化工最优化基础

马国瑜 编

HUA GONG ZUI YOU HUA JI CHU

化学工业出版社

化工最优化基础

马国瑜 编

化学工业出版社

内 容 提 要

本书是一本化工最优化技术的入门读物。它从一般化工技术人员所具有的数学水平出发，结合实例、深入浅出地对最优化的基础知识和主要方法作了较全面的介绍。内容包括一维搜索、线性规划、无约束及有约束最优化问题、几何规划、动态规划及连续系统最优化问题的概念和基本方法，并在附录中介绍了本书用到的矩阵、向量函数等方面的基本数学知识。

本书可供系统工程、化学工程、管理科学、计算方法等方面的科技人员及大专院校教师、研究生和大学生阅读和参考。

化工最优化基础

马国瑜 编

*

化学工业出版社出版

（北京和平里七区十六号楼）

化学工业出版社印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行

*

开本787×1092 1/32印张8字数177千字印数1—8,000

1982年10月北京第1版1982年10月北京第1次印刷

统一书号15063·3424定价0.85元

前　言

最优化的概念是由来已久的，两点之间直线最短，周长一定、面积最大的矩形是正方形等等，都是人们熟知的最优化问题。

四十年代以前，主要是用微分法、变分法这些古典方法解决最优化的问题。在第二次世界大战中，由于战争的需要，为了解决复杂而繁重的后勤支援问题，提出了许多古典方法不能解决的最优化问题，因此创立了运筹学，产生了许多新的最优化计算方法。

战后，由于近代科学技术和生产突飞猛进的发展，工程技术日益复杂、精密、庞大，自动化的程度越来越高，对经济计划、生产管理都提出了许多要求，不论一个实验还是一项工程，必须在事先进行周密的分析判断，对应采取的策略在经济上产生的后果有一个定量的认识。这些实际需要，都大大促进了最优化理论和方法的发展。特别是由于电子计算机的日益大型化并趋于完备，快速计算技术的飞跃进步，使得许多最优化的方法得以实现。因此，六十年代以来，最优化得到了蓬勃的发展，它的广泛应用受到人们的普遍重视，已经形成了一个新的数学分支。

化工实际问题中，存在着大量最优化问题，不论是工程设计、科学实验，还是生产控制、计划管理等，人们总想采取种种措施，以得到消耗最少、产量最高、质量最好、速度最快亦即多、快、好、省的结果。目前在传热网络设计改造、合理配料、最优操作条件的选取、能源和资金的节约等

许多方面，已经取得了极为明显的效果。最优化的方法，已经成为每一个化学工程师和科学技术人员必须掌握的知识。

自七十年代初，我国的化工行业广泛开展了普及优选法等最优化方法，取得了许多成绩。近年来，由于电子计算机的广泛使用，对如何用最优化的方法处理一些大型问题和复杂问题，不仅提到日程上，而且有了解决的可能。许多科技人员迫切希望了解这些方法，还有不少人在接触最优化程序中，由于对其原理、特点和使用范围缺乏必要的认识，所以在解决实际问题时遇到许多困难，也急需了解各种最优化方法的基本原理。本书就是在这个背景下产生的一本入门的基础读物。作者试图通过较少的篇幅，使读者对最优化的全貌有一个大致的了解，对各种最优化方法，着重于直观地、简明扼要地讲清实质，为进一步学习和实践打一个基础。

本书所用的数学知识，以高等工科院校的“高等数学”为限。考虑到部分科技人员在线性代数方面的知识可能不足，在书末附录中，简要地讲解了本书所用的、有关这方面的内容，以供读者查阅。

本书承中国化工学会理事、北京化工学院傅举孚教授，中国数学会运筹学会理事、北京工业大学邓乃扬副教授，北京化工学院自动控制教研室任家时讲师，以及系统工程教研室黄椿鉴讲师审阅，他们对本书的编写给予许多有益的指导和帮助，特在此表示诚挚的感谢。

由于作者水平有限，书中一定有不少缺点和错误，敬请读者批评指正。

编者于北京化工学院

一九八一年　月

目　　录

前言

第一章　绪论 ………………………………………… 1

第一节　最优化问题举例 ………………………………… 1

第二节　最优化问题的基本概念 ………………………… 9

第三节　极值理论简介 …………………………………… 14

第四节　拟线性化 ………………………………………… 27

第二章　一维搜索 ……………………………………… 33

第一节　缩小搜索区间的方法 …………………………… 33

第二节　多项式插值法 …………………………………… 43

第三章　无约束最优化问题 …………………………… 53

第一节　算法概述 ………………………………………… 53

第二节　梯度法 …………………………………………… 55

第三节　座标轮换法 ……………………………………… 59

第四节　共轭梯度法 ……………………………………… 63

第五节　牛顿-拉夫森方法 ……………………………… 70

第六节　变度量法 ………………………………………… 73

第四章　约束最优化问题 ……………………………… 80

第一节　消元法 …………………………………………… 80

第二节　拉格朗日乘子法 ………………………………… 87

第三节　罚函数法与闸函数法 …………………………… 98

第四节　库恩-塔克条件与拉格朗日方法的推广 ……… 108

第五节　复合形法 ………………………………………… 114

第五章　线性规划 ……………………………………… 120

第一节　线性规划的基本概念和性质 …………………… 120

第二节　单纯形方法 ……………………………………… 127

第三节　人工变量 ………………………………………… 141

第四节　对偶线性规划……………………………………149
第六章　几何规划……………………………………153
第一节　概述……………………………………153
第二节　几何规划的对偶理论……………………………………155
第三节　几何规划问题举例……………………………………162
第四节　广义几何规划……………………………………169
第七章　动态规划……………………………………174
第一节　最短线路问题……………………………………174
第二节　动态规划的理论和方法……………………………………178
第三节　动态规划的应用……………………………………186
第八章　连续系统最优化问题……………………………………203
第一节　引言……………………………………203
第二节　连续型动态规划……………………………………206
第三节　变分法简介……………………………………212
第四节　连续系统的拉格朗日方法……………………………………217
第五节　最小值原理……………………………………225
附录……………………………………236
附录一　n维空间和n维向量……………………………………236
附录二　矩阵……………………………………238
附录三　n维空间上的函数……………………………………246
参考文献……………………………………248

李

第一章 绪　论

第一节 最优化问题举例

5
2
t

例 1　化学反应的参数估计和曲线拟合问题

通过实验，测得了化学反应中不同浓度、不同温度下组分的反应速度，怎样通过这些数据估计化学反应参数，如反应级数、反应速度常数等，这是一个很重要的问题。

已知反应速度 r 和浓度C、温度T满足下列函数关系

$$r = A\exp\left(-\frac{E}{RT}\right)C^n \qquad (1\text{-}1\text{-}1)$$

其中A、E、n为待估计的参数，R为常数，实验测得下列n组数据

C	$C_1 C_2 \cdots\cdots C_n$
T	$T_1 T_2 \cdots\cdots T_n$
r	$r_1 r_2 \cdots\cdots r_n$

若任给一组参数A、E、n，由式（1-1-1）可计算出对应于C_i、T_i的反应速度$\hat{r}_i$，即

$$\hat{r}_i = A\exp\left(-\frac{E}{RT_i}\right)C_i^n \qquad (1\text{-}1\text{-}2)$$

记$\Delta r_i = \hat{r}_i - r_i$，总偏差$\Delta r$的大小可用所有 Δr_i 的平方和来描述，即

$$\Delta r = \sum_{i=1}^{n} \Delta r_i^2 = \sum_{i=1}^{n}\left[A\exp\left(-\frac{E}{RT_i}\right)C_i^n - r_i\right]^2 \qquad (1\text{-}1\text{-}3)$$

这个总偏差随参数A、E、n变化，显然，参数的取值应使Δr越小越好，因此，参数估计问题就是求一组参数A、E、n，使Δr取最小值。

一般地说，已知某规律为

$$y=f(\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_m,\mathbf{t}) \tag{1-1-4}$$

$\mathbf{t}$代表若干个变量，$\alpha_1,\alpha_2\cdots,\alpha_m$为待估计的参数，由实验得下列数据

$$(t_1,y_1),\ (t_2,y_2),\ \cdots,\ (t_n,y_n)$$

则通过使函数

$$\delta(\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_m)=\sum_{i=1}^{n}[f(\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_m,\mathbf{t}_i)-y_i]^2 \tag{1-1-5}$$

取最小值，可得参数$\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_m$的最优估计。

通常，实验数据处理或通过实验数据求经验公式，也会产生同样的问题，这一类问题称为曲线拟合问题。

例如，有两个物理量x和y，根据某一规律，已知它们满足下列函数关系

$$y=f(a,b,c,x)=a+bx^c \tag{1-1-6}$$

其中a、b、c为待定常数。通过实验数据测得了n组数据

$$(x_1,y_1),\ (x_2,y_2),\cdots\cdots,(x_n,y_n)$$

显然，确定a、b、c的原则，应该是使这组数据在平面上对应的点所形成的曲线，与曲线$y=a+bx^c$有最好的“拟合”，这两条曲线拟合的程度，可以用它们的偏差平方之和最小作为判别的标准，即求a、b、c，使函数

$$\delta(a,b,c)=\sum_{i=1}^{n}(a+bx_i^c-y_i)^2 \tag{1-1-7}$$

取最小值。因此，函数$\delta(a,b,c)$的最小点，就是问题的解。

例 2　过程设计问题

设有一个连续搅拌反应器，连续注入反应物A的溶液，不断流出含有生成物B的溶液。又设此反应为二级反应，其反应方程为

$$\frac{dC_A}{dt} = -8.4C_A^2 \qquad (1\text{-}1\text{-}8)$$

式中C_A为反应物A的浓度。已知原料价格$P_A = 4(C_A^0)^{1.4}$(元/升)，搅拌操作费用$P_c = 0.75V^{0.6}$（元/小时），产品售价10元/克分子，其中C_A^0为进料浓度（克分子/升），V为反应器容积（升）。问题是如何选择进料浓度C_A^0，进料流速F_A^0（升/小时）转化因子E_A（反应物A转化为B的份数），及反应器容积V，使每小时的总收益最大。这个问题就是过程设计问题。

为了把这个问题变成一个数学问题，应求出总收入P与C_A^0、F_A^0、E_A、V的函数关系。

设F_B为每小时转化为B的克分子数，则每小时总收入为

$$P = 10F_B - P_AF_A^0 - P_c \qquad (1\text{-}1\text{-}9)$$

为了消去上式中的F_B，再求F_B与C_A^0、F_A^0、E_A、V的关系。由于是二级反应，反应物A每小时反应的克分子数应二倍于生成物B的克分子数，即

$$C_A^0F_A^0E_A = 2F_B \qquad (1\text{-}1\text{-}10)$$

代入式（1-1-9）则得

$$P = 5C_A^0F_A^0E_A - P_AF_A^0 - P_c \qquad (1\text{-}1\text{-}11)$$

容易看出C_A^0、F_A^0、E_A、V之间有一定的关系。将

$$C_A = C_A^0(1 - E_A) \qquad (1\text{-}1\text{-}12)$$

代入式（1-1-8）得

$$\frac{dC_A}{dt} = -8.4[C_A^0(1-E_A)]^2 \qquad (1\text{-}1\text{-}13)$$

另一方面，单位时间内物料A反应的克分子数为$-\frac{dC_A}{dt}V$，所以

$$-\frac{dC_A}{dt}V = C_A^0 F_A^0 E_A \qquad (1\text{-}1\text{-}14)$$

由式（1-1-13）及式（1-1-14）得

$$8.4[C_A^0(1-E_A)]^2 V = C_A^0 F_A^0 E_A \qquad (1\text{-}1\text{-}15)$$

即

$$8.4C_A^0(1-E_A)^2 V - E_A F_A^0 = 0 \qquad (1\text{-}1\text{-}16)$$

此外，由问题的实际意义应有

$$F_A^0,\ C_A^0,\ E_A,\ V \geqslant 0 \qquad (1\text{-}1\text{-}17)$$

这样，过程设计问题就是求函数

$$P = 5C_A^0 F_A^0 E_A - 4(C_A^0)^{1.4} F_A^0 - 0.75V^{0.6} \qquad (1\text{-}1\text{-}18)$$

的最大值，而变量C_A^0、F_A^0、E_A、V必须满足条件（1-1-16）、（1-1-17）。

例3　人字架最优设计问题

考虑图1-1-1所示钢管构成的人字架。设钢管半跨度为s，钢管的平均直径为x_1，管壁厚为x_2，人字架高为x_3，钢管的密度为ρ。在承受压力2W的条件下，确定x_1，x_2，x_3，使钢管的重量最小。

容易算出，钢管的重量为

$$G = 2\pi\rho x_1 x_2 (s^2 + x_3^2)^{\frac{1}{2}} \qquad (1\text{-}1\text{-}19)$$

此外，还有如下限制条件：

1．由于空间的限制，人字架高度不得超过H，即

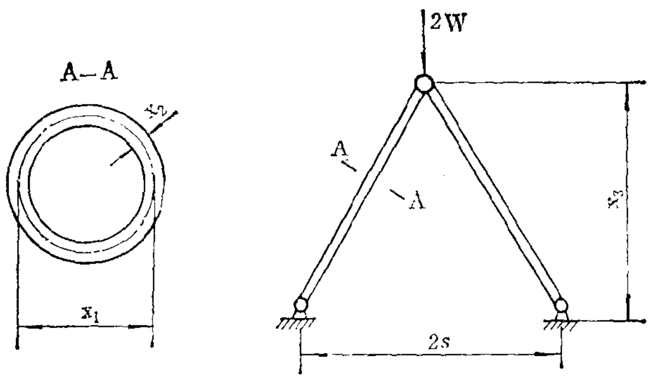

图 1-1-1

$$x_3 \leqslant H \tag{1-1-20}$$

2．压应力不能超过材料的容许应力$[\sigma_{bc}]$。容易算出，在负荷2W的作用下，杆件上的压应力为

$$\sigma = \frac{W(s^2+x_3^2)^{\frac{1}{2}}}{\pi x_1 x_2 x_3} \tag{1-1-21}$$

故应有

$$W(s^2+x_3^2)^{\frac{1}{2}} \leqslant \pi x_1 x_2 x_3 [\sigma_{bc}] \tag{1-1-22}$$

这个限制称为屈服约束。

3．压应力不能超过临界应力σ_e。临界应力可由欧拉公式算得

$$\sigma_e = \frac{\pi^2 E(x_1^2+x_2^2)}{8(s^2+x_3^2)} \tag{1-1-23}$$

其中E是材料的杨氏模量，故应有

$$W(s^2+x_3^2)^{\frac{3}{2}} \leqslant \frac{1}{8}\pi^3 E x_1 x_2 x_3 (x_1^2+x_2^2) \tag{1-1-24}$$

这个限制称为屈曲约束。

总结以上的讨论，人字架的最优设计问题就是求函数

$$G=2\pi\rho x_1x_2(s^2+x_3^2)^{\frac{1}{2}} \qquad (1-1-25)$$

的最小值，变量x_1、x_2、x_3的限制条件为

$$x_3-H\leqslant 0 \qquad (1-1-26)$$

$$W(s^2+x_3^2)^{\frac{1}{2}}-\pi x_1x_2x_3[\sigma_{bc}]\leqslant 0 \qquad (1-1-27)$$

$$W(s^2+x_3^2)^{\frac{3}{2}}-\frac{1}{8}\pi^3Ex_1x_2x_3(x_1^2+x_2^2)\leqslant 0 \qquad (1-1-28)$$

$$x_1,\ x_2,\ x_3>0 \qquad (1-1-29)$$

例 4　运输问题

设某公司有同一类型的工厂分布在 n 个地方，每个地方每年需同一种原料b_1，b_2,…，b_n（吨），又有m个原料产地各产该种原料a_1，a_2,…,a_m（吨），设从第 i 处原料产地运到第 j 个工厂的单位运价为c_{ij}（元/吨），如何确定从第 i 个原料产地运到第 j 个工厂的发货量x_{ij}，使总运费最省。

a_i，b_j，x_{ij}的关系可列成下表：

	b_1	b_2	………………	b_n
a_1	x_{11}	x_{12}	………………	x_{1n}
a_2	x_{21}	x_{22}	………………	x_{2n}
⋮		…………	………………	…………
a_m	x_{m1}	x_{m2}	………………	x_{mn}

从表中可以看出，第 i 行第 j 列的元素，就是从第 i 处产地运到第 j 个工厂的发货量，第 i 行各元素之和表示从第 i 处

产地运出的原料总量，显然它不应大于第 i 处产地的总产量，即

$$x_{i1}+x_{i2}+\cdots+x_{in}\leqslant a_i \quad (i=1,2,\cdots,m) \tag{1-1-30}$$

第 j 列各元素之和表示第 j 个工厂的总接受量，根据问题要求，它应等于第 j 个工厂所需原料的总量，即

$$x_{1j}+x_{2j}+\cdots+x_{mj}=b_j \quad (j=1,2,\cdots,n) \tag{1-1-31}$$

总之，运输问题可归结为求总运费的最小值，即求函数

$$\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n} c_{ix}x_{ij} \tag{1-1-32}$$

的最小值，变量x_{ij}满足如下条件

$$\sum_{j=1}^{n} x_{ij}\leqslant a_i \quad (i=1,2,\cdots,m) \tag{1-1-33}$$

$$\sum_{i=1}^{m} x_{ij}=b_j \quad (j=1,2,\cdots,n) \tag{1-1-34}$$

$$x_{ij}\geqslant 0 \quad (i=1,2,\cdots,m;\ j=1,2,\cdots,n) \tag{1-1-35}$$

例 5 反应器控制问题

设有一连续反应

$$X\rightarrow Y\rightarrow Z$$

X和Y的浓度分别记为x和y，其反应方程为

$$\frac{dx}{dt}=-a(\theta)F(x) \tag{1-1-36}$$

$$\frac{dy}{dt}=na(\theta)F(x)-b(\theta)G(y) \tag{1-1-37}$$

其中θ为温度，n为常数，a、b、F、G为已知函数。现在要讨论在〔0, T〕时间内，如何控制反应器的温度θ，使Y的产量最高。

由于

$$\int_0^T \frac{dy}{dt}dt = y(T) - y(0) \tag{1-1-38}$$

y(0)为Y的初始浓度，由上式可求出

$$y(T) = y(0) + \int_0^T [na(\theta)F(x) - b(\theta)G(y)]dt \tag{1-1-39}$$

显然当y(T)最大时，Y的产量最高，因此这个反应器控制问题可归结为求反应温度θ，使函数y(T)取最大值，其附加条件为（1-1-36）及（1-1-37）。

例6　非线性方程组求解问题

化工实际问题中，常常要求解非线性方程组，这种问题通常可用迭代方法求解。例如非线性方程组

$$\begin{aligned} &f_1(x_1, x_2, \cdots, x_n) = 0 \\ &f_2(x_1, x_2, \cdots, x_n) = 0 \\ &\cdots\cdots \\ &f_n(x_1, x_2, \cdots, x_n) = 0 \end{aligned} \tag{1-1-40}$$

可以改写为如下便于迭代的形式

$$x_i = x_i + f_i(x_1, x_2, \cdots, x_n) = G_i(x_1, x_2, \cdots, x_n) \quad (i = 1, 2, \cdots, n) \tag{1-1-41}$$

于是迭代公式可取为

$$x_i^{(k+1)} = G_i(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \cdots, x_n^{(k)}) \quad (i = 1, 2, \cdots, n) \tag{1-1-42}$$

其中$x_i^{(k)}$为第k次迭代的结果，由上式求出第k+1次迭代

的结果$x_i^{(k+1)}$。给定初值$x_i^{(0)}$后，利用式（1-1-42）可求得各次迭代的数值。

随着自变量个数及方程组非线性程度的增加，这种求解方法变得越来越困难，而且收敛的速度很慢。由于最优化方法的发展，目前常把这类非线性方程组的求解问题变为一个求函数最小值的问题。

对非线性方程组（1-1-40）可构造一个新函数

$$F(x_1,x_2,\cdots,x_n)=\sum_{i=1}^{n} f_i^2(x_1,x_2,\cdots,x_n) \tag{1-1-43}$$

由于此函数是平方和的形式，因此有

$$F(x_1,x_2,\cdots,x_n)\geqslant 0 \tag{1-1-44}$$

若方程组（1-1-40）有解（$x_1^*,x_2^*,\cdots,x_n^*$），则此解满足

$$F(x_1^*,x_2^*,\cdots,x_n^*)=0 \tag{1-1-45}$$

亦即（$x_1^*,x_2^*,\cdots,x_n^*$）就是函数F的最小点。所以求解非线性方程组（1-1-40）的问题，可转化为求函数$F(x_1,x_2,\cdots,x_n)$的最小值问题。

第二节　最优化问题的基本概念

一、最优化问题的数学形式

上节给出的几个例子，虽然它们的形式有所不同，但除例5外，有如下共同的特点：

1．每个问题都有需要选择或进行调整的变量，例如例1中的$\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_m$，例2中的$C_A^0$，$F_A^0$，$E_A$，V。通常将变量记作$x_1,x_2,\cdots,x_n$,并用向量$\mathbf{x}=(x_1,x_2,\cdots,x_n)^T$表示它们。

2．每个问题都是求一个函数$f(x_1,x_2,\cdots,x_n)$的最大值或最小值，例如例1是求函数$\delta(\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_m)$的最小值，例

2 是求函数$P=5C_A^0F_A^0E_A-4(C_A^0)^{1.4}F_A^0-0.75V^{0.6}$的最大值。这个函数称为目标函数，有时简记为$f(\mathbf{x})$，其中$\mathbf{x}=(x_1,\ x_2,\ \cdots,x_n)^T$。

由于目标函数$f(\mathbf{x})$的最小值就是$-f(\mathbf{x})$的最大值，所以常常只讨论目标函数的最小值问题。

3. 某些问题对变量附加了一些限制条件，如例 2 的(1-1-16)、(1-1-17)，例3的(1-1-26)、(1-1-27)、(1-1-28)、(1-1-29)。这些限制条件称为约束条件，由于它们又有等式和不等式两种形式，所以又分别称为等式约束条件和不等式约束条件。例如（1-1-16）是等式约束条件，(1-1-17)是不等式约束条件。

具有以上特点的问题在实质上是同一类问题，它们都是求满足约束条件的点，该点使目标函数取最小值，这类问题称为最优化问题，没有约束条件的问题是一种特殊情况。最优化问题的一般形式为

$$
\begin{aligned}
&\min f(\mathbf{x}) \\
&\text{约束条件}\quad h_i(\mathbf{x})=0 \qquad (i=1,2,\cdots,m) \\
&\qquad\qquad\quad g_j(\mathbf{x})\leqslant 0 \qquad (j=1,2,\cdots,l)
\end{aligned}
\tag{1-2-1}
$$

式中 $\mathbf{x}=(x_1,x_2,\cdots x_n)^T$。这里有m个等式约束条件和 l 个不等式约束条件，显然它包括了例 1 、 2 、 3 、 4 、 6 的各种情况。如无特殊声明，本书所说的最优化问题就是这类问题。

例 5 是另一类最优化问题，它的约束条件是微分方程的形式，目标函数也属于另一种类型，这类问题将在第八章专门讨论。

二、最优化问题的类型

由于目标函数和约束条件的类型不同，求解最优化问题