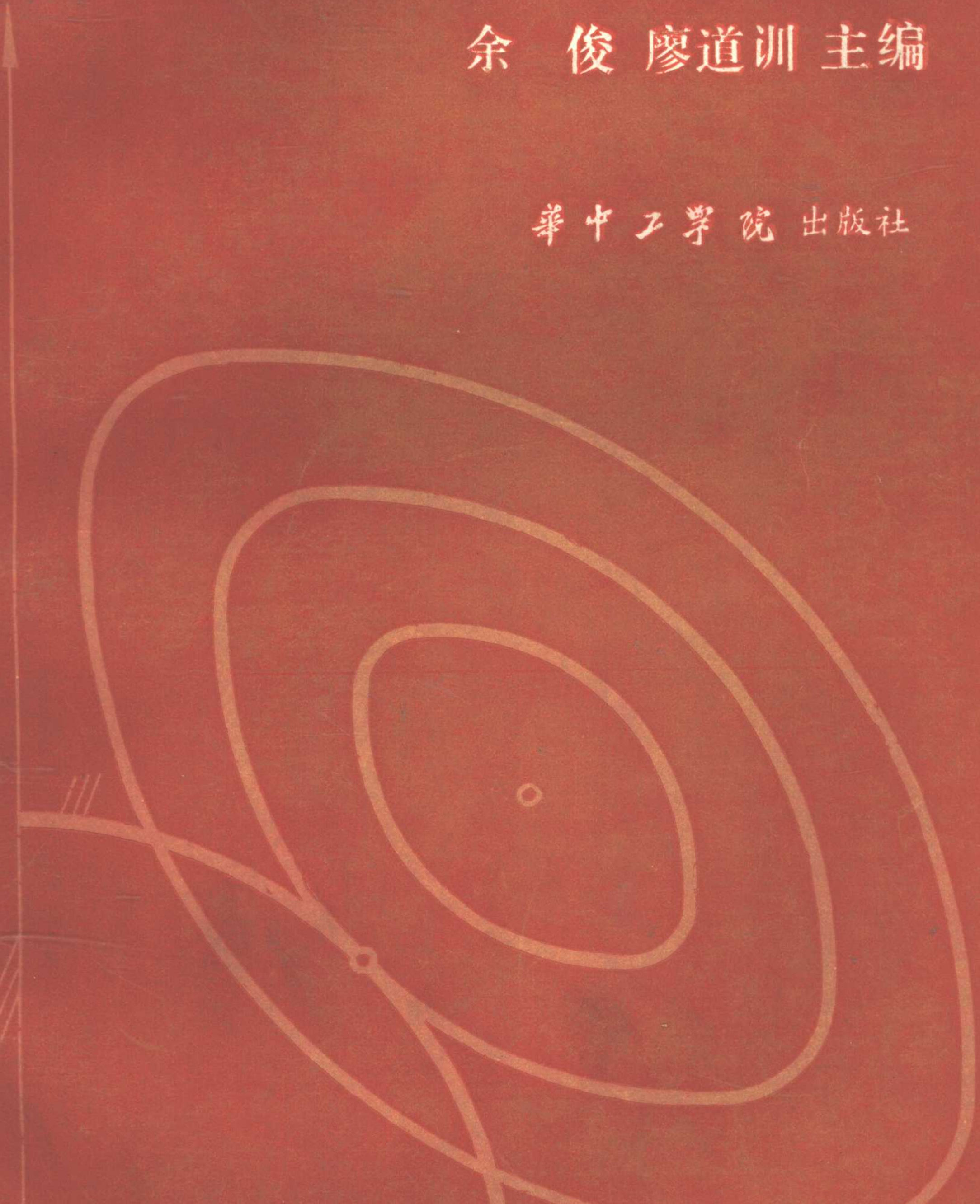
最优化方法及其应用

余 俊 廖道训 主编

華中工學院 出版社



最优化方法及其应用
余 俊 廖道训 主编
责任编辑 钟利章
*
华中工学院出版社出版
（武昌喻家山）
新华书店湖北发行所发行
武汉大学出版社印刷总厂印刷
*
开本：787×1092 1/16 印张：18.5 字数：445,000
1984年12月第一版 1984年12月第一次印刷
印数：1—7,000
统一书号：15255—021 定价：4.00元

内 容 提 要

最优化方法是近二、三十年才发展起来的新科学，它的实用意义很大，已受到人们的重 视。本书旨在阐述最优化方法的基本原理、基本算法及其应用。初稿曾在各种讲习班及不少高等院校作为教材 使用过多次。现对初稿进行了补充修改，进一步充实了内容。

全书包括：基本概念、一维搜索法、无约束和有约束函数极值的求法、线 性规划、几何规划、动态规划、整数规划、多目标优化方法、机构和机械零件的优化设计、机制工艺的优化等十五章。书后附 有最优化常用算法的计算程序，很有实用价值。本书内容丰富，概念明确，深入浅出，行文简洁，便于学习。

本书可作为高等院校本课程的教材，也可供有关专业教师、科技人员参考。

前　言

最优化方法是解决最优化问题的一种数值计算方法，它是近二、三十年才发展起来的一个应用数学分支。由于它的实用意义很大，赢得了人们的普遍重视。现今，世界各国对它的研究非常积极，发展迅速。近几年来，我国对它的研究进展也很快，已经在经济计划、企业管理、机械设计、自动控制、石油、化工、通讯、运输等方面取得了一些可喜的研究成果。

为了适应发展的需要，我们根据教学和科学研究的实践，于1981年初编写了这本书的初稿，曾把它在几次全国性讲习班及校内研究生、大学生中作为本课程的教材，不少兄弟单位也曾选用此书作为研究生、大学生及工程技术人员讲习班的教材。这次出版，我们根据试用的情况及读者的意见，对初稿进行了补充修改，进一步充实了内容。

全书共分十五章（绪论除外），包括：基本概念、一维搜索法、无约束和有约束极值的求法、线性规划、几何规划、动态规划、整数规划、全局极值的求法、多目标优化方法、机构和机械零件的优化设计、机械制造工艺的优化等。

此外，在附录中介绍了最优化常用算法的计算程序。这些程序构成一个有选择功能的、简便实用的优化设计程序包（DOP-1型）。它已在DJS-130计算机上调试通过，可用于求解一般的最优化问题；而且只要修改主程序中的个别控制参数，就可选用不同的最优化方法进行计算。

本书内容比较丰富，有一定的广度和深度，并注意到理论与实际的结合，力求深入浅出，概念明确，行文简洁，便于学习。本书可供高等学校机械类各专业和其他有关专业的师生以及企业部门和其他有关设计单位的科技人员参考。选用本书作为教材时，可根据教学情况，对书中某些章节的内容，进行取舍或删补。

本书由余俊、廖道训主编。绪论及第十四章后两节由余俊编写；第一、三、四、六、七、八、十三、十五章由廖道训编写；第二、五、九章由王惠珍编写；第十章及第十四章前两节由李元科编写；第十一、十二章由傅祥志编写；附录由曾昭华、王惠珍、丁幼琳共同编写。

在编写过程中，参考了国内外一些有关文献，还征求、采纳了校内外一些同志的意见，并得到了他们的支持和帮助，在此谨致谢意。

由于我们的理论水平和实际经验有限，书中难免存在缺点和错误，敬请读者批评指正。

编　者

1983年9月

于华中工学院

目　录

绪　论

§1　优化设计的基本概念

一、实际技术问题及其数学模型

为了具体说明优化设计的一些基本概念，先列举两个简单的例子。

例1　现有一块薄铁皮，宽度$b=14$厘米，长度$l=24$厘米，制成如图1所示的梯形槽，求斜边长x和倾角α为多大时，槽的容积最大？

解　由于b、l一定，故图1所示的槽形，其截面积最大的槽即是容积最大的槽。根据梯形面积的公式，可推导出槽的截面积A的计算公式。于是这一求解截面积A的极大化问题可表示为

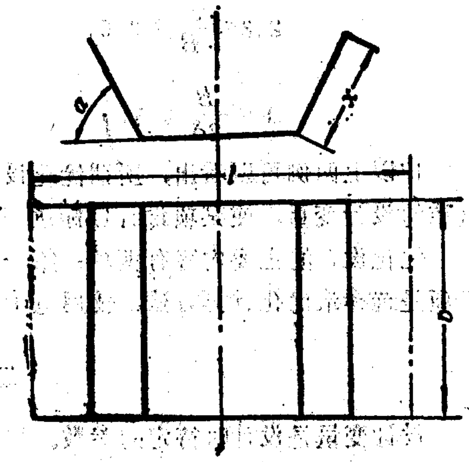
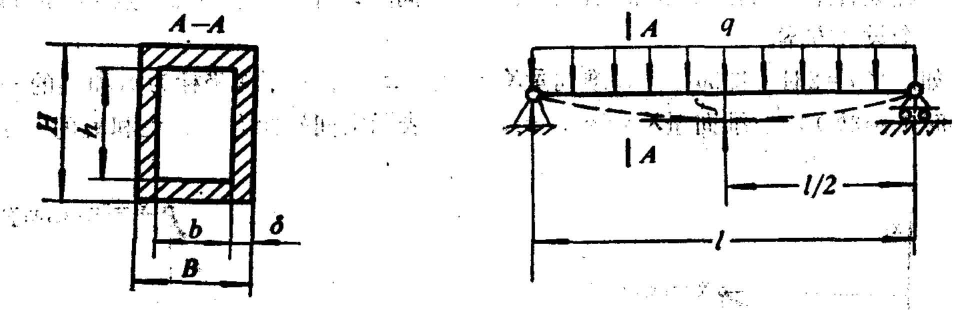


图1

$$\max \quad A=\frac{1}{2}[(24-2x)+(24-2x+2x\cos\alpha)]x\cdot\sin\alpha.$$

这一优化设计问题是具有两个设计变量（即x和α）的无约束非线性规划问题。

例2　设计一特殊需要的长卡尺（长度l在1米以上，为定值），采用矩形钢管（如图2a）。满足条件：$H/B=2.8\sim3.5$；$2.5\leqslant\delta\leqslant3$，$1\leqslant B/2\delta\leqslant5$. 要求卡尺处于简支梁情况下，由于自重引起的挠度$f$最小（如图2$b$）。试确定其断面尺寸。



(a)　　(b)

图2

解　按简支梁计算，中点的最大挠度为

$$f=\frac{5ql^4}{384EJ},$$

式中，惯性矩 $J=\frac{BH^3-bh^3}{12}=\frac{1}{12}[BH^3-(B-2\delta)(H-2\delta)^3]$；

载荷集度 $q=S\gamma$；

断面积 $S=HB-(H-2\delta)(B-2\delta)$；

E为材料的弹性模量；γ为材料的密度。

这一优化问题的数学模型可表示为：

求设计变量 H，B，δ，

使min $f(H,\ B,\ \delta)=\frac{5ql^4}{384EJ}$，

s.t. $2.5\leqslant\delta\leqslant3$，

$$2.8\leqslant\frac{H}{B}\leqslant3.5,$$

$$1\leqslant\frac{B}{2\delta}\leqslant5.$$

由以上两例可以看出，所谓优化设计，就是在一定的约束条件（即限制条件）下，选择合适的设计变量，使某项设计目标达到最优值（极大或极小）。

优化设计的主要内容有两项：第一项是将实际技术问题抽象成为最优化的数学模型；第二项是选择最优化计算方法，使用电子计算机求解数学模型。

二、设计变量

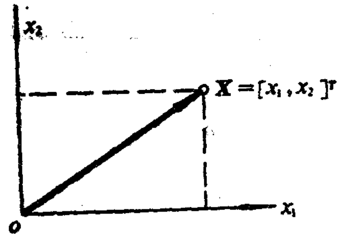
设计变量是设计时待定的参数。如果有n个设计变量，一般表示为x_i，$i=1,2,\cdots,n$.用$\mathbf{X}$表示由几个实数按一定次序排列构成的数组，即

$$\mathbf{X}=[x_1,\ x_2,\ \cdots,\ x_n]^T, \qquad (1)$$

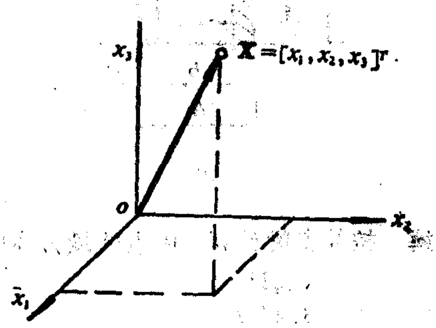
并把这一数组看作是一个n维（列）向量，x_i就是$\mathbf{X}$的第i个分量。n维向量的全体，称为n维向量空间。分量为实数的n维向量的全体，称为n维实数空间，记作R^n。在数学上，把有定义的向量内积（或称点积、数量积）的实数空间，称为欧氏空间，记作E^n。最优化方法涉及的n维向量空间，实际上是n维欧氏空间。

在工程设计中，又把上述n维空间称为设计空间；设计空间中的任一点$\mathbf{X}$，称为设计点，它代表一个设计方案。

例如，当$n=2$时（图3a），二维向量$\mathbf{X}=[x_1,\ x_2]^T$表示平面坐标为x_1和x_2的一个点；当$n=3$时（图3b），三维向量$\mathbf{X}=[x_1,\ x_2,\ x_3]^T$表示空间坐标为$x_1$、$x_2$和$x_3$的一个点。



(a)



(b)

图 3

在机械设计中，多数设计变量是连续量，但也有设计变量是离散量，例如齿轮的齿数要取整数，模数要取标准值，板材和型钢的尺寸必须按一定的规格选取等。对于离散变量，目前一般是先假定这种设计变量是连续量，当求得最优值后，再取成整数或按标准选取一个靠近的数；也有采用整数规划来处理这类问题的，其效果更好。

设计机械零件或部件时，涉及的参数是很多的。开始设计时最好将所有有关的参数都列出来，以便加以分析和归类：哪些是设计变量，必须赋初值并且要作为优化的结果计算出来；哪些是设计参数，只需在设计开始时给以定值，不必计算出新的结果。要将所有的参数都列为设计变量是不必要的，但设计变量如取得太少，往往又不能体现优化的效果。

总的来说，设计者在列数学模型时，要将能直接控制的、需要得出优化结果的、最重要的一些参数作为设计变量。没有一个严格的规律来选择设计变量，而需要根据问题的性质而定。同时，在建立目标函数及约束条件的过程中，往往会发现原来所确定的设计变量不恰当，需要加以变动。

例如，在设计液体摩擦滑动轴承时，参数是很多的，如轴承直径、轴颈长度、间隙、油的粘度、外载荷、转速、进油温度及压力等。一般来说，轴承的间隙及长径比是比较重要的，是设计者能直接控制，并需要得出优化结果的参数，因此，可以作为设计变量。轴承的直径往往受其他条件的限制，是已经给定的，因此，可作为设计参数来处理。油的粘度可以作为设计变量，但在某些情况下，如小孔节流的静压轴承，油的粘度不能太大，这时只好根据经验将粘度作为定值来处理。

有些参数，设计者不能直接判断，必须通过公式计算，如应力、应变、挠度、压力、温度、功率等等。这些参数往往是设计变量的函数，如果不需要求这些参数的最优解，一般来说，可以将这些参数作为约束条件来处理。例如，设计齿轮传动时，以齿轮的中心距最小作为目标函数，则设计变量应为模数和齿数等参数，而将轮齿的弯曲应力或接触应力作为约束条件。

设计自由度是指对某项设计所取变量的多少。一般来说，设计变量愈多，设计自由度就愈大，也比较容易达到最优设计目标；但目标函数的维数也就愈高，问题的求解会更困难。根据设计变量的多少，优化设计课题分为三类，即小型设计（变量1～10个），中型设计(变量10～50个），大型设计（变量50个以上）。

三、目标函数

目标函数是用来评价目标优劣的数学关系式。例如前面所举的两个实例中，分别表示的函数$A(x, a)$和$f(H, B, \delta)$均是目标函数。当然，目标函数是设计变量的函数，并且是标量函数。设计变量的个数，确定了目标函数的维数。

设计者往往选择最重要的工作特点作为设计的目标。目标函数中的设计变量是要进行计算并要求得出最优解的。

目标函数的选择是很有灵活性的。例如，设计一对齿轮传动时，对不同的要求，以下的准则都可采用：齿轮的体积最小，最小传动比，最小中心距，最小齿宽，最大功率等。当某一准则选为目标函数时，其余的可以作为约束条件来处理，以简化设计过程。但有时很难确定一个准则。例如，要求运转噪音小的最小传动比准则可能和体积最小准则一样重要。这时，可以用多目标优化方法来处理这个问题。

经济准则是一个重要的目标。经济准则的形式很多，如最少投资，最少年运转费用，最大年收益，最大投资收回率等等。而经济准则有时又必须和工作情况准则组合在一起，成为组合的多目标效用函数。例如，蒸汽透平机的单位马力投资（U_1）最少和出率（U_2）最高组成蒸汽透平机的极小化组合效用函数U，即$\min\quad U=U_1+1/U_2$。

一般地说，根据实际问题的需要，考虑多个目标进行优化设计比只考虑一个目标函数能获得较好的设计结果。当然，多目标问题的计算比单目标要复杂些。多目标问题一般是通过一定的方法处理成一个综合的单目标问题，或者处理成逐次求解的单目标序列。

四、约束条件

约束条件（约束方程）是对设计变量的取值给以某些限制的数学关系式。

约束条件可分为边界(几何)约束和性能约束两类。边界约束考虑的是设计变量的变化范围，如例 2 中的约束条件。性能约束是由某种性能设计要求所推导出来的一种约束条件，如摩擦离合片的比压或齿轮传动中的齿根弯曲应力不超过许用值等等。

从另一方面来说，约束条件又可区分为等式约束与不等式约束两种。

所有的约束条件都能满足的区域，称为可行域。换句话说，在可行域以内，所有约束条件都能满足，在可行域以外，有些约束条件不能满足。

在数学模型中，约束条件都要写成统一的格式。例如，某一设计包含三个独立变量x_1，x_2，x_3，根据设计要求，有约束条件$x_1+x_2\leqslant 2$，$x_2^2\leqslant x_3$，则可表示成下列统一的格式：

$$g_1(X)=x_1+x_2-2\leqslant 0,$$

$$g_2(X)=x_2^2-x_3\leqslant 0.$$

这样，能满足$g_1(X)$、$g_2(X)$的变量x_1、x_2、x_3必定能满足上述所要求的约束条件。

又如，约束条件$a\leqslant x\leqslant b$（a和b分别为变量x的下限和上限，各为一常数），则可以表示为

$$g_1(X)=a-x\leqslant 0,$$

$$g_2(X)=x-b\leqslant 0.$$

在实际计算时，有可能出现少数约束条件很难满足的情况，这时需要进行具体分析。有的约束条件不能满足时，是可以更动它们的限制值的；但有的则必须严格遵守限制值。例如齿轮的齿根弯曲应力不能满足约束条件时，如果计算值与允许值相差很少，设计者可根据情况修改一下允许值是可行的。如果几何条件不能满足，如齿廓过渡曲线干涉，就必须继续运算，不能修改约束条件。

§2　最优化方法概述

工程中的实际优化问题，大都是有约束条件的，故其数学模型可写为：

$$\begin{aligned}&\min\quad f(X),\\ &\text{s.t.}\quad g_i(X)\leqslant 0,\ i=1,\ 2,\ \cdots,\ p,\\ &\qquad\ \ h_j(X)=0,\ j=1,\ 2,\ \cdots,\ t.\end{aligned}$$

因为等式约束$h(X)=0$ 等价于$h(X)\geqslant 0$和$h(X)\leqslant 0$，故等式约束也可归并到不等式约束中去，于是数学模型可简化为

$$\min_{\boldsymbol{X}\in R} f(\boldsymbol{X}),$$

$$R=\{\boldsymbol{X}\mid g_i(\boldsymbol{X})\leqslant 0,\ i=1,\ 2,\ \cdots,\ m\}\subset E^n.$$

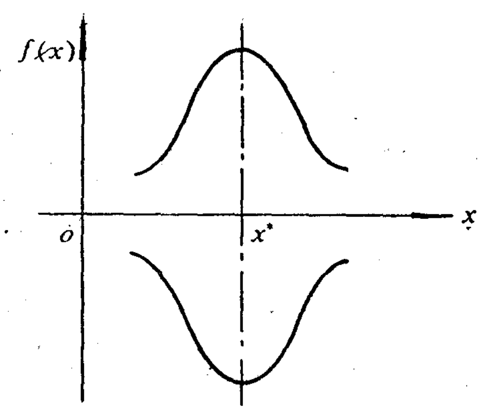


图 4

实际技术问题中的极大化问题，可以表示成 $\max f(\boldsymbol{X})$，约束条件同上面的写法一样。但由于 $\max f(\boldsymbol{X})$ 与 $\min(-f(\boldsymbol{X}))$ 有相同的极值点 $\boldsymbol{X}^*$（如图 4 所示），故求解目标函数的极大化问题也可转化为极小化问题。

求解目标函数的最优解的数值计算方法（在多数情况下，都要求满足一定的约束条件），称为最优化方法，它是一个较新的数学分支，其发展与电子计算机的出现和发展有着密切的关系。

由于目标函数与约束条件各具有不同的性质，最优化问题被分成若干类。当 $f(\boldsymbol{X})$、$g_i(\boldsymbol{X})$、$h_j(\boldsymbol{X})$ 均为线性函数时，称为线性规划。当 $f(\boldsymbol{X})$ 为二次函数，$g_i(\boldsymbol{X})$、$h_j(\boldsymbol{X})$ 为线性函数时，称为二次规划。当 $f(\boldsymbol{X})$ 或 $g_i(\boldsymbol{X})$、$h_j(\boldsymbol{X})$ 中有非线性函数时，称为非线性规划。自然，二次规划也是非线性规划，但它是一种特殊的非线性规划。

此外，还有几何规划，动态规划，整数规划等。本教材重点讨论工程设计中常用的非线性规划，对其他的数学规划也作了一般的介绍。

第一章　最优化方法的基本概念

在最优化方法中，经常用到与普通高等数学及工程数学有关的一些基本概念，其中包括集合的基本知识，矩阵的正定性，函数的泰勒公式，无约束极值与约束极值，凸函数与凸规划，正定二次二元函数，共轭方向，迭代算法的基本思想，算法的评价准则等。在这一章里将对这些内容作必要的介绍，并对一些公式加以推导或证明。

§1—1　集合的基本概念

一、集合的含义

集合是现代数学的基本概念之一。数学中许多令人费解的叙述，可以通过集合和集合运算的形式，简单、明了和形象地表示出来。现在，集合的概念和思想方法已经渗透到现代数学的各个领域，成为数学各分支的基础。在最优化方法中也广泛地应用了集合的概念。

集合是一些确定的对象的汇总，这些对象称为这个集合的元素。如果S是一个集合，x是S的元素，则记作$x\in S$，读作"x属于S"；若y不是S的元素，则记作$y\overline{\in}S$，读作"y不属于S"。

不含有任何元素的集合，称为空集。例如，方程式$x^2+1=0$的实数解所组成的集合就是空集。通常用Φ表示空集。

二、集合的表示法

1．列举法

列举法就是在大括号内列出元素的全体或一些有代表性的元素（各元素之间用逗号分开）来表示集合的。例如，$S=\{1,2,3,4,5\}$意思就是"S是由头五个自然数所组成的集合"。

2．特性表示法

特性表示法就是利用集合本身的特性来表示这一集合的。如上例可表示为：$S=\{x|1\leqslant x\leqslant 5$，$x$是整数$\}$。

一般地，可以表示为：$S=\{x|p(x)\}$，式中，x是元素的一般形式；$p(x)$是关于x的一个命题，它能描述x的性质，也就是说，S是所有使命题$p(x)$成立的x所组成的集合。

三、并集、交集与子集

1．并集

设S和T是两个集合，如果把这两个集合中的元素合在一起组成一个新的集合，则这个新

集合就叫做S和T的并集（又称为和集），并记为$S\cup T$，读作“S并T”或“S与T的并”。因此，$S\cup T=\{x|x\in S$或$x\in T\}$。

要注意，在作并集$S\cup T$时，S与T中所共有的元素只“算”一次。例如，$S=\{1, 2, 3, 4\}$，$T=\{3, 4, 5, 6\}$，则$S\cup T=\{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$。

2．交集

设S和T是两个集合，如果把这两个集合中所共有的元素取出来组成一个新集合，就称它为S和T的交集，并记为$S\cap T$，读作“S交T”或“S与T的交”。因此，$S\cap T=\{x|x\in S$且$x\in T\}$。例如，$S=\{1, 2, 3, 4\}$，$T=\{3, 4, 5, 6\}$，则 $S\cap T=\{3, 4\}$。

3．子集

如果集S的元素都是集T的元素，则称集S是集T的子集，并记为$S\subset T$或$T\supset S$，读作“T包含S”或“S包含于T”。

四、实数集合

1．实数集合的表示法

若a和b是实数，可用$[a, b]$表示满足$a\leqslant x\leqslant b$的实数x的集合，也可表示为$[a, b]=\{x|a\leqslant x\leqslant b$，$x$是实数$\}$。

在上述表示方法中，若用圆括号代替方括号，则它表示严格不等式。所以$(a, b]$是表示所有满足$a<x\leqslant b$的实数x的集合，也可表示为$(a, b]=\{x|a<x\leqslant b$，$x$是实数$\}$。

2．上确界与下确界

若S是上有界的实数集，则存在一个最小的实数m，使得对所有的$x\in S$均有$x\leqslant m$。这个m称为S的最小上界或上确界，记为 $m=\sup\limits_{x\in S}(x)$ 或 $m=\sup\{x|x\in S\}$。

类似地，若T是下有界的实数集，则存在一个最大的实数p，使得对所有的$x\in T$均有$x\geqslant p$。这个p称为T的最大下界或下确界，记为 $p=\inf\limits_{x\in T}(x)$或$p=\inf\{x|x\in T\}$。

§1—2 实二次型及矩阵的正定性

对于实数域上的一个二次型（n个变量x_1，x_2，…，x_n的二次齐次函数）

$$f(X)=\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}a_{ij}x_ix_j \qquad (a_{ij}=a_{ji}), \tag{1--1}$$

总可以找到如下的矩阵表达式

$$f(X)=X^TAX, \tag{1--2}$$

式中，A为$n\times n$实对称矩阵，即$A=[a_{ij}]_{n\times n}$ 且$a_{ij}=a_{ji}$；$X\in E^n$。

若对于任何向量X，总有

$$f(X)=X^TAX\geqslant 0,$$

则称实二次型$f(X)$为半正定二次型，并称相应的矩阵A为半正定矩阵。

若对于任何向量$X\neq 0$，总有

$$f(X)=X^TAX>0,$$

则称实二次型$f(X)$为正定二次型，并称相应的矩阵**A**为正定矩阵。

由上述定义可知，正定矩阵必然是半正定矩阵，但反之则不然。

若实二次型$-f(X)$为正定，则称$f(X)$为负定二次型，并称相应的矩阵**A**为负定矩阵；若$-f(X)$为半正定，则称$f(X)$为负半正定二次型，并称相应的矩阵**A**为负半正定矩阵。

若实二次型$f(X)$不具有上述性质，则称之为不定，相应的矩阵**A**也称为不定矩阵。

在最优化方法的研究中，有时需要判别实对称矩阵**A**是否正定。下面提供一种简便的判别方法。此法的基本概念是：实对称矩阵**A**为正定的充要条件是它的左上角各阶主子式均大于零，即

$$a_{11}>0, \quad \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix}>0, \quad \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix}>0,$$

$$\cdots, \quad \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{vmatrix}>0.$$

又由线性代数学可知，实对称矩阵**A**为半正定的充要条件是它的所有主子式均大于或等于零。由于**A**的所有主子式是很多的，它有i阶（$i=1, 2, \cdots, n$），而且每一阶主子式都有若干个（除了一阶、n阶主子式各为一个之外），所以这种判别半正定矩阵的方法是很麻烦的。

例1—1 已知实对称矩阵

$$\mathbf{A}=\begin{pmatrix} 1 & 1 & 3 \\ 1 & 1 & 1 \\ 3 & 1 & 1 \end{pmatrix},$$

判别**A**是否正定。

解 此矩阵的左上角的各阶主子式为

$$a_{11}>0, \quad \begin{vmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{vmatrix}=0, \quad \begin{vmatrix} 1 & 1 & 3 \\ 1 & 1 & 1 \\ 3 & 1 & 1 \end{vmatrix}=-4,$$

故**A**不是正定矩阵。

§1—3 函数的梯度及二阶导数矩阵

一、函数的梯度

以三维向量空间为例，如图1—1所示，假设：曲面1与2分别表示函数$u=u(x, y, z)$的两个等值面；点M_0与点M分别位于此两个曲面上，并且过这两点的函数u的值分别为$u(M_0)$与$u(M)$（用$\|\overrightarrow{M_0M}\|$表示点$M_0$与$M$之间的距离），则函数$u$在点$M_0$沿方向$S$的平均变化率为

$$\frac{u(M)-u(M_0)}{\|\overrightarrow{M_0M}\|}.$$

函数u在点M_0沿方向S的方向导数为

$$\left(\frac{\partial u}{\partial s}\right)_{M_0}=\lim_{M\to M_0}\frac{u(M)-u(M_0)}{\|\overrightarrow{M_0M}\|}.$$

经推导可得

$$\frac{\partial u}{\partial s}=\frac{\partial u}{\partial x}\cos\alpha+\frac{\partial u}{\partial y}\cos\beta+\frac{\partial u}{\partial z}\cos\gamma, \tag{1—3}$$

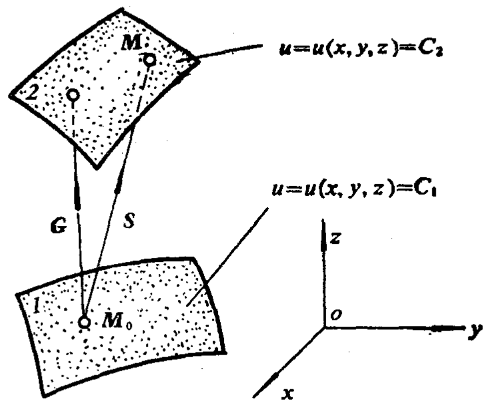


图1—1

式中，$\frac{\partial u}{\partial x}$、$\frac{\partial u}{\partial y}$、$\frac{\partial u}{\partial z}$为函数$u$在点$M_0$处的偏导数，它们分别表示函数$u$沿$x$轴、$y$轴、$z$轴方向的变化率；$\cos\alpha$、$\cos\beta$、$\cos\gamma$分别表示方向$S$对$x$轴、$y$轴、$z$轴的方向余弦，也就是在$S$方向上的单位向量 $S^\circ=\cos\alpha\cdot i+\cos\beta\cdot j+\cos\gamma\cdot k$的坐标分量。

若把式（1—3）的其余三个数$\frac{\partial u}{\partial x}$、$\frac{\partial u}{\partial y}$、$\frac{\partial u}{\partial z}$也视为一个向量$G$的坐标分量，即取

$$G=\frac{\partial u}{\partial x}i+\frac{\partial u}{\partial y}j+\frac{\partial u}{\partial z}k,$$

可以看出，G在给定点处为一固定向量。因此，式（1—3）可以写成

$$\frac{\partial u}{\partial s}=G\cdot S^\circ=\|G\|\cos(\widehat{G,S^\circ}).$$

此式表明，G在S方向上的投影正好等于函数u在该方向上的方向导数。依此，当方向S与G的方向一致，即$\cos(\widehat{G,S^\circ})=1$时，方向导数取得最大值，其值为$\frac{\partial u}{\partial s}=\|G\|$。

由此可见，向量G的方向就是函数u变化率最大的方向，其模也正好是这个最大变化率的数值。我们把G叫做函数u在给定点处的梯度，并记作$\mathrm{grad}\,u$或∇u，即

$$\mathrm{grad}\ u=\nabla u=\frac{\partial u}{\partial x}i+\frac{\partial u}{\partial y}j+\frac{\partial u}{\partial z}k. \tag{1—4}$$

从式（1—4）可以看出，在点M_0处∇u的坐标分量$\frac{\partial u}{\partial x}$、$\frac{\partial u}{\partial y}$、$\frac{\partial u}{\partial z}$正好是过点$M_0$的等值面$u=C_1$的法线方向数，故知梯度即是其法向量。又因函数$u$沿梯度方向的方向导数$\frac{\partial u}{\partial s}=\|\nabla u\|>0$，故函数$u$沿梯度方向是增大的。

综上所述，可知：函数u在给定点的梯度是一向量，它的大小就是函数在该点的方向导数的最大值，它的方向垂直于函数过该点的等值面，且指向函数增大的方向。

一般地说，若研究对象是函数$f(X)$，$X\in E^n$，则其梯度可表示为

$$\nabla f(X)=\left[\frac{\partial f(X)}{\partial x_1},\ \frac{\partial f(X)}{\partial x_2},\ \cdots,\ \frac{\partial f(X)}{\partial x_n}\right]^T. \tag{1—5}$$

例 1—2 已知$f(X)=\frac{1}{2}X^TAX+B^TX+c$，其中，

$A=\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22}\end{bmatrix}$，$B=[b_1,b_2]^T$，$X=[x_1,x_2]^T$，$c$为常数。

求$\nabla f(X)$。

解 $\nabla f(X)=\nabla\left(\frac{1}{2}X^TAX\right)+\nabla B^TX+\nabla c$,

由于 $\frac{1}{2}X^TAX=\frac{1}{2}[x_1,\ x_2]\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22}\end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2\end{bmatrix}=\frac{1}{2}(a_{11}x_1^2+2a_{12}x_1x_2+a_{22}x_2^2)$,

$$B^TX=[b_1,\ b_2]\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2\end{bmatrix}=b_1x_1+b_2x_2,$$

故得 $\nabla\left(\frac{1}{2}X^TAX\right)=\begin{bmatrix} a_{11}x_1+a_{12}x_2 \\ a_{21}x_1+a_{22}x_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22}\end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2\end{bmatrix}=AX$,

$$\nabla(B^TX)=\begin{bmatrix} b_1 \\ b_2\end{bmatrix}=B,$$

又由于 $\nabla c=0$,

最后得 $\nabla f(X)=AX+B$。

二、函数的二阶导数矩阵

设函数为$f(X)$，$X\in E^n$，其二阶导数矩阵定义为

$$\nabla^2 f(X)=\begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f(X)}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f(X)}{\partial x_1\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f(X)}{\partial x_1\partial x_n} \\ \frac{\partial^2 f(X)}{\partial x_2\partial x_1} & \frac{\partial^2 f(X)}{\partial x_2^2} & \cdots & \frac{\partial^2 f(X)}{\partial x_2\partial x_n} \\ \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots \\ \frac{\partial^2 f(X)}{\partial x_n\partial x_1} & \frac{\partial^2 f(X)}{\partial x_n\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f(X)}{\partial x_n^2}\end{bmatrix}. \tag{1—6}$$

二阶导数矩阵又称为海辛(Hessian)矩阵，它是$n\times n$对称矩阵。

例 1—3 已知$f(X)=2x_1^2+2x_1x_2+3x_2^2$，求$\nabla^2 f(X)$。

解 $\frac{\partial f(X)}{\partial x_1}=4x_1+2x_2$，$\frac{\partial f(X)}{\partial x_2}=2x_1+6x_2$,

$$\frac{\partial^2 f(X)}{\partial x_1^2}=4,\quad \frac{\partial^2 f(X)}{\partial x_1\partial x_2}=2,$$

$$\frac{\partial^2 f(X)}{\partial x_2\partial x_1}=2,\quad \frac{\partial^2 f(X)}{\partial x_2^2}=6,$$

故 $\nabla^2 f(X)=\begin{bmatrix} 4 & 2 \\ 2 & 6\end{bmatrix}$.