

工程最优化技术

薛履中 编著



天津大学出版社

工程最优化技术

薛履中 编著

*

天津大学出版社出版

(天津大学内)

河北省永清县印刷厂印刷

新华书店天津发行所发行

*

开本: 787×1092毫米1/16印张: 28字数: 700千字

1989年3月第一版 1989年3月第一次印刷

印数: 1—3300

ISBN 7-5618-0090-8

O·8

定价: 4.60元

前 言

最优化技术是随着电子计算机的发展和社会实践的需要而迅速发展起来的一门新学科。它在工程设计、计划管理、生产控制和科学实验等许多方面已得到了广泛的应用,获得了很大的收益,引起了工程技术人员和管理人员的兴趣和重视。

本书从工程应用的角度出发,系统和广泛地介绍最优化的基本理论和实际应用中比较有效的算法。内容包括静态最优化、动态最优化、实际最优化问题的解题指南及计算程序四部分。第二章至第七章讨论静态最优化方法。第八、九两章讨论动态最优化方法。第十章讨论多目标优化问题的解法。第十一章为最优化计算的实用指南。最后在附录中给出一个最优化计算程序包。本书取材较新,注意反映这门学科最近成果。例如,包括了约束变尺度法等近年来才发展起来的有效算法、日益受到重视的不精确一维搜索技术、动态最优化的数值方法等等。对大规模问题的解法和八十年代在理论上有重大意义的线性规划多项式算法也作了简介。

本书以作者1980年来为工科高年级学生和研究生以及各类工程技术人员授课的讲义为基础,经过多次修改与补充而写成。

本书是一本实用教材,全书以工程技术人员所需的实际解题技术为中心课题。对各种方法尽量说明它们的基本思想和算法中每一步的依据,并引入一定数量的工程应用例题,对如何应用各种优化方法解决实际问题作了示范,以适于教学与自学。具有微积分和线性代数基础知识的广大读者都能读懂本书。为了帮助一些线性代数方面知识不足的读者学习,在第一章中简要地介绍了本书所用的一些基本的线性代数知识。

为使读者能通过计算实践获得实际解题经验,本书在附录中提供了一个使用简便、可在IBM-PC微型计算机上运行的计算程序包。读者只要具有一些初步的优化理论或程序设计知识,就可简易、快速地使用这个程序包中的各种方法,开始着手解决实际工程优化问题。

本书可作为大专院校有关专业高年级学生和研究生教材或教学参考书,也可作为从事工程设计、经济管理、系统工程、自动控制、计算数学、应用数学和运筹学等方面的工程技术人员和科研人员的参考书或培训教材。

本书承南开大学数学系孙澈教授仔细审阅,作者在此谨向孙澈教授表示衷心感谢。

由于水平和经验有限,书中难免有不少缺点和错误,恳请读者批评指正。

编 者

1988年1月

目 录

第一章 概述.....	(1)
§ 1.1 最优化技术的发展	(1)
§ 1.2 最优化在工程中的应用	(2)
§ 1.2.1 工程最优设计	(2)
§ 1.2.2 操作分析与制定计划	(4)
§ 1.2.3 工程分析与数据处理	(5)
§ 1.2.4 过程动态特性与最优控制方案的研究	(6)
§ 1.3 最优化问题的几个基本概念	(6)
§ 1.3.1 向量空间和矩阵	(6)
§ 1.3.2 目标函数与等值线	(11)
§ 1.3.3 约束条件与可行域	(13)
§ 1.3.4 最优化问题的数学模型	(14)
§ 1.3.5 算法	(15)
参考文献	(15)
第二章 线性规划.....	(16)
§ 2.1 建立线性规划问题数学模型的实例	(19)
§ 2.2 二维问题的图解法	(19)
§ 2.3 线性规划问题的几种特殊情况	(20)
§ 2.3.1 有无限个最优解	(20)
§ 2.3.2 无界可行域	(21)
§ 2.3.3 可行域为空集	(22)
§ 2.4 线性规划的基本定理	(22)
§ 2.4.1 凸集与顶点	(22)
§ 2.4.2 两个重要性质	(23)
§ 2.5 线性规划的标准形式	(23)
§ 2.5.1 将等式约束的右端化为非负	(24)
§ 2.5.2 化不等式为等式	(24)
§ 2.5.3 自由变量的处理	(25)
§ 2.5.4 化最大值问题为最小值问题	(25)
§ 2.6 单纯形法	(26)
§ 2.6.1 几个基本概念	(26)
§ 2.6.2 单纯形法的基本思想	(28)
§ 2.6.3 单纯形表格与解题步骤	(31)
§ 2.6.4 退化与循环	(33)
§ 2.6.5 求初始基本可行解	(34)
§ 2.7 线性规划的计算机求解	(37)

§ 2.7.1 修正单纯形法	(37)
§ 2.7.2 单纯形法的计算效率	(44)
§ 2.7.3 计算机程序	(44)
§ 2.8 对偶理论与对偶单纯形法	(46)
§ 2.8.1 对偶理论	(46)
§ 2.8.2 对偶线性规划	(46)
§ 2.8.3 对偶定理	(51)
§ 2.8.4 对偶问题的经济解释—影子价格	(51)
§ 2.8.5 对偶单纯形法	(52)
§ 2.9 线性规划的优化后分析	(55)
§ 2.9.1 价值系数 c_j 的变化	(56)
§ 2.9.2 右端系数 b_i 的变化	(58)
§ 2.9.3 系数矩阵A中元素 a_{ij} 的变化	(60)
§ 2.9.4 添加新变量	(62)
§ 2.9.5 添加新约束	(63)
§ 2.10 线性规划多项式时间算法简介	(65)
参考文献	(66)
第三章 非线性规划的几个基本概念	(67)
§ 3.1 多元函数Taylor公式的矩阵形式	(67)
§ 3.2 方向导数与最速下降方向	(68)
§ 3.3 局部最优与全局最优	(69)
§ 3.4 无约束问题的最优性条件	(69)
§ 3.5 约束问题的最优性条件	(72)
§ 3.6 凸函数和凸规划	(78)
§ 3.7 最优化的数值计算方法	(79)
参考文献	(82)
第四章 单变量函数的最优化方法	(84)
§ 4.1 搜索区间的确定	(84)
§ 4.1.1 单峰函数	(84)
§ 4.1.2 进退算法	(85)
§ 4.2 区间消去法—黄金分割法	(87)
§ 4.3 多项式近似法—二次插值法	(90)
§ 4.4 要求计算导数的迭代法	(94)
§ 4.4.1 Newton—Raphson法	(94)
§ 4.4.2 对分法	(96)
§ 4.4.3 割线法	(97)
§ 4.4.4 三次插值多项式近似法	(97)
§ 4.5 不精确一维搜索	(99)
§ 4.6 方法的综述	(102)
参考文献	(102)
第五章 无约束非线性问题的解法	(104)
§ 5.1 直接搜索法	(104)

§ 5.1.1	单纯形搜索法	(104)
§ 5.1.2	Hooke—Jeeves模式搜索法	(110)
§ 5.1.3	Powell共轭方向法 (方向加速法)	(113)
§ 5.2	梯度法	(118)
§ 5.2.1	最速下降法 (Cauchy法)	(118)
§ 5.2.2	Newton法 (二阶方法)	(121)
§ 5.2.3	Marquardt法	(123)
§ 5.2.4	非线性最小二乘问题	(125)
§ 5.2.5	共轭梯度法	(128)
§ 5.2.6	拟Newton法 (变尺度法)	(134)
§ 5.3	大规模问题解法简介	(141)
§ 5.4	方法的比较与选择	(142)
	参考文献	(143)
第六章	约束非线性问题的解法	(145)
§ 6.1	Lagrange乘子法	(146)
§ 6.1.1	等式约束问题的Lagrange乘子法	(146)
§ 6.1.2	不等式约束问题的Lagrange乘子法	(148)
§ 6.2	惩罚函数法	(150)
§ 6.2.1	外部惩罚函数法 (外点法)	(151)
§ 6.2.2	内部惩罚函数法 (内点法)	(154)
§ 6.2.3	外点法与内点法的比较	(158)
§ 6.2.4	混合惩罚函数法 (内外点混合法)	(159)
§ 6.2.5	外推法	(159)
§ 6.3	增广Lagrange乘子法 (ALM法或MOM法)	(161)
§ 6.3.1	解等式约束问题的ALM法	(161)
§ 6.3.2	解不等式约束问题的ALM法	(164)
§ 6.3.3	解一般约束问题的ALM法	(165)
§ 6.4	约束直接搜索法	(168)
§ 6.4.1	约束直接搜索法的解题准备	(168)
§ 6.4.2	随机搜索法	(170)
§ 6.4.3	复合形法	(172)
§ 6.5	用线性规划逐步逼近非线性规划的方法	(177)
§ 6.5.1	线性约束下的序列线性规划法 (Frank—Wolfe法)	(177)
§ 6.5.2	非线性约束下的序列线性规划法	(179)
§ 6.6	可行方向法	(181)
§ 6.6.1	下降可行方向的确定	(181)
§ 6.6.2	线性约束下的Zoutendijk可行方向法	(182)
§ 6.6.3	非线性约束下的Zoutendijk可行方向法	(186)
§ 6.6.4	Topkis—Veinott可行方向法	(188)
§ 6.7	梯度投影法	(189)
§ 6.8	广义简约梯度法 (GRG法)	(195)
§ 6.8.1	简约梯度法	(195)

§ 6.8.2 广义简约梯度法 (GRG法)	(200)
§ 6.9 约束变尺度法 (CVM法)	(205)
§ 6.10 约束非线性最优化方法的比较与选择	(210)
参考文献	(211)
第七章 整数规划	(213)
§ 7.1 概述	(213)
§ 7.2 完全枚举法	(214)
§ 7.3 随机枚举法 (Monte Carlo法)	(217)
§ 7.3.1 算法的基本思想	(217)
§ 7.3.2 Monte Carlo法的优缺点及改进措施	(221)
§ 7.4 分支定界法	(222)
§ 7.4.1 例	(222)
§ 7.4.2 算法及一些细节的讨论	(224)
§ 7.4.3 实际问题的数学描述与解题指南	(228)
§ 7.5 割平面法	(228)
§ 7.6 非线性整数规划	(234)
参考文献	(235)
第八章 动态规划 (多阶段决策系统的最优化)	(237)
§ 8.1 最短路线问题	(238)
§ 8.2 动态规划的基本概念和基本方程	(239)
§ 8.2.1 动态规划的几个基本概念	(240)
§ 8.2.2 最优化原理与动态规划的基本方程	(242)
§ 8.2.3 构造动态规划模型的步骤	(242)
§ 8.3 动态规划的应用举例	(244)
§ 8.4 多维动态规划问题的维数困难	(251)
参考文献	(251)
第九章 连续系统的动态最优化	(252)
§ 9.1 引言	(252)
§ 9.2 Понтрягин极小值原理	(256)
§ 9.2.1 极小值原理的数学描述	(256)
§ 9.2.2 解题步骤与应用举例	(259)
§ 9.2.3 关于极小值原理的几点说明	(267)
§ 9.3 连续系统的动态规划法	(268)
§ 9.4 动态最优化的数值方法	(270)
§ 9.4.1 无约束问题的数值方法	(271)
§ 9.4.2 有约束问题的数值方法	(275)
参考文献	(278)
第十章 多目标函数的最优化方法	(279)
§ 10.1 多目标最优化问题的解	(279)
§ 10.2 主要目标法 (约束法)	(282)
§ 10.3 评价函数法	(282)
§ 10.3.1 理想点法	(282)

§ 10.3.2 线性权和法	(283)
§ 10.3.3 平方和加权法	(286)
§ 10.3.4 乘法	(287)
§ 10.3.5 功效系数法—几何平均法	(287)
§ 10.4 分层序列法	(288)
§ 10.5 逐步法 (STEM法)	(289)
§ 10.6 目标规划法	(291)
参考文献	(291)
第十一章 最优化技术的实用指南	(295)
§ 11.1 建立实际问题的数学模型	(295)
§ 11.1.1 模型的类型及其选择	(296)
§ 11.1.2 变量的选择原则	(296)
§ 11.1.3 确定目标函数的原则	(297)
§ 11.1.4 确定约束条件的原则	(297)
§ 11.2 求解前的准备与分析	(297)
§ 11.2.1 消除数值计算的障碍	(297)
§ 11.2.2 增加计算的有效性	(299)
§ 11.2.3 分析问题的结构特征	(299)
§ 11.3 在计算机上求解问题的某些实用指南	(300)
§ 11.4 计算结果的分析和评价	(302)
§ 11.4.1 证实解的有效性	(303)
§ 11.4.2 灵敏度分析	(303)
参考文献	(306)
附录 最优化计算程序包	(308)
附录A 使用说明	(308)
(一) 怎样编写调用程序	(308)
(二) 本附录各种最优化程序的使用说明	(310)
(1) 服务性子程序	(310)
(2) 线性规划 修正单纯形法	(313)
(3) 单变量函数的最优化 黄金分割法与二次插值法的混合算法	(314)
(4) 无约束非线性最优化方法	(315)
1. 单纯形搜索法	(315)
2. Hook—Jeeves模式搜索法	(316)
3. Powell共轭方向法	(318)
4. DEB变尺度法	(319)
5. Fletcher开关算法	(321)
6. 自适应随机搜索法	(323)
(5) 约束非线性最优化方法	(324)
1. 五种不同惩罚函数法的调用子程序	(324)
2. 非序列简单外点法	(324)
3. Fiacco—McCormick内外点混合法	(324)
4. Powell增广Lagrange乘子法	(324)

5. 用户自编的惩罚函数法.....	(324)
6. Schuldt增广Lagrange乘子法	(324)
7. Dickinson收缩随机试验法	(326)
8. Box复合形法	(327)
9. Griffith—Stewart序列线性规划法.....	(329)
10. Rosen梯度投影法	(331)
(6) 随机数生成器乘同余法	(333)
附录B 程序清单	(333)

第一章 概 述

从事任何工程项目，不管是设计新系统还是改造已有系统，一般总存在各种不同的候选方案，人们总是按照一定的标准设法从中选出最好的方案加以实施，以达到最满意的效果，这就是工程最优化问题。

解决最优化问题的技术称为最优化技术。这种技术一般可分为两个方面：

(1) 建立数学模型：将实际的工程最优化问题用数学语言描述出来。模型由一组数学关系式，如方程、不等式、逻辑依赖关系式等组成。它们反映了物理定律、市场约束、工艺关系等各个方面。

(2) 求出最优解：其内容包括对已建立的数学模型进行分析、选用适当的最优化数学方法、编写计算程序、在计算机上运算和对计算的结果进行评价求出实际问题的最优解答。

由实际问题正确地抽象出数学模型，无疑是一项基础性的工作。然而，这又是一项复杂与困难的工作，对不同领域内的具体问题需要不同的专业知识。本书将通过一些示范性实例及引导性的建议，力图能给读者一些启示。

关于第二方面，即求最优解，目前在数学理论、计算方法、实用软件等方面已有许多成果并正在不断发展。介绍这方面的基本内容是本书的重点。考虑到工程技术人员关心的是工程问题的数学表述和怎样进行求解，所以，本书将着重论述最优化理论的主要结论、数学方法的主要构思、算法的主要步骤、以及使用计算机求解实际问题的实用性指南（例如，方法的选择、软件的使用，计算结果的评价等）。对于数学上的严格证明和推导过程，一般只指出有关的参考文献，供读者查阅。

§ 1.1 最优化技术的发展

历史上最早记载下来的最优化问题可追溯到古希腊的欧几里得（Euclid公元前300年左右），他指出：在周长相同的一切矩形中，以正方形的面积为最大。十七、十八世纪微积分的建立给出了求函数极值的一些准则，对最优化的研究提供了某些理论基础，起了很大的推动作用。然而在以后的两个多世纪中，最优化技术的进展是缓慢的，主要考虑了有约束条件的最优化问题，发展了一套变分方法。但是，用这些分析方法归结成的数学问题很难计算求解，从而不能真正解决实际优化问题。一般称二十世纪五十年代以前用经典的微分法和变分法求解最优化问题的技术为经典最优化技术。

近三、四十年来，尤其是六十年代以来，最优化技术进入了蓬勃发展的时期。这主要是由于近代科学技术和生产的迅速发展，提出了许多用经典最优化技术无法解决的最优化问题；然而，为了取得重大的经济与军事效果又必须解决这些问题，这种客观需要极大地推动了最优化的研究与应用。另一方面，由于电子计算机的出现和发展，为最优化技术提供了有效手段。许多大型复杂的计算问题，过去只能定性地、粗略地在理论范畴进行分析比较，如今已能进行精确的定量研究并应用于实际了。

随着电子计算机的普及,软件、硬件价格大幅度下降,新的数值计算方法不断出现,优化计算的成本也在不断下降。最优化技术这门较新的科学分支目前已深入到各个生产与科研领域,例如,化学工程、机械工程、建筑结构、运输调度、生产控制、经济规划和经济管理等,并取得了重大的经济效益与社会效益。近年来,为了普及与推广使用优化技术,在各种计算机中,已将各种优化计算程序组成使用十分方便的程序包,并已进展到建立最优化技术的专家系统,这种系统能帮助使用者自动选择算法,自动运算以及评价计算结果,从而,用户只需要很少的优化数学理论和程序设计知识,就可有效地解决实际优化问题。还应指出:虽然如此,但最优化的理论和计算方法至今还未十分完善,有许多问题仍有待进一步研究探索。可以预期:随着现代技术的迅速发展,最优化技术必将获得更广泛更有效的应用,它也将获得更完善更深刻的进展。

§ 1.2 最优化在工程中的应用

工程技术的优化问题可分为静态与动态两类。静态优化问题亦称参数优化问题,它是在一定的范围内选取一些参数,使问题的性能指标(是所选参数的函数)达到最优值。动态优化问题是选择一个或几个函数,使问题的性能指标(是所选函数的函数,即泛函数)达到最优值,由于候选的函数经常是时间变量的函数(也可以是空间变量的函数),所以称为动态问题。

静态最优化常用于在一定的最优目标下,确定工程问题的最佳操作和设计参数(或称为标定条件)。例如,过程控制中的最佳稳态操作条件(温度、压力、流量等),工程设计中的设备最佳尺寸和最优生产水平等。动态最优化常用于在一定的最优目标下,确定某些函数应具有的最佳变化规律。例如,过程动态分析中的操作变量(温度、压力、流量等)随时间变化的最佳曲线,或在某空间区域中的最优分布。在过程控制中,动态最优化也常用于建立一个最优校正规律,在物理过程的实际操作条件偏离预定的最优操作条件时,能以最有效的步骤把它们调回到最优值。

最优化技术在工程中的应用主要有下列四个方面:

1. 工程部件、单元设备或全系统的最优设计;
2. 现有操作的分析和计划制定;
3. 工程分析和数据处理;
4. 研究过程动态特性和设计最优控制方案。

其中前三项主要是静态优化问题,第四项是动态优化问题。

下面列举几个经过简化的例子,说明最优化技术在上述四个方面的应用。

§ 1.2.1 工程最优设计

工业过程最优设计主要包括工艺路线、设备结构的最优选择以及设备尺寸与操作参数的最优选择等方面。设计时首先要考虑的是追求哪些最优性能指标,即确定评价工程好坏的标准。从数学上来说,就是写出体现评价标准的目标函数。目标函数可以只有一个,例如,最高的利润、最低的成本、最大的产量或产值等等。但是,随着工程规模的发展,设计中往往

会提出多个目标函数，甚至是几个不可公度的性能指标，例如，同时要求利润最大、设备的可靠性与生产的安全性最大、环境的污染最小等。

例1.2.1 在某个化学反应器内，原料经过加热与加压进行化学反应后，生成产品。现求得每年的生产费用 f 与操作压力 x_1 和操作温度 x_2 之间的函数关系为

$$f(x_1, x_2) = 60 - 10x_1 - 4x_2 + x_1^2 + x_2^2 - x_1x_2 \quad (1.2.1)$$

从热力学及设备安全的角度考虑，压力与温度必须限制在某个范围之内，例如

$$0 \leq x_1 \leq 6 \quad (1.2.2)$$

$$0 \leq x_2 \leq 8 \quad (1.2.3)$$

现要求在式(1.2.2)与(1.2.3)的约束范围内，选择使年度生产费用最小的操作压力 x_1 与操作温度 x_2 。

本例是单个设备的最优设计问题。下面介绍一个由几个设备组成的系统的最优设计问题。

例1.2.2 供氧系统的设计

图1.2.1为整个供氧系统的示意图。某个氧气炉需要消耗纯氧，所需氧气是以周期操作方式按不同速率分批输入，从而使炉中氧的消耗速度发生如图1.2.2所示的周期性变化：周期为 t_2 ，在前 t_1 的时间内，炉的氧消耗率为低值 D_0 ，而在其后 $(t_2 - t_1)$ 的时间内，为高值 D_1 。制氧设备以固定速率 F 输出氧气。为了使连续的制氧设备与周期操作的氧气炉紧密配合，流程中先用压缩机将前段时间区间 $[0, t_1]$ 中多余的氧气以压力 H 压入体积为 V ，最大槽压为 p 的储槽，以保证后一段时间区间 $[t_1, t_2]$ 中高消耗的需要。向氧气炉输送氧气的压力为固定值 p_0 。经计算可得该系统的年度费用（包括制氧设备、压缩机及储槽的费用） f 与 F 、 H 、 V 、 p 的关系为

$$\begin{aligned} f(F, H, V, p) \\ = a_1 + a_2 F + a_3 V^{a_4} + a_5 H^{a_6} + a_7 H \end{aligned} \quad (1.2.4)$$

式中 $a_i, i = 1, \dots, 7$ 为已知常数。

按照有关压缩气体的定律和公式， F 、 H 、 V 、 p 还必须满足下

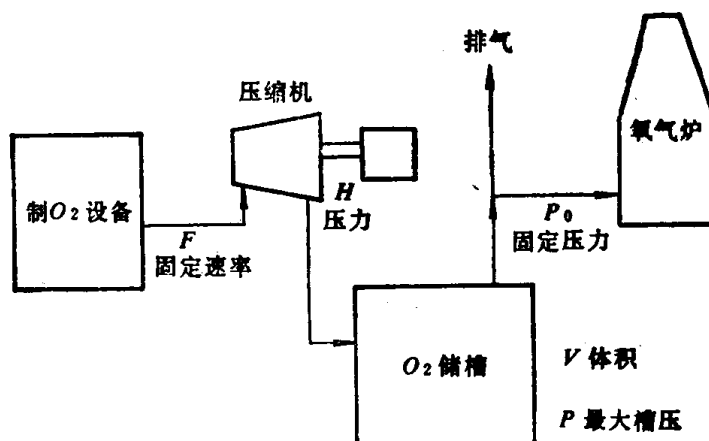


图 1.2.1 供氧系统的设计

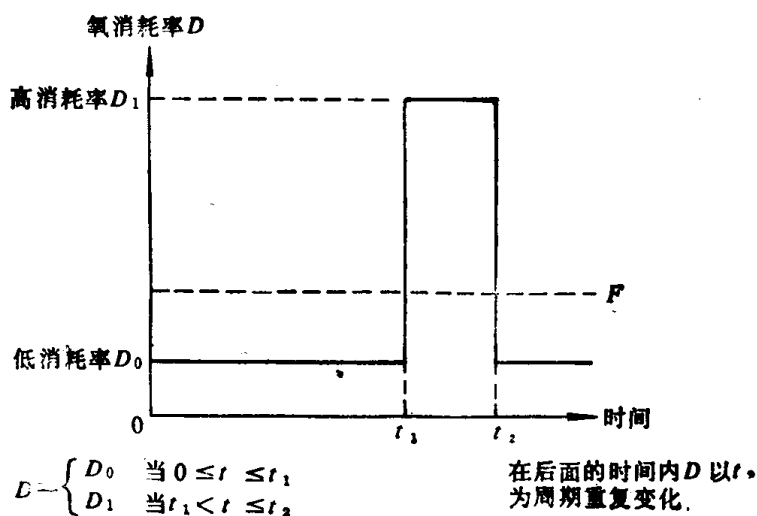


图 1.2.2 氧消耗周期

列关系式

$$V = b_1 \frac{(D_1 - F)}{p} \quad (1.2.5)$$

$$H = b_2 (D_1 - F) \ln \left(\frac{p}{p_0} \right) \quad (1.2.6)$$

$$F \geq b_3 D_0 + b_4 D_1 \quad (1.2.7)$$

$$p \geq p_0 \quad (1.2.8)$$

其中 $b_i, i = 1, \dots, 4$ 为已知常数。因此,该供氧系统的最优设计问题是: 求出 F, H, V, p 的最优设计值, 使年度费用 f 为最小。

§ 1.2.2 操作分析与制定计划

生产几种产品的工厂, 或由一批设备组成一个网络进行生产的工厂, 时常需要制定最优生产计划来加强生产中各环节的连接与协调。

现有设备的运行是否处于最有效、最合理的状态, 是否还有潜力, 这需要进行操作的最优分析, 分析的结果可导致选定新的操作条件、添加新的设备, 或确定新的操作步骤。

例1.2.3 生产计划的最优化问题

某工厂生产 A 和 B 两种产品, 它们需要经过三种设备的加工, 其工时如表1.2.1所示。设备 I、II 和 III 每天可使用的工时分别不超过12、10和8小时。产品 A 和 B 的利润随市场的需求有所波动, 如果预测未来某个时期内 A 和 B 的利润分别为4和3千元/吨, 问在那个时期内, 每天应安排产品 A, B 各多少吨, 才能使工厂获利最大?

表1.2.1

工 时 产品	设备 I	设备 II	设备 III
A	3	3	4
B	4	3	2
设备每天最多可工作时数	12	10	8

(小时/吨)

(小时)

设每日应安排生产产品 A 和 B 分别为 x_1 和 x_2 吨, 则总利润为

$$f(x) = 4x_1 + 3x_2 \quad (\text{千元}) \quad (1.2.9)$$

但与 x_1 与 x_2 必须满足下列一组条件

$$\begin{cases} 3x_1 + 4x_2 \leq 12 \end{cases} \quad (1.2.10)$$

$$\begin{cases} 3x_1 + 3x_2 \leq 10 \end{cases} \quad (1.2.11)$$

$$\begin{cases} 4x_1 + 2x_2 \leq 8 \end{cases} \quad (1.2.12)$$

$$\begin{cases} x_1 \geq 0, x_2 \geq 0 \end{cases} \quad (1.2.13)$$

本例的最优化问题可归结为在式 (1.2.10) — (1.2.13) 的限制下, 求式 (1.2.9) 中总利润 f 的最大值。

§ 1.2.3 工程分析与数据处理

工程技术中提出的许多分析问题和非线性回归问题常可用最优化技术进行求解。例如在工程模型开发中,经常需要通过一组实验数据去决定半理论模型中的一些未知参数,这些参数的选取应使模型与已知数据拟合得越近越好。这类曲线拟合、数据处理问题实质上是个最优化问题。事实上,若设 y 是 x 的函数,函数的形式已知为 $y = f(x, \theta_1, \theta_2)$,其中 θ_1 和 θ_2 为两个待定参数。为了确定这两个参数,先进行一系列实验,取得 x 与 y 之间对应的 N 组测量值 (y_i, x_i) , $i = 1, \dots, N$ 。然后按照最小二乘准则,选择 θ_1, θ_2 使残差 $y_i - f(x_i, \theta_1, \theta_2)$ 的平方和

$$L(\theta_1, \theta_2) = \sum_{i=1}^N [y_i - f(x_i, \theta_1, \theta_2)]^2 \quad (1.2.14)$$

为最小,并以此作为“拟合得最好”的标准。然后,使用最优化技术,求出使函数 $L(\theta_1, \theta_2)$ 达到最小值的自变量值 $\theta_1 = \theta_1^*$ 和 $\theta_2 = \theta_2^*$,并把它们作为模型 $y = f(x, \theta_1, \theta_2)$ 所求的两个待定参数。

例1.2.4 非线性曲线拟合

真实气体的压力 P (atm, 大气压)、摩尔容积 V ($\text{cm}^3/\text{g} \cdot \text{mol}$, 厘米³/克摩尔)和温度 T (K, 开)三者之间的关系可用半经验的雷德利克—夸恩 (Redlich—Kwong) 方程

$$P = \frac{RT}{V - b} - \frac{a}{T^{1/2}V(V + b)} \quad (1.2.15)$$

来表达,其中 R 为气体常数 ($82.06 \text{ atm} \cdot \text{cm}^3/\text{g} \cdot \text{mol} \cdot \text{K}$), a, b 是两个与具体气体有关的待定常数。为了用公式 (1.2.15) 来表达二氧化碳气体的 PVT 关系,通过实验测得8组数据,如表1.2.2所示。要求用这些数据确定出式 (1.2.15) 中待定的常数 a 和 b 。

表1.2.2 二氧化碳气体的PVT数据

实验序号	P (atm.)	V ($\text{cm}^3/\text{g} \cdot \text{mol}$)	T (K)
1	33	500	273
2	43	500	323
3	45	600	373
4	26	700	273
5	37	600	323
6	39	700	373
7	38	400	273
8	63.6	400	373

按照最小二乘准则构造最小平方函数

$$L(a, b) = \sum_{i=1}^8 \left[P_i - \frac{RT_i}{V_i - b} + \frac{a}{T_i^{1/2}V_i(V_i + b)} \right]^2 \quad (1.2.16)$$

将表1.2.2的各组数据及常数 R 代入式 (1.2.16) 后即得 $L(a, b)$ 的具体表达式。最后,可用适当的最优化技术求出使 $L(a, b)$ 达最小值的 a 和 b 即可。

如果Redlich—Kwong方程 (1.2.15) 的计算值与实验数据完全相同, $L(a, b)$ 的最小值应为零。然而,由于实验测量误差以及由于方程 (1.2.15) 较简单,不能作为二氧化碳的完全准确模型,因而 $L(a, b)$ 的最小值通常不会等于零。就本例而言, $L(a, b)$ 的最小值为 $9.7 \times$

10^{-2} , 相应的 a 、 b 最优值为 $a = 6.377 \times 10^7$, $b = 29.7$ 。

§ 1.2.4 过程动态特性与最优控制方案的研究

下面两例说明动态最优化在工程技术中的应用。

例1.2.5 最短时间控制问题

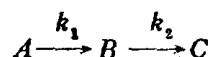
假设某飞机的重量 W 、推力 T 、以及阻力 D 均为常数。若以 h 表示飞行高度, θ 表示飞行的爬升角, V 表示飞行速度, 那么它们之间的关系为

$$\begin{cases} \frac{dh}{dt} = V \sin \theta \\ \frac{W}{g} \frac{dV}{dt} = -W \sin \theta + T - D \end{cases}$$

当给定一个爬升方案 $\theta(t)$ 后, 由上列第二个方程可解出 $V(t)$, 代入第一个方程, 可以决定 $h(t)$ 。试求一个最优爬升方案 $\theta^*(t)$, 使飞机从高为 h_1 , 速度为 V_1 的水平飞行状态过渡到高度为 h_2 , 速度为 V_2 的水平飞行状态所需的时间最少。

例1.2.6 化学反应器的温度最优分布问题

假设在一个长度为 L 的管式反应器中进行下列反应



如果所有反应为一级反应, l 为反应器入口到反应器内反应平面的距离, 且反应速度 k_1 , k_2 与温度分布 $T(l)$ 的关系遵守阿雷尼厄斯 (Arrhenius) 方程

$$\begin{aligned} k_1 &= k_{01} \exp\left(-\frac{E_1}{RT(l)}\right) \\ k_2 &= k_{02} \exp\left(-\frac{E_2}{RT(l)}\right) \end{aligned}$$

且通过反应器的流动为柱塞流, 试求能使产品 B 的产量达到最大的最优温度分布 $T(l)$ 。

§ 1.3 最优化问题的几个基本概念

本节介绍一些最优化方法中经常用到的一些基本概念, 如向量、矩阵、二次型、目标函数、等值线和可行域等。

§ 1.3.1 向量空间和矩阵

最优化问题涉及的变量经常不止一个, 为了简明, 在研究最优化问题时一般都采用向量与矩阵表示法。设 $x_1, x_2, \dots, x_n$ 为最优化问题中的 n 个变量, 我们可用一个 n 维向量 $\mathbf{x}$ 表示, 记为

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \quad \text{或} \quad \mathbf{x} = [x_1, x_2, \dots, x_n]^T$$

其中 T 表示转置, 称 x_i 为向量 x 的第 i 个坐标或第 i 个分量。分量为实数的 n 维向量的全体称为 n 维实空间, 记作 R^n 。向量 x 亦称为 R^n 中的一个点。这是因为在 $n=2$ 或 3 时, R^n 中的向量与点有明确的一一对应的几何关系: 平面或空间中每个点都可唯一地确定一个以原点为始点以该点为终点的向量; 反之, 每个始点为原点的向量, 其终点都唯一地确定一个点。故点与向量可不加区分。将这种对应概念加以推广, 在 $n>3$ 时, 也把向量称为点。在工程设计中, $x_i, i=1, \dots, n$ 是设计变量或决策变量, 所以常称 R^n 为设计空间或决策空间。

设 S 为 R^n 中的一些点组成的集合, 符号 $x \in S$ 表示 x 是 S 中的一个点, 读为“ x 属于 S ”, 符号 $x \notin S$ 表示 x 不是 S 中的点, 读为“ x 不属于 S ”。

下面几个和向量与矩阵有关的概念在最优化技术中经常使用。

(一) 向量运算: 设 $x = [x_1, x_2, \dots, x_n]^T, y = [y_1, y_2, \dots, y_n]^T$ 是 R^n 中任意两个点, a 为实数, 则有

1. 当 $x_i = y_i, i=1, \dots, n$ 时, 称 x 与 y 相等, 记为 $x = y$ 。

2. x 和 y 的和、差定义为:

$$x \pm y = [x_1 \pm y_1, x_2 \pm y_2, \dots, x_n \pm y_n]^T$$

3. 向量与数 a 的乘积定义为

$$ax = a[x_1, x_2, \dots, x_n]^T = [ax_1, ax_2, \dots, ax_n]^T$$

4. 当 $x_i = 0, i=1, \dots, n$ 时, 称 x 为零向量, 记为 $x = 0$ 。

(二) 欧氏空间 (Euclidean空间):

1. 向量 x 的长度 (或模, 或范数) 定义为

$$\|x\| = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_n^2}$$

长度为1的向量称为单位向量。

2. 向量 x 与 y 之间的距离定义为

$$\|x - y\| = \sqrt{(x_1 - y_1)^2 + (x_2 - y_2)^2 + \dots + (x_n - y_n)^2}$$

显然有: $\|x - y\| = \|y - x\|, \|x - y\| = 0$ 等价于 $x = y$ 。注意: 向量的范数与距离可以有其他形式的定义, 在本书中若非特别指出, 一般是指上述定义。

3. 点 x 的一个 ϵ 邻域定义为

$$N_\epsilon(x) = \{y | y \in R^n, \|y - x\| < \epsilon\}$$

其中 $\epsilon > 0$, 记号 $\{y | P(y)\}$ 表示具有性质 P 的那些点 y 之全体组成的集合。

在三维空间中, $N_\epsilon(x)$ 是以 x 为中心, ϵ 为半径的一个球。

4. 向量 x 与 y 的内积 (或点积) 定义为

$$x^T y = \sum_{i=1}^n x_i y_i$$

因为 $\sum_{i=1}^n x_i y_i = \sum_{i=1}^n y_i x_i$, 所以 $x^T y = y^T x$ 。显然有 $x^T x = \|x\|^2$ 。著名的许瓦兹 (Schwarz)

不等式

$$|x^T y| \leq \|x\| \|y\|$$

是常用到的, 其中等号仅当 $x = ay, a$ 为实数时, 才成立。

5. 非零向量 x 与 y 之间的夹角 θ 定义为

$$\cos \theta = \frac{x^T y}{\|x\| \|y\|} \quad (0 \leq \theta \leq \pi)$$

如果两个向量的内积为零, 即 $x^T y = 0$, 则称此两向量是正交的, 因为这时它们之间的夹角 $\theta = 90^\circ$ 。如果 $x^T y > 0$, 则 $0 < \theta < 90^\circ$, 即 x 与 y 之夹角为锐角; 如果 $x^T y < 0$, 则 $90^\circ < \theta < 180^\circ$, 即 x 与 y 之夹角为钝角。

6. 在实空间 R^n 中定义了内积后, 称 R^n 为 n 维欧氏空间, 常记为 E^n 。

(三) 向量的线性相关与基

设 $x^{(1)}, x^{(2)}, \dots, x^{(n)}$ 为 R^n 中的 m ($m \leq n$) 个向量。若有不全为零的 m 个数 $a_i, i = 1, \dots, m$, 使

$$a_1 x^{(1)} + a_2 x^{(2)} + \dots + a_m x^{(m)} = 0$$

成立, 则称向量组 $x^{(1)}, \dots, x^{(m)}$ 是线性相关的; 否则称为是线性无关的。

若 R^n 中一组向量 $e^{(1)}, e^{(2)}, \dots, e^{(n)}$ 满足条件:

- (1) $e^{(1)}, e^{(2)}, \dots, e^{(n)}$ 是线性无关的;
- (2) R^n 中任一向量 x 都可表示为

$$x = a_1 e^{(1)} + a_2 e^{(2)} + \dots + a_n e^{(n)}$$

其中 $a_1, \dots, a_n$ 是实数, 则称 $e^{(1)}, \dots, e^{(n)}$ 为 R^n 的一组基。 n 称为空间的维数。

(四) 矩阵

1. $m \times n$ 阶矩阵是 $m \times n$ 个数按次序排成 m 行 n 列的一个数表。例如:

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{mn} \end{bmatrix}$$

其中 a_{ij} 称为矩阵的元素。有时将 A 简记为

$$A = (a_{ij})_{m \times n} = (a_{ij})$$

① 向量 $x = [x_1, x_2, \dots, x_n]^T$ 是一个 $m \times 1$ 阶矩阵, 亦称为列向量。

$1 \times n$ 阶矩阵 $a = [a_1, a_2, \dots, a_n]$ 称为行向量。

② 一个 $n \times n$ 阶矩阵称为 n 阶方阵, 或 n 阶矩阵。

一个 n 阶方阵若除了主对角线元素 $a_{11}, a_{22}, \dots, a_{nn}$ 为 1 处, 其余元素均为零, 则称该方阵为 n 阶单位阵, 常记为 I 或 I_n , 即:

$$I = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix}$$

③ 将矩阵 A 的行换成列所得到的矩阵称为 A 的转置矩阵, 记为 A^T , 例如:

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \end{bmatrix}, \quad A^T = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{21} \\ a_{12} & a_{22} \\ a_{13} & a_{23} \end{bmatrix}$$