朱伟勇等编著

ZUIYOU SHEJI LILUN YU YINGYONG

# 最优设计理论与应用

辽宁人民出版社

# 最优设计理论与应用

朱伟勇　等编著

辽宁人民出版社
一九八一年·沈阳

最优设计理论与应用
朱伟勇等编著
·
辽宁人民出版社出版
（沈阳市南京街6段1里2号）
辽宁省新华书店发行
朝阳六六七厂印刷
·
开本：850×1168 1/32 印张：18 1/4 插页：7
字数：454,000 印数：1—5,000
1981年8月第1版 1981年8月第1次印刷
统一书号：15090·89 定价：2.25元

# 前　言

最优设计理论与应用（或更准确地说，最优回归设计理论及应用）是一门比较新的和迅速发展的数理统计学科的一个分支。最优设计对解决科学试验中建立数学模型、获得最佳工艺条件和质量控制等问题，是一种极其有效的统计数学工具。

最优设计理论及应用在最近二十年中发展较快，世界各国对其理论的研究十分活跃，每年均有大量的论文发表。在国内，这方面的应用遍及采矿、钢铁冶金、有色冶炼、金属材料、机械制造、自动控制、轻化工等等领域内，并取得较好的成果，深受有关专业的教师和工程技术人员的欢迎。

本书大部分内容，是从一九七六年以来分别在冶金部北京钢铁研究院、冶金部标准研究所、北京矿山研究院、沈阳冶炼厂有色金属研究所、湖北农机研究所、沈阳市科学技术协会、中国现场统计研究会辽宁分会等单位举办的十几次短训班中所用讲稿的基础上，收集了东北工学院采矿系、钢冶系、机械系、材料系和有色系等有关科研组取得的应用成果，进行整理、补充、修改而写成的。

本书共分七章，第一章至第六章由朱伟勇执笔，第七章由关颖男执笔。前三章为最优设计的理论部分，主要应用广义逆矩阵、投影算子理论证明回归问题的优良性，后四章涉及最优设计的几个重要定理以及构造最优设计方案的具体方法。通过三十多个实际例子详细说明如何应用各种最优设计的方法和它们的统计分析。此外，还附有回归正交设计“最优化”问题的电子计算机程序。



14/33

本书的理论部分得到中国科学院系统科学研究所数理统计研究室研究员张里千、副研究员项可风，武汉大学应用数学研究室教授张尧庭，华东师范大学数学系概率统计室副教授茆诗松等同志的指教，在此表示衷心的谢意。

此外，参加本书编写的还有东北工学院数学系数理统计组王淑琴、冯学渊、李启国和赵广畲等同志。

由于编著者的水平有限，肯定有错误和不妥之处，恳切希望批评指正。

一九八〇年八月

# 目　　录

四

# 第一章　广义逆矩阵及求逆公式

本章所叙述的广义逆矩阵及四块求逆公式，为第二章回归问题的最优设计（优良性问题）作理论准备。

## §1　空间的分解

### 一、子空间的直接和

设$W$和$V$为空间$R^n$中的两个子空间，它们的和集：即子空间$W$的每一个向量$w$和$V$中的每一个向量$\nu$的和向量$w+\nu$的全体所构成的集合

$$U=\{u \mid u=w+\nu,\ w\in W,\ \nu\in V\},$$

称为子空间$W$与$V$的和空间。首先可知，$U$也是$R^n$的一个子空间，即它具有性质：

（1）若$u\in U$，则$\lambda u\in U$，$\lambda$为任一实数；

（2）若$u_1$，$u_2\in U$，则$u_1+u_2\in U$。

证明　1）因为$u\in U$，它可以表示成某两个向量$w$与$\nu$之和，其中，$w\in W$，$\nu\in V$。即

$$u=w+\nu. \tag{1—1}$$

对任意的实数$\lambda$，$\lambda w\in W$，$\lambda\nu\in V$，所以

$$\lambda u=\lambda(w+\nu)=\lambda w+\lambda\nu\in U.$$

2）设$u_1$，$u_2\in U$，则$u_1$，$u_2$都可以表示成

$$u_1=w_1+\nu_1,$$

$$u_2=w_2+\nu_2.\quad w_1,\ w_2\in W,\ \nu_1,\ \nu_2\in V.$$

由于$w_1+w_2\in W$，$\nu_1+\nu_2\in V$，所以

$$u_1+u_2=(w_1+w_2)+(v_1+v_2)\in U.$$

子空间$U$为$W$与$V$之和这个关系，可以表示成

$$U=W+V. \tag{1—2}$$

**定理1—1** 若子空间$W$与子空间$V$除0外无任何其它共同元素，则表达式（1—1）是唯一的.

**证明** 对任意的向量$u\in U$，若有两个表达式

$$u=w_1+v_1=w_2+v_2,$$

则必有

$$(w_1-w_2)+(v_1-v_2)=0.$$

如果，$v_1\neq v_2$，则

$$w_1-w_2=-(v_1-v_2)\neq 0.$$

这说明$w_1-w_2$和$v_1-v_2$均应为$W$和$V$的共同元素，由于它们都是非零向量，这是不可能的. 从而必有

$$w_1-w_2=-(v_1-v_2)=0,$$

即$w_1=w_2$，$v_1=v_2$. 这就证明表达式(1—1)是唯一的. 证毕.

今假设任何$u\in U$，表达式（1—1）都是唯一的，则子空间$W$和子空间$V$除0外无任何其它共同元素.

**定义1—1** 设子空间$W$和$V$除0外无任何其它共同元素，我们便称$U$为子空间$W$和$V$的直接和. 记作

$$U=W\oplus V. \tag{1—3}$$

## 二、空间$R^n$的直交（正交）分解

设$W$和$V$为空间$R^n$的两个子空间，它们除0外无任何其它共同元素. 若

$$R^n=W\oplus V, \tag{1—4}$$

则称$W$和$V$（或1—4）为$R^n$的一种分解.

**定义1—2** 若子空间$V$中的任何元素$v$和$W$中的所有元素都直交，则把子空间$V$记作

$$V=W^{\perp}.$$

并称之为子空间$W$的直交补空间．这时，（1—4）可以改写为

$$R^n = W \oplus W^{\perp}. \qquad (1—5)$$

对于一般情形，我们也称$V$为$W$的补空间．而称（1—5）为空间$R^n$的一种直交分解．

在子空间$W$给定以后，由于$W^{\perp}$不是别的，而正是$R^n$中与$W$的所有向量均直交的一切向量所构成的子空间，所以，$W^{\perp}$便被唯一地确定了．对于一般情形，在$W$给定以后，分解式（1—3）不是唯一的．

**例** 在$R^2$中，取$W=\{e_1\}$，则

$$W^{\perp}=\{e_2\},$$

所以

$$R^2=\{e_1\}\oplus\{e_2\}=\{e_1\}\oplus\{e_1\}^{\perp}.$$

但若取$V=\{e_1+e_2\}$，则$R^2$有分解式

$$R^2=\{e_1\}\oplus\{e_1+e_2\}.$$

## 三、维数关系

设$R^n$的一种分解为

$$R^n=W\oplus V.$$

我们有

**定理1—2** 若子空间$W$的维数为$r$记为 $\dim W=r$，则子空间$V$的维数 $\dim V=n-r$.

证明，子空间$W$的维数为$r$，则表示$W$中的最大线性独立系中的向量个数为$r$．设$a_1$，…，$a_r$为$W$中的一个独立系，它们便构成了子空间$W$的一个基底．设 $\dim V=s$，则在$V$中同样存在有最大的线性独立系 $b_1$，…，$b_s$．

首先可知，向量系，$a_1$，…，$a_r$，$b_1$,…，$b_s$必为线性独立．因为，$R^n$中的任何向量$x$都可以唯一地表示成

$$x=w+v,\ w\in W,\ v\in V,$$

而$w$和$v$又可以唯一地分别表示成$a_1$，…，$a_r$及$b_1$，…，$b_s$

的线性组合：

$$w=\sum_{i=1}^{r}C_i\boldsymbol{a}_i,\quad \boldsymbol{v}=\sum_{i=1}^{S}C_i'\boldsymbol{b}_i.$$

从而可知：$\boldsymbol{x}$ 可唯一地表示成

$$\boldsymbol{x}=C_1\boldsymbol{a}_1+\cdots+C_r\boldsymbol{a}_r+C_1'\boldsymbol{b}_1+\cdots+C_S'\boldsymbol{b}_S. \qquad (1—6)$$

再根据线性代数中已知定理，若向量$\boldsymbol{x}$ 能唯一地表示成向量系 $\boldsymbol{a}_1$，…，$\boldsymbol{a}_r$，$\boldsymbol{b}_1$,…，$\boldsymbol{b}_S$ 为线性独立。根据表达式（1—6）的唯一性可证，向量系 $\boldsymbol{a}_1$，…，$\boldsymbol{a}_r$，$\boldsymbol{b}_1$，…，$\boldsymbol{b}_S$构成 $R^n$ 的一个基底，从而可知 $n=r+s$。即

$$s=n-r$$

或

$$\dim V=n-r.$$

推论　若 $R^n=W\oplus V$，则

$$\dim R^n=\dim W+\dim V. \qquad (1—7)$$

# § 2　投影算子

## 一、投影算子的意义和性质

设

$$R^n=W\oplus V$$

为空间 $R^n$ 的一种分解，则任何 $n$ 维向量$\boldsymbol{x}\in R^n$ 都可以唯一地表示成

$$\boldsymbol{x}=w+v,\quad w\in W,\quad v\in V.$$

今规定

$$P\boldsymbol{x}=w,\quad \boldsymbol{x}\in R^n,\quad w\in W, \qquad (1—8)$$

我们把从 $R^n$ 到子空间$W$的这种变换（或映射）$P$称为从 $R^n$ 沿子空间$V$向子空间$W$上的投影。并称$P$为一投影算子。

投影算子$P$把整个空间 $R^n$ 变换成子空间 $W$。其中，若$\boldsymbol{x}\in W$，则$P\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}$，即算子$P$作用子空间$W$中的向量时，结果

不变，这就是说

$$PW=W.$$

因此，我们又称$W$为算子$P$的不变子空间。在一般情况，我们称$w$为$x$在子空间$W$上的像，而称$W$为算子$P$的像空间。由于对任何$v\in V$，都有

$$Pv=0,$$

所以，称$V$为算子$P$的零空间，记作$N(P)$。

算子$P$具有下列重要性质：

（1）算子$P$具有线性性质，即对任意的向量$x$，$y\in R^n$，以及任意的实数$\lambda$和$\mu$，恒有

$$P(\lambda x+\mu y)=\lambda P(x)+\mu P(y). \tag{1—9}$$

所以又称$P$是一种线性算子。

（2）算子$P$具有等幂性，即$P^2=P$。

证明　对任意的$x\in R^n$，$x=w+v$，

$$w\in W,\ v\in V,$$

$$P^2x=PPx=Pw=w=Px$$

由于$x$是任意的，所以$P^2=P$。特称$P$为等幂算子。

**定理1—3**　设$P$为定义在$R^n$上的任一线性算子，其像在$R^n$内，欲其为一投影算子，其充分必要条件为：$P$为等幂算子。

证明　前已证明投影算子为等幂算子，今只需证明条件的充分性即可。

设$P$为等幂，即$P^2=P$，今规定

$W=\{w\mid$存在有$x\in R^n$，使$Px=w\}$。首先可知，$W$必为一子空间。因为，设$w_1$，$w_2$为$W$中任意二向量，则存在有向量$x_1$，$x_2\in R^n$，使$Px_1=w_1$，$Px_2=w_2$。

由于$P$为线性算子，所以，对任意的实数$\lambda$和$\mu$，

$$\begin{aligned}P(\lambda x_1+\mu x_2)&=\lambda Px_1+\mu Px_2\\&=\lambda w_1+\mu w_2\end{aligned}$$

从而可知$W$为一子空间。

据$P$的等幂性，

$$P^2x = Pw = Px = w,$$

所以$W$为算子$P$的不变子空间。

今规定$V$为算子$P$的零空间，即$v \in V$，必须且只需$Pv = 0$。显然，$V$也是一个子空间，且

$$R^n = W \oplus V.$$

**定义1—3** 从$R^n$沿$W$到$V$上的投影算子$I-P$，称为算子$P$的补投影算子。

**定理1—4** （1）设$P_i$为沿子空间$V_i$到$W_i$上的投影算子，$i=1, 2$，则欲使$P = P_1 + P_2$为投影算子，其充分必要条件为：$P_1P_2 = P_2P_1 = 0$。这时，$P$为沿$V_1$与$V_2$的交集$V = V_1 \cap V_2$（即$V_1$和$V_2$的共同部分）到$W = W_1 \oplus W_2$上的投影算子。

（2）若要$P = P_1 - P_2$为投影算子，其充分必要条件为：$P_1P_2 = P_2P_1 = P_2$。这时，$P$为沿子空间$V = V_1 \oplus W_2$到$W = W_1 \cap V_2$上的投影算子。

（3）若要$P = P_1P_2$为投影算子，只需

$$P_1P_2 = P_2P_1, \tag{1—10}$$

这时，$P$为沿$V = V_1 + V_2$到$W = W_1 \cap W_2$上的投影算子。

直交（正交）投影算子。设$P$为沿子空间$V$到子空间$W$上的投影算子，若$V = W^{\perp}$，则称$P$为一个直交投影算子。

直交投影算子除具有等幂性外，还具有自共轭性质。也就是说，对任意的$x$，$y \in R^n$恒有

$$(x, Py) = (Px, y). \tag{1—11}$$

证明　设$x = w_1 + v_1$，$y = w_2 + v_2 \in R^n$，$w_1$，$w_2 \in W$，$v_1$，$v_2 \in W^{\perp}$。

则

$$(x, Py) = (w_1 + v_1, P(w_2 + v_2)) = (w_1 + v_1, Pw_2)$$

$$= (w_1 + v_1, w_2) = (w_1, w_2),$$

$$(Px, y) = (P(w_1 + v_1), w_2 + v_2) = (w_1, w_2 + v_2)$$

$$= (w_1, w_2),$$

所以有 $(x, Py) = (Px, y)$.

## 二、投影算子的矩阵表示

设 $P$ 为从 $R^n$ 沿子空间 $V$ 到子空间 $W$ 上的投影算子，且 $\dim W = r$，$\dim V = n-r$，设 $w_1$，…，$w_r$ 及 $v_r, \cdots, v_{n-r}$ 分别为 $W$ 和 $V$ 的一个基底，这两组向量合起来构成 $R^n$ 的一个基底。根据投影算子的性质，

$$Pw_i = w_i, \quad i = 1, 2, \cdots, r;$$

$$Pv_i = 0, \quad i = 1, 2, \cdots, n-r,$$

作矩阵

$$A = [w_1, \cdots, w_r],$$

$$B = [v_1, \cdots, v_{n-r}],$$

并令分块矩阵 $C = [A \vdots B]$，则显然有

$$PC \equiv [Pw_1, \cdots, Pw_r, Pv_1, \cdots, Pv_{n-r}] = [A \vdots O].$$

因为 $w_1$，…，$w_r$，$v_1$，…，$v_{n-r}$ 为线性独立，所以 $rk[C] = n$，即 C 可求逆，从而便得到了投影算子 $P$ 的一种矩阵表示：

$$P = [A \vdots O]C^{-1} = [A \vdots O][A \vdots B]^{-1}. \qquad (1\text{—}12)$$

直交投影算子的矩阵表示　直交投影算子为投影算子的一种特例. 若 $P$ 为从 $R^n$ 沿 $V$ 到 $W$ 上的直交投影算子，则由于 $V = W^{\perp}$，所以（1—12）中的矩阵 $A$ 的列向量和 $B$ 的列向量互相直交，即

$$A'B = O,$$

这里的 $O$ 为 $r \times (n-r)$ 阶零矩阵. 据此可以简化公式（1—12）. 其法如下：

由于

$$([A \vdots B]'[A \vdots B])^{-1} = [A \vdots B]^{-1}([A \vdots B]')^{-1}$$

$$= \left(\begin{bmatrix} A' \\ B' \end{bmatrix}[A \vdots B]\right)^{-1} = \begin{bmatrix} A'A & O \\ O & B'B \end{bmatrix}^{-1}$$

$$= \begin{bmatrix} (A'A)^{-1} & O \\ O & (B'B)^{-1} \end{bmatrix},$$

所以

$$[A \vdots B]^{-1} = \begin{bmatrix} (A'A)^{-1} & O \\ O & (B'B)^{-1} \end{bmatrix} [A \vdots B]'$$

$$= \begin{bmatrix} (A'A)^{-1} & O \\ O & (B'B)^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A' \\ B' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (A'A)^{-1}A' \\ (B'B)^{-1}B' \end{bmatrix}.$$

因此，代入(1—12)便得

$$P = [A \vdots O][A \vdots B]^{-1} = [A \vdots 0] \begin{bmatrix} (A'A)^{-1}A' \\ (B'B)^{-1}B' \end{bmatrix}$$

$$= A(A'A)^{-1}A'. \qquad (1—13)$$

公式（1—13）便是所求的直交投影算子的矩阵表示。

## §3 广义逆矩阵概念

### 一、投影算子和相容方程组的解

在线性代数中已经讨论过线性方程组

$$Ax = b \qquad (1—14)$$

的相容性问题（若方程组（1—14）有解，不论是唯一的还是无穷多个，就称为相容的，否则，便称为不相容的或矛盾的）。上式中的$A$是一个$m \times n$阶的实矩阵，可以记作$A \in L^{m \times n}$，而$x \in R^n$，$b \in R^m$。方程组（1—14）相容的充要条件可以表示成

$$b \in \mu(A), \qquad (1—15)$$

即向量 $b$ 应在矩阵 $A$ 的像空间内（实质上研究向量 $\boldsymbol{b}$ 在什么条件下能够表示成 $A$ 的列向量的线性组合问题）。设存在 $G\in L^{n\times m}$，使

$$AG=P_A, \qquad (1\text{—}16)$$

其中 $P_A$ 表示从 $R^m$ 到 $A$ 的像空间 $\mu(A)$ 上的直交投影算子，$AG$ 是它的矩阵表示。在方程组（1—14）相容时，$\boldsymbol{b}\in\mu(A)$，所以 $P_A\boldsymbol{b}=\boldsymbol{b}$。若令

$$\boldsymbol{x}=G\boldsymbol{b}, \qquad (1\text{—}17)$$

则（1—17）便是方程组（1—14）的一个解。因为

$$A\boldsymbol{x}=AG\boldsymbol{b}=P_A\boldsymbol{b}=\boldsymbol{b}.$$

关于齐次方程组 $A\boldsymbol{x}=0$，其解 $\boldsymbol{x}$ 在 $A'$ 的列向量所张的子空间 $\mu(A')$ 的直交补空间 $\mu(A)^{\perp}$ 内。反之亦然。若 $A$ 的秩为 $r$，则

$$\dim\mu(A')=r,\ \dim\mu(A')^{\perp}=n-r, \qquad (1\text{—}18)$$

而 $\mu(A')$ 和 $\mu(A')^{\perp}$ 为 $R^n$ 的一种直交分解。从而可以看出，齐次方程组的解也可以用投影算子来表示。

## 二、广义逆矩阵和线性方程组的求解问题

在研究普通的非奇异方程组求解问题时，产生了熟知的逆矩阵概念。在研究一般的相容方程组(1—14)的求解问题时，产生了$G$，其作用与通常的逆矩阵类似。这样的矩阵$G$，可以看成是通常的逆矩阵的推广，或称之为一种广义逆矩阵。可见，逆矩阵的概念直接联系到线性方程组的求解问题。而线性方程组的求解问题又有许多类型，因此，可以对有关的线性方程组的求解问题，建立相应的广义逆矩阵概念。

关于线性方程组的求解问题，今就其常见者列举如下：

**1. 相容方程组（1—14）的求解问题**

在矩阵 $A$ 的秩小于 $n$ 时，解不是唯一的。从而，相应的广义逆矩阵也不是唯一的。