

# 最优化 与 工业实验

[美]W.E. 拜尔斯 J.J. 斯温 著

谢国瑞 沈宝欣 郑汶玉 译

## 内 容 简 介

人们在科学研究和生产实践中都面临着不少有待解决的问题,从数学角度看,其中有相当一部分可被归结为某个最优化问题。本书的主题是介绍通过实验途径对所研究的系统实现最优化的各种方法。书中还对所用到的实验设计、数理统计及最优化方法的概念作了必要的阐述,并对一些具体过程用所示的方法进行了讨论。

本书可作为大学生或研究生有关课程的教材或教学参考书,也可供有关科技人员自学及作一般参考之用。

责任编辑 顾芝莲

责任校对 黄黎峥

## 最优化与工业实验

Zuiyouhua yu Gongye Shiyan

[美] W. E. 拜尔斯 J. J. 斯温 著

谢国瑞 沈宝欣 郑汶玉 译

华东化工学院出版社出版

(上海市梅陇路130号)

新华书店上海发行所发行

江苏句容排印厂排版

常熟第四印刷厂印刷

开本 850×1168 1/32 印张 12.5 字数 336 千字

1990年12月第1版 1990年12月第1次印刷

印数 1-2000 册

---

ISBN 7-5628-0109-6/O·19 定价2.95元

## 序

本书可作为大学高年级学生或研究生的实验最优化课程的教科书，或作为实验科学家与工程师的参考书。其重点是论述最优化与统计方法的结合。这结合已不是什么很新的东西了，通常所说的响应面方法就是讲此种结合的。而且，本书也反映了数值最优化的许多较新进展对实验法的影响。其目的在于说明，怎样用实验方法，而不是计算，来优化系统。

阅读本书所必需的数学基础是熟悉微积分和矩阵代数。通过仔细阅读第2章可得到所需的统计方法的知识，事实上这一章是适合初学统计者用的。此外，也可由第2章熟悉书中所用的符号，以及复习回归分析与方差分析等重要概念。

全书的主要理论推导收录在第3到第5章内。虽然第3章对实验设计及响应面法作了广泛的讨论，但其核心却是实验工作者可藉实验及统计技术导出所研究过程的数学模型的一些方法。第4章考察了最优化的一些最重要的概念，强调单变量与多变量最优化的搜索法，以及在响应面法中可直接应用的经典的和数值的最优化技术。第5章对实验法最优化这种结合途径作了总的考察，概述了几个通过实验方法以优化系统的一般过程，并对所提出的过程作了阐述与比较。

在第6章及第7章中，以各种实际问题对这种结合的实验最优化方法作了检验。第6章讨论在实际系统中的应用，包括工业的机械加工与化学过程。第7章说明“仿真最优化”的概念，即仿真系统的最优化。在此，也介绍了仿真方法。

附于每章之末的参考文献，不仅可用来佐证或充实文中所引的专题材料，并且还在有关理论方面把读者引到最重要的研究前沿。因而，本书也可作为实验法最优化这一领域的主要研究参考文献。

我们在此对本书所得到的众多帮助谨致谢意。我们感谢圣母

玛利亚大学航空与机械工程系的雪莉·威尔斯女士和特雷莎·兰金小姐,以及宾夕法尼亚州立大学工业与管理系统工程系的玛萨·波特、卡茜·莫耶女士和基姆·威廉小姐,她们对手稿作了整理、打字工作。对于国家科学基金、工程学部门依靠 ENG74-19313 拨款创办本书的早期工作,以及海军研究办公室和海军分析计划对后期的发展在合约 N00014-76-C-1021 中给予专款资助,也表示深切的谢意。感谢圣母玛利亚大学机械工程研究生李明隆(音)先生和米歇尔·戴维逊先生,他们为本书编写了许多有用的程序。空分产品与化学制品股份有限公司的 K.J. 阿西莫和 V.G. 福克斯两位博士,对第 3 章最小二乘法及有关矩阵的附录 B 的选材提供了极为有益的帮助。我们对多方的协助致以衷心的感谢。

W. E. 拜尔斯

帕克大学, 宾夕法尼亚州

J. J. 斯温

西拉斐开大学, 印第安那州

# 目 录

## 第 1 章 引 论

|                      |    |
|----------------------|----|
| 1.1 实验中的基本概念 .....   | 1  |
| 1.2 最优化的基本概念 .....   | 5  |
| 1.2.1 经典最优化 .....    | 6  |
| 1.2.1.1 函数 .....     | 6  |
| 1.2.1.2 函数的连续性 ..... | 8  |
| 1.2.1.3 函数的特性 .....  | 8  |
| 1.2.1.4 最优性条件 .....  | 11 |
| 1.3 最优化的途径 .....     | 14 |
| 1.3.1 解析法 .....      | 14 |
| 1.3.2 数值法 .....      | 15 |
| 1.3.3 数学规划 .....     | 17 |
| 1.3.3.1 线性函数 .....   | 17 |
| 1.3.3.2 非线性函数 .....  | 18 |
| 1.4 通过实验的最优化 .....   | 20 |
| 1.5 全书一瞥 .....       | 23 |
| 参考文献 .....           | 25 |

## 第 2 章 基本的统计概念

|                   |    |
|-------------------|----|
| 2.1 概率基础 .....    | 28 |
| 2.1.1 随机实验 .....  | 29 |
| 2.1.2 样本空间 .....  | 29 |
| 2.1.3 概率 .....    | 30 |
| 2.1.4 事件 .....    | 32 |
| 2.1.5 事件的运算 ..... | 34 |
| 2.1.6 条件概率 .....  | 35 |
| 2.1.7 随机变量 .....  | 37 |

|         |                 |    |
|---------|-----------------|----|
| 2.1.8   | 概率分布            | 38 |
| 2.1.9   | 期望              | 41 |
| 2.2     | 离散概率分布          | 43 |
| 2.2.1   | 伯努利试验           | 43 |
| 2.2.2   | 二项分布            | 44 |
| 2.2.3   | 泊松分布            | 46 |
| 2.3     | 连续概率分布          | 48 |
| 2.3.1   | 均匀分布            | 49 |
| 2.3.2   | 指数分布            | 50 |
| 2.3.3   | 伽马分布            | 51 |
| 2.3.4   | 正态分布            | 52 |
| 2.3.5   | 二元正态分布          | 54 |
| 2.4     | 抽样及抽样分布         | 56 |
| 2.4.1   | 样本的列表与图形表示      | 56 |
| 2.4.2   | 样本统计量           | 59 |
| 2.4.3   | 抽样分布            | 60 |
| 2.4.3.1 | 正态分布            | 61 |
| 2.4.3.2 | 学生氏 $t$ 分布      | 62 |
| 2.4.3.3 | $\chi^2$ 分布     | 64 |
| 2.4.3.4 | 斯奈迪柯的 $F$ 分布    | 65 |
| 2.5     | 总体参数的估计         | 66 |
| 2.5.1   | 点估计             | 66 |
| 2.5.2   | 区间估计            | 67 |
| 2.6     | 统计假设检验          | 68 |
| 2.6.1   | 平均值检验           | 71 |
| 2.6.2   | 方差检验            | 73 |
| 2.6.3   | 拟合优度检验          | 74 |
| 2.6.3.1 | $\chi^2$ 检验     | 74 |
| 2.6.3.2 | 柯尔莫哥洛夫——斯米尔诺夫检验 | 77 |
| 2.7     | 回归与相关           | 77 |
| 2.7.1   | 线性回归            | 78 |
| 2.7.2   | 关于斜率与截距的假设检验    | 80 |
| 2.7.3   | 曲线回归            | 83 |

|              |    |
|--------------|----|
| 2.7.4 多重回归   | 86 |
| 2.7.5 相关     | 87 |
| 2.8 方差分析     | 89 |
| 2.8.1 一向方差分析 | 90 |
| 2.8.2 二向方差分析 | 94 |
| 2.9 小 结      | 97 |
| 参考文献         | 97 |

### 第3章 实验设计基础

|                    |     |
|--------------------|-----|
| 3.1 回归分析           | 99  |
| 3.1.1 矩阵表示         | 99  |
| 3.1.2 最小二乘估计量的统计性质 | 102 |
| 3.1.3 偏倚与失拟        | 106 |
| 3.1.4 剩余分析         | 109 |
| 3.1.4.1 剩余的分布      | 110 |
| 3.1.4.2 突出值        | 111 |
| 3.1.4.3 图解过程       | 112 |
| 3.1.4.4 剩余的性质      | 112 |
| 3.1.5 最小二乘法的一些计算问题 | 115 |
| 3.1.5.1 编码         | 116 |
| 3.1.5.2 法方程的解      | 117 |
| 3.1.5.3 线性相关与灵敏度   | 117 |
| 3.1.5.4 曲线拟合       | 119 |
| 3.1.5.5 多项式的生成     | 121 |
| 3.2 线性以及二次响应面设计    | 121 |
| 3.2.1 编码约定         | 122 |
| 3.2.2 一次设计         | 124 |
| 3.2.2.1 因子设计       | 124 |
| 3.2.2.2 单纯形设计      | 132 |
| 3.2.3 二次响应面模型      | 135 |
| 3.2.3.1 模型的形式      | 136 |
| 3.2.3.2 中心组合设计     | 137 |
| 3.2.3.3 其他设计       | 146 |
| 3.2.3.4 设计的区组      | 152 |

|                 |     |
|-----------------|-----|
| 3.2.3.5 设计准则    | 153 |
| 3.3 高等的回归论题     | 155 |
| 3.3.1 线性化变换     | 156 |
| 3.3.2 显约束最小二乘问题 | 158 |
| 3.3.3 隐约束最小二乘问题 | 160 |
| 3.3.4 加权最小二乘问题  | 166 |
| 3.3.5 极大似然法     | 168 |
| 3.4 非线性回归及模型化   | 171 |
| 3.5 筛选实验        | 175 |
| 参考文献            | 179 |

## 第4章 最优化的基本原理

|                             |     |
|-----------------------------|-----|
| 4.1 引言                      | 184 |
| 4.2 单变量最优化                  | 186 |
| 4.2.1 区间缩减法                 | 187 |
| 4.2.2 斐波那契搜索                | 189 |
| 4.3 多变量最优化                  | 192 |
| 4.3.1 直接搜索技术                | 192 |
| 4.3.1.1 随机搜索                | 193 |
| 4.3.1.2 序贯单纯形搜索             | 196 |
| 4.3.1.3 复合形搜索               | 199 |
| 4.3.1.4 模式搜索                | 199 |
| 4.3.1.5 对约束直接搜索法的修正         | 201 |
| 4.3.2 基于梯度的无约束最优化           | 203 |
| 4.3.3 梯度搜索: 爬山法             | 209 |
| 4.3.4 牛顿算法: 二阶方法            | 210 |
| 4.3.5 共轭梯度法: F. R. 算法和平行切线法 | 213 |
| 4.3.6 约束最优化问题               | 217 |
| 4.3.7 拉格朗日函数分析的应用           | 221 |
| 4.4 解最小二乘问题的算法              | 226 |
| 4.5 多目标最优化                  | 234 |
| 4.5.1 加权最优化                 | 235 |
| 4.5.2 阈限法                   | 236 |
| 4.5.3 目标规划                  | 237 |

|                               |     |
|-------------------------------|-----|
| 4.5.4 Geoffrion-Dyer 算法 ..... | 239 |
| 4.5.5 “非优”向量最优解 .....         | 240 |
| 参考文献 .....                    | 240 |

## 第 5 章 通过实验进行优化

|                              |     |
|------------------------------|-----|
| 5.1 实验最优化问题概述 .....          | 245 |
| 5.1.1 响应面方法 .....            | 248 |
| 5.1.1.1 准备: 分析和筛选 .....      | 249 |
| 5.1.1.2 最速上升法 .....          | 250 |
| 5.1.1.3 线性搜索 .....           | 251 |
| 5.1.1.4 线性技术和约束 .....        | 252 |
| 5.1.1.5 二次设计 .....           | 254 |
| 5.2 问题公式化 .....              | 255 |
| 5.2.1 约束最优化 .....            | 255 |
| 5.2.2 多目标最优化 .....           | 256 |
| 5.3 最优化技术 .....              | 256 |
| 5.3.1 直接搜索法 .....            | 257 |
| 5.3.2 一阶响应面方法 .....          | 258 |
| 5.3.3 二阶响应面方法 .....          | 262 |
| 5.4 偏倚及设计对最优化方法的影响 .....     | 263 |
| 5.4.1 用全因子设计的最速上升法 .....     | 264 |
| 5.4.2 用单纯形设计的最速上升法 .....     | 269 |
| 5.5 约束实验最优化方法的应用 .....       | 278 |
| 5.5.1 梯度投影法 .....            | 279 |
| 5.5.2 多重梯度求和技术 .....         | 281 |
| 5.5.3 约束梯度法 .....            | 284 |
| 5.5.4 简化 Zoutendijk 法 .....  | 287 |
| 5.5.5 非线性 Zoutendijk 法 ..... | 288 |
| 5.5.6 二次方法 .....             | 292 |
| 5.6 小 结 .....                | 294 |
| 参考文献 .....                   | 295 |

## 第 6 章 实际过程的最优化与实验

|                          |     |
|--------------------------|-----|
| 6.1 机械加工中切削液压力的最优化 ..... | 299 |
|--------------------------|-----|

|                                      |     |
|--------------------------------------|-----|
| 6.1.1 黄金分割搜索.....                    | 300 |
| 6.1.2 多项式回归.....                     | 301 |
| 6.2 化学过程的收率最优化 .....                 | 303 |
| 6.2.1 扩充 $2^3$ 因子设计 .....            | 304 |
| 6.2.2 中心组合设计.....                    | 305 |
| 6.2.3 Box 的复合形搜索.....                | 307 |
| 6.3 多个独立变量、多重响应的一个机械加工参数<br>问题 ..... | 309 |
| 6.4 多个独立变量、多重响应的化学过程.....            | 313 |
| 6.5 小 结 .....                        | 321 |
| 参考文献.....                            | 322 |

## 第7章 最优化与计算机仿真实验

|                                   |     |
|-----------------------------------|-----|
| 7.1 基本概念 .....                    | 324 |
| 7.1.1 引言.....                     | 324 |
| 7.1.2 模型、系统、仿真.....               | 326 |
| 7.2 仿真模型的设计 .....                 | 327 |
| 7.2.1 仿真语言.....                   | 327 |
| 7.2.2 时间控制.....                   | 330 |
| 7.2.3 Monte-Carlo (蒙特-卡洛)抽样 ..... | 331 |
| 7.2.4 随机数产生.....                  | 334 |
| 7.2.5 随机变量产生.....                 | 337 |
| 7.3 计算机仿真中的统计技术 .....             | 338 |
| 7.3.1 输入分析.....                   | 338 |
| 7.3.2 估计.....                     | 339 |
| 7.3.3 输出分析.....                   | 340 |
| 7.3.4 计算机仿真实验的设计.....             | 341 |
| 7.3.5 方差缩减技术.....                 | 342 |
| 7.4 仿真参数的最优化 .....                | 344 |
| 7.4.1 仿真和最优化: 历史的回顾.....          | 345 |
| 7.4.2 通用方法.....                   | 347 |
| 7.5 仿真示例 .....                    | 348 |
| 参考文献.....                         | 350 |

|                   |     |
|-------------------|-----|
| 附录 A. 统计表选.....   | 354 |
| 附录 B. 矩阵代数复习..... | 368 |
| 英汉译名对照.....       | 377 |
| 译后记.....          | 387 |

# 第 1 章 引 论

在人们为了进步所作的孜孜探索中，实验方法发挥了极重要的作用。虽然，进行实验的目的，常常是为了发现新的科学原理或现象、建立因果关系、或寻找改进的方法和过程。而其在科学与工业中的一个更重要的作用，是为了找到进行某一过程的最优条件。“最优”意即“最佳”，是个比“改进”有更深一层意思的词。

本书着重阐述作为优化一个过程或系统之工具的实验方法。其目的是将通常认为是互不相干的最优化与实验法这两个概念统一起来。这里介绍的最优化技术，是从实验范畴考虑，而不是从最常见的计算领域着眼的。本书的宗旨是促使实验人员在自身的工作中使用最优化这个工具，从而将最优化的应用范畴在实验方法中得到扩展。

本章主要介绍最优化以及实验法的基本概念，并提出把两方面原理结合起来的途径，从而导出一套切实可行的实验方法。本章对全书的概述说明了这些概念是如何互相联系的。

## 1.1 实验中的基本概念

我们若把实验过程看作如图 1-1 所示的简单的“黑箱”，就可知道组成实验的主要部分。可以认为，“实验”块是嵌在某个物理过程内的，而实验是在其内进行的。比如，对“加搅拌的容器”来说，实验就是操纵搅拌装置。这个块具有未知的一面，即有一些尚未解答的疑问或未曾解决的问题。对这个过程的基本原理，我们可能了解，也可能并不了解；但总有一些东西是我们没有掌握的。黑箱模型的“输入变量”，是那些被设想作为问题之原因的量，这种量能为我们所控制。在本书中，称这种量为独立变量，并记作  $x_i$ ，

( $i=1, \dots, n$ )。这表明,实验中有  $n$  个不同的可控因素或变量。黑箱模型中的“输出响应”,代表设想的作为问题的结果即效应的那些量。它们是应变变量,本书中记之为  $y_j(j=1, \dots, m)$ 。我们无法直接地控制  $y_j$  的量,但实验的结果,可能会告诉我们,如何通过控制  $x_i$  的量从而达到间接控制的效果。那些影响过程的“不可控因素”,是不能忽略的,并以  $z_k, (k=1, \dots, p)$  表示,尽管这些因素超出我们的直接控制范围,甚至还无法鉴别之。但我们仍必须在实验的过程中尽力避免由它们造成的破坏作用。于是,我们可以这样描述实验过程:按独立变量的给定值  $x_i(i=1, \dots, n)$  做实验,观测响应  $y_j, (j=1, \dots, m)$ , 并试图消除不可控因素  $z_k(k=1, \dots, p)$  的影响。

对于实验变量  $x_i$  与  $y_j$ , 需作进一步的考察,以充分了解它们在实验中的作用。例如,我们在为原子能应用制造石墨产品时,希望通过实验确定生产某种改良石墨材料的方法。首先,让我们着眼独立变量  $x_i, (i=1, \dots, n)$ 。为简单起见,在制造过程的混和阶段,我们把三个变量看为是可控因素:

- (1)  $x_1$ , 粘结剂含量, %。
- (2)  $x_2$ , 温度,  $^{\circ}\text{C}$ 。
- (3)  $x_3$ , 混和时间, 分。

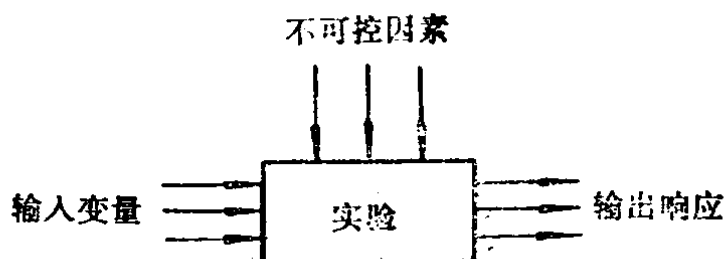


图 1-1 “黑箱”实验图示

除这三个变量外,我们还希望评估三种不同型式的搅拌器制备充分混和产品的效率。显然,前三个变量在本质上是定量的;它们可以在连续的数值范围内被控制。实验时使用的混和器的类型,可看作是第 4 个变量  $x_4$ , 这个因素具有三个不同的定性水平。在实验中,我们希望在定性变量的每一水平上,变动前三个因素中的每

个因素。

假设我们寻找一种石墨材料,它在某些性能方面(例如密度 $y_1$ (公斤/米<sup>3</sup>),弯曲强度 $y_2$ (千帕斯卡)以及电阻率 $y_3$ (欧姆·厘米))需达到预期的指标。这些性质就是实验的响应。显然,这些响应是定量的,但是许多实验用以确定独立变量一组合适值的响应却是定性的。

虽然,我们总认为能够无误差地把独立变量 $x_i(i=1, \dots, n)$ 控制在某些给定值的水平上,但响应 $y_j(j=1, \dots, n)$ 总要受误差的影响。这种误差可看作是所有不可控量 $z_k(k=1, \dots, p)$ 随机效应综合的结果。随机误差使得独立变量 $x_i(i=1, \dots, n)$ 取一特定值时,导致响应 $y_i$ 的取值呈一集合 $y_l(l=1, \dots, r)$ 我们称此集合为分布。因而,对实验结果进行客观的分析时,需用统计方法。本书的基础就是实验的统计处理。第2章将复习本书讨论过程所必需的重要统计概念。

从实验过程受到随机误差干扰的事实,直接可推出两项要求:重复及随机化。所谓重复,就是在完全相同的可控条件下重复实验。在石墨材料实验中,重复就是在同样的粘结剂水平( $x_1$ ),同样的搅拌器温度( $x_2$ ),同样的混合时间( $x_3$ ),以及同种型式搅拌器( $x_4$ )的条件下的重复实验。若在这些相同的条件下进行三次混合,则说得到了三次重复。如第2章将要论及的,实验者可由重复实验估计实验误差,并对每个响应计算样本的平均值 $\bar{y}_j$ ,在此情况下,响应就是材料的各项性能。若特定的输入条件为 $x_i(i=1, \dots, n)$ ,实验的真正响应为 $\eta_j(j=1, \dots, m)$ ,一般情况下,与用单个观测值 $y_i$ 相比,样本平均值 $\bar{y}_j$ 是 $\eta_j$ 的更可靠的估计。这是由于,重复能使不可控因素 $z_k(k=1, \dots, p)$ 的影响趋于一平均水平。随机地安排个别的实验或试验的随机化,有利于将产生倾向性偏差的不可控因素的影响减低到最小。随机化的目的,在于消除系统的影响,即由这些外来因素带进的任何系统性影响或倾向。而重复的目的,是为了能在这些因素存在下更好地估计响应。

若希望最有效地进行实验,必须以科学方法来安排实验。第3

章讨论的实验统计设计，需做两件事：1) 实验的设计，包括选定独立变量  $x_i$  ( $i=1, \dots, n$ ) 的值，以及试验序列的随机化；2) 实验数据的统计分析。但也有必要系统地探究实验过程。我们推荐如下的步骤：

(1) 提出问题 制定研究的目标。确定研究的界限，以便在允许的时间及资金的条件下取得有用的结果，确定哪些会对问题有影响的关键独立变量  $x_i$  ( $i=1, \dots, n$ ) 以及哪些需要测量的主响应  $y_j$  ( $j=1, \dots, m$ )。若有可能，假设一个能关联这些变量的数学模型；即假设其间存在一特定形式的关系

$$y_j = g_j(x_i, i=1, \dots, n) \quad j=1, \dots, m \quad (1-1)$$

所设想的模型，通常都含有一个或多个未知量。

(2) 设计实验 选择用于分析实验结果的统计过程。确定实验的试验次数，对每一次试验，定出  $x_i$  ( $i=1, \dots, n$ ) 的一组值。决定在实验时使用怎样的物理过程，并随机地安排试验次序。

(3) 进行实验 按(2)的设计，进行由实验体现的物理过程。记录所有的数据，包括独立变量的值  $x_i$  ( $i=1, \dots, n$ ) 以及每一次试验的响应  $y_j$  ( $j=1, \dots, m$ )。同时必须注视异常情况的出现，因为出现异常情况会使所得的结果被否定，从而需要重复这一给定的试验。

(4) 数据的列表与分析 使用现成的统计方法计算样本统计量，如平均值和方差。拟合(1)中所设的模型。为了能从实验引出某些结论，就必须作出一些假设，并对这些假设逐一进行统计检验。在分析实验结果时，数据的图示法常常是有用的。

(5) 得出结论并提出建议 一旦数据分析完毕，实验者即可得出结论，并就结果作出推断。在此，需要对统计结果进行物理解释。然后提出建议，或者继续实验，或者直接使用结果。

这五步过程，构成了系统的实验计划的基础。我们将要讨论一些技术，利用这些技术，只要将推荐的过程稍作改动，就可将最优化方法融入实验过程中去了。

## 1.2 最优化的基本概念

如前所述,本书的主要目标是阐明怎样将经典最优化理论用于实验,并从一项实验计划获取最有用的结论。在这个目标下,实验的主要目的是确定系统的最佳操作条件,这是能从系统或动作获得最佳结果的那些条件。这里的“结果”与“条件”是关键词。“结果”这词表达应变量或响应之意;它暗示着与系统或动作的一种效应关系,故在我们的实验过程的概念里,它对应于应变变量  $y_j(j=1, \dots, m)$ 。“条件”一词则意味着一种控制选取量的能力,它暗示一种对于实验过程的“因果”关系,故它对应于独立变量  $x_i(i=1, \dots, n)$ 。

最优化是对一系统或动作寻找最佳解的过程。倘若我们考虑系统的响应是通过式(1-1)的数学模型与独立变量关联的,那么,最优化就要求控制  $x_i$  的值以达到  $y_j$  的最优值。当式(1-1)为已知的数学式时,就可用熟知的经典最优化过程求解。

最优化技术有多种分类方式。其中之一是依照独立变量的个数分类。单变量方法是用于一个单变量函数  $g(x)$  的方法,多变量方法则是优化多元函数  $g(x_1, \dots, x_n)$  的方法。

最优化方法的另一种分类方式,与方法中是否用到导数有关。亦即分为导数法与数值法。导数法力图定出使一阶导数为零的值  $x_1, \dots, x_n$ ; 对单变量情形,由式:

$$y' = \frac{d}{dx}[g(x)] = g'(x) = 0 \quad (1-2)$$

确定  $x$  值。在本章后面,我们将以单变量函数为例,说明这个概念。当导数不存在,或者计算导数太复杂时,我们就采用数值法。数值法的特点是使用算法,因此更宜于在数字计算机上实现。

最优化技术的第三种分类法,着眼于把问题区分成无约束或受约束的两类。在受约束的问题中,得出的解必需适合特定的条件。式(1-1)给出了无约束的示例,即我们试图优化一个函数  $g(x_1,$

$\cdots, x_n$ )。受约束问题的一般形式如下:

$$\text{opt.}^{①} \quad y_0 = g_0(x_1, \cdots, x_n) \quad (1-3)$$

$$\text{s.t.} \quad a_i \leq x_i \leq b_i, \quad i=1, \cdots, n \quad (1-4)$$

$$y_j = g_j(x_1, \cdots, x_n) \quad \left\{ \begin{array}{l} \leq \\ = \\ \geq \end{array} \right\} d_j, \quad j=1, \cdots, m \quad (1-5)$$

式(1-3)与式(1-1)完全一样; 这表明了我们要确定优化主要判据的条件  $x_1^*, \cdots, x_n^*$  以得出  $y_0^*$ 。然而, 式(1-4)限定了第  $i$  个独立变量取值的范围; 即  $x_i$  的变程在下界  $a_i$  与上限  $b_i$  之间。这些界限可能是由于设备能力的限制、在竞争性市场上的费用、产品性能的规格、或者由联邦、州政府制定的法律和地方法规的法律约束造成的。表达式(1-5)表明了必须予以控制的另一些判据。这些判据也依赖于独立变量  $x_1, \cdots, x_n$ 。因而, 变量  $x_1, \cdots, x_n$  的一些变更可能有利于主要判据  $y_0$ , 但对另一些判据  $y_1, \cdots, y_m$  中的一个或几个是不利的。如同式(1-4)一样, 这些限制也可能是由技术、经济、社会、法律等因素所致。

在最优化过程的受约束与无约束分类方式中, 蕴涵了另一分类的基点——按应变量或响应( $y_j, j=1, \cdots, m$ )的数目分类, 称为单响应或多响应问题(也可称之为单目标及多目标问题)。

### 1.2.1 经典最优化

虽然本书的主要方向是通过实验寻找最优化。但也必需展示最优化理论的基本原理。这些基本原理不仅能加深我们对最优化学科的理解, 而且也提供了一套计算技巧; 可寻求由实验数据拟合方程所构成的近似函数的最佳值, 甚至在第2章导出某些基础统计概念时, 我们也要用到这些基本概念。

#### 1.2.1.1 函数

我们用  $y(x)$  表示一个函数, 其中  $y$  是应变量, 而  $x$  为独立变

---

① opt. 是 optimize 的缩写, 意即优化;  
s.t. 是 subject to 的缩写, 意即受约束于。——译者注