

5 ($c=0.5$)	OPFF 算法	3	$(1,-1)^T$	$(0.9432,-0.1746)^T$	1.6031e−14
5 ($c=0.5$)	文献[17]	3	$(0,0)^T$	$(0.1026,0.3005)^T$	1.2609e−08
5 ($c=0.5$)	文献[10]	2	$(0,0)^T$	$(1.0000,0)^T$	1.5257e−009
5 ($c=0.2$)	OPFF 算法	2	$(1,1)^T$	$(1.0000,-0.0000)^T$	1.3056e−14
5 ($c=0.2$)	文献[17]	1	$(0,0)^T$	$(0.9825,-0.0548)^T$	8.2931e−14
5 ($c=0.2$)	文献[10]	3	$(6,-2)^T$	$(1.0000,-0.0000)^T$	2.8229e−010
5 ($c=0.05$)	OPFF 算法	1	$(2,0)^T$	$(1.8513,-0.4021)^T$	7.0592e−14
5 ($c=0.05$)	文献[17]	5	$(6,-2)^T$	$(1.8513,-0.4021)^T$	4.8751e−14
5 ($c=0.05$)	文献[10]	7	$(10,-10)^T$	$(1.8513,-0.4021)^T$	4.3885e−011

6. 填充函数算法在非线性数据拟合中的应用

数据拟合，也被称作曲线拟合，是一种利用数学手段将实际观测数据嵌入到某个具体的函数表达式中的方法。在经济学和科学等诸多领域中，研究者往往会通过采样、实验等途径获得一系列分散的数据点。面对这些观测数据，研究者的目标是构建一个连续的函数(曲线)或一组更密集的离散方程，以期掌握这些数据间的内在联系。

数据拟合问题通常可以表述为如下形式：对于一组给定的观测数据点 (x_i, y_i)，其中 $i=1,2,\cdots,n$。假设变量 x 和 y 之间满足 $y=f(x;\beta)$，其中 $\beta=(\beta_1,\cdots,\beta_n)^T$ 是模型参数，数据拟合的过程就是求解参数 β，要使所求解的函数表达式对应的拟合曲线最佳逼近于观测数据，就要让残差平方和最小化，即

$$\min\ Q(\beta)=\sum_{i=1}^{n}\left(f(x_i;\beta)-y_i\right)^2.$$

不难看出，该问题可以归结为一类无约束全局优化问题。通常对于线性回归问题，可以采用最小二乘法来求解，而对于含有较多参数的非线性模型，求解起来相对困难。因此，本文采用填充函数法来求解此类非线性问题。

在化工生产中，了解反应速度与反应物含量之间的对应关系显得尤为关键。通过研究这种关系，有助于确定最佳的反应物配比，提高生产效率和产品质量，降低生产成本。除此以外，在一些需要精确控制反应的领域，如药物合成、材料制备等，掌握反应速度与反应物含量间的关系可以实现对反应进程的有效控制。

通过结合文献[18]中的案例，以此来说明填充函数法的有效性，该案例如下：

某课题小组在研究化学动力学反应过程中，建立了一个反应速度和反应物含量的数学模型，其形式为

$$y=\frac{\beta_4 x_2-\dfrac{x_3}{\beta_5}}{1+\beta_1 x_1+\beta_2 x_2+\beta_3 x_3},$$

在该式中，$\beta_i\ (i=1,2,3,4,5)$ 是未知的参数；$x_j\ (j=1,2,3)$ 是三种反应物(氢，n 戊烷，异构戊烷)的含量；y 是反应速度。现测得一组数据如表 10 所示。我们试图利用表格中的数据确定参数 $\beta_i\ (i=1,2,3,4,5)$。

Table 10. Reaction data
表 10. 反应数据

序号	氢 x_1	n 戊烷 x_2	异构戊烷 x_3	反应速度 y
1	470	300	10	8.55
2	285	80	10	3.79
3	470	300	120	4.82
4	470	80	120	0.02
5	470	80	10	2.75
6	100	190	10	14.39
7	100	80	65	2.54
8	470	190	65	4.35
9	100	300	54	13.00
10	100	300	120	8.50
11	100	80	120	0.05
12	285	300	10	11.32
13	285	190	120	3.13

在统计学中，剩余标准差即均方误差可以直观地反映出观测值与拟合值之间的离散程度。剩余标准差越小，则说明拟合效果越好；反之，剩余标准差越大，则说明拟合效果越差。根据剩余标准差公式，基于反应速度关于反应物含量的模型我们得到如下目标函数：

$$\min\ Q(\beta)=\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{m}\left(\frac{\beta_4 x_2-\frac{x_3}{\beta_5}}{1+\beta_1 x_1+\beta_2 x_2+\beta_3 x_3}-y_i\right)^2}{m-2}},$$

其中，m 为样本数据个数，为方便起见，我们记 $\beta=(\beta_1,\beta_2,\beta_3,\beta_4,\beta_5)^{\mathrm{T}}$ 为待求参数，于是，模型转化为求解参数 β 使目标函数 $Q(\beta)$ 最小的全局优化问题。

针对以上问题，本文采用填充函数法进行求解。为了避免计算量过大等问题，将目标函数取完对数以后得到如下等价问题：

$$Q^*(\beta)=\ln(Q(\beta))=\frac{1}{2}\ln\left(\frac{1}{11}\sum_{i=1}^{13}\left(\frac{\beta_4 x_2-\frac{x_3}{\beta_5}}{1+\beta_1 x_1+\beta_2 x_2+\beta_3 x_3}-y_i\right)^2\right),$$

因此，只需要将 OPFF 算法中的目标函数 $f(x)$ 替换成 $Q^*(\beta)$，就可以得到相应的填充函数 $P(x,x_k^*,r)$。结合 β 的参考值赋予 β 初值 $\beta_0=(0.1,0.05,0.02,1,2)^{\mathrm{T}}$。通过 MATLAB 程序运行该算法，可以得到 β 的最优值 $\beta^*=(0.0627,0.0400,0.1123,1.2518,1.1921)^{\mathrm{T}}$。

将本文中的填充函数方法与文献[18]中的非线性回归方法进行结果对比，对比结果见表 11：

Table 11. Comparison of model solution results
表 11. 模型求解结果比较

求解方法	最优拟合参数 β^*	剩余标准差
填充函数法	$(0.0627, 0.0400, 0.1123, 1.2518, 1.1921)^T$	$S = 0.1648$
Levenberg-Marquardt 法	$(0.0628, 0.0400, 0.1124, 1.2526, 1.1914)^T$	$S = 0.1933$

从表中结果不难看出，参数 β^* 中的 β_4 和 β_5 对函数值 y 的影响更大，即反应物 n 戊烷和异构戊烷的含量对反应速度影响更为明显。并且，可以发现利用填充函数方法求得的剩余标准差比利用 Levenberg-Marquardt 法求得的剩余标准差小，因而与之对应的最优拟合参数 β^* 也更优。说明针对此问题，填充函数方法效果更好。因此，通过对此问题的分析，在一定程度上能够说明填充函数法在处理非线性模型方面的有效性，与此同时，在处理数据拟合问题方面，填充函数方法不失为一种选择。

参考文献

[1] Ge, R.P. (1987) The Theory of Filled Function Method for Finding Global Minimizers of Nonlinearly Constrained Minimization Problems. *Journal of Computational Mathematics*, **5**, 1-9.

[2] Ge, R.P. and Qin, Y.F. (1987) A Class of Filled Functions for Finding Global Minimizers of a Function of Several Variables. *Journal of Optimization Theory and Applications*, **54**, 241-252. https://doi.org/10.1007/bf00939433

[3] Liu, X. (2001) Finding Global Minima with a Computable Filled Function. *Journal of Global Optimization*, **19**, 151-161. https://doi.org/10.1023/a:1008330632677

[4] Lucidi, S. and Piccialli, V. (2002) New Classes of Globally Convexized Filled Functions for Global Optimization. *Journal of Global Optimization*, **24**, 219-236. https://doi.org/10.1023/a:1020243720794

[5] Wei, F., Wang, Y. and Lin, H. (2014) A New Filled Function Method with Two Parameters for Global Optimization. *Journal of Optimization Theory and Applications*, **163**, 510-527. https://doi.org/10.1007/s10957-013-0515-1

[6] Wu, Z.Y., Lee, H.W.J., Zhang, L.S. and Yang, X.M. (2005) A Novel Filled Function Method and Quasi-Filled Function Method for Global Optimization. *Computational Optimization and Applications*, **34**, 249-272. https://doi.org/10.1007/s10589-005-3077-9

[7] Gao, Y., Yang, Y. and You, M. (2015) A New Filled Function Method for Global Optimization. *Applied Mathematics and Computation*, **268**, 685-695. https://doi.org/10.1016/j.amc.2015.06.090

[8] Wang, C.J., Yang, Y.J. and Li, J. (2009) A New Filled Function Method for Unconstrained Global Optimization. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, **225**, 68-79. https://doi.org/10.1016/j.cam.2008.07.001

[9] He, Q.Y., Zhang, Y. and Wang, S.G. (2019) A New One-Parameter Filled Function Method and Its Application in Pathological Analysis. *Journal of Simulation*, **7**, 17-23.

[10] Lin, H., Gao, Y., Wang, X. and Su, S. (2018) A Filled Function Which Has the Same Local Minimizer of the Objective Function. *Optimization Letters*, **13**, 761-776. https://doi.org/10.1007/s11590-018-1275-5

[11] 张玉琴, 冯向东, 张建亮. 一个求解无约束优化的单参数填充函数算法[J]. 计算机技术与发展, 2020, 30(7): 38-41.

[12] Yan, Q., Chen, W. and Yang, X. (2023) A Novel One-Parameter Filled Function Method with an Application to Pathological Analysis. *Optimization Letters*, **18**, 803-824. https://doi.org/10.1007/s11590-023-02010-y

[13] Ma, S.Z., Yang, Y.J. and Liu, H.Q. (2010) A Parameter Free Filled Function for Unconstrained Global Optimization. *Applied Mathematics and Computation*, **215**, 3610-3619. https://doi.org/10.1016/j.amc.2009.10.057

[14] Ahmed, A.I. (2020) A New Parameter Free Filled Function for Solving Unconstrained Global Optimization Problems. *International Journal of Computer Mathematics*, **98**, 106-119. https://doi.org/10.1080/00207160.2020.1731484

[15] 屈德强, 尚有林, 詹悦, 等. 全局优化问题的一个新的无参数填充函数[J]. 运筹学学报, 2021, 25(1): 89-95.

[16] 陈佳利, 张莹, 王胜刚, 等. 一个新的填充函数及其在数据拟合问题中的应用[J]. 运筹学学报, 2021, 25(1): 81-88.

[17] An, L., Zhang, L.S. and Chen, M.L. (2004) A Parameter-Free Filled Function for Unconstrained Global Optimization. *Journal of Shanghai University* (*English Edition*), **8**, 117-123. https://doi.org/10.1007/s11741-004-0024-4

[18] 司守奎, 孙玺菁. 数学建模算法与应用[M]. 北京: 国防工业出版社, 2021: 218-219.