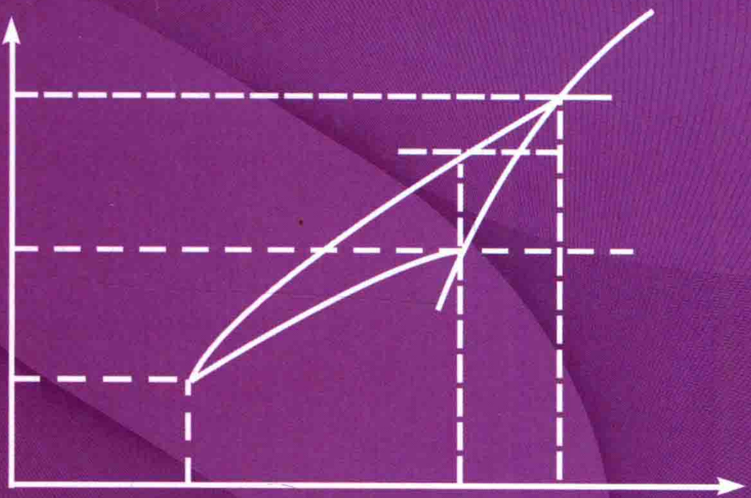
高等学校数学教材系列丛书
西安电子科技大学立项教材



最优控制理论与数值算法

李俊民 李金沙 编著

西安电子科技大学出版社
http://www.xduph.com

高等学校数学教材系列丛书
西安电子科技大学立项教材

最优控制理论与数值算法

李俊民　李金沙　编著

西安电子科技大学出版社

内 容 简 介

本书讲述了最优控制的基本理论和统一的数值算法，具体包括变分原理、极大值原理、仿射非线性控制系统的最短时间控制、动态规划、线性二次型最优控制和一种最优控制的统一数值算法等内容。本书既注重最优控制基本理论的严谨性，又突出理论算法的可实现性，书中给出的非线性系统最优控制的统一数值算法是编者的研究成果。

本书可作为高等学校理工科高年级本科生和研究生的教材或参考书，也可作为相关专业科技工作者的参考书。

图书在版编目(CIP)数据

最优控制理论与数值算法/李俊民，李金沙编著.
—西安：西安电子科技大学出版社，2016.5
高等学校数学教材系列丛书
ISBN 978-7-5606-4068-6

Ⅰ.① 最… Ⅱ.① 李… ② 李… Ⅲ.① 最佳控制—数值理论 ②数值计算 Ⅳ.① O232 ②O241

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2016)第 099245 号

策划编辑　李惠萍
责任编辑　李惠萍
出版发行　西安电子科技大学出版社(西安市太白南路 2 号)
电　　话　(029)88242885　88201467　　邮　　编　710071
网　　址　www.xduph.com　　电子邮箱　xdupfxb001@163.com
经　　销　新华书店
印刷单位　陕西天意印务有限责任公司
版　　次　2016 年 5 月第 1 版　2016 年 5 月第 1 次印刷
开　　本　787 毫米×960 毫米　1/16　印张　12
字　　数　221 千字
印　　数　1～3000 册
定　　价　22.00 元
ISBN　978-7-5606-4068-6/O
XDUP　4360001-1

前　言

按照数学的观点，广义地讲，认识世界是数学建模问题，改造世界是控制问题，而“多快好省”地改造世界则是最优控制问题。因此，控制和最优控制问题几乎是无处不在。

通常，在用数学方式描述的最优控制问题中，受控对象往往是一个动态方程，这一方程可以是离散时间的差分方程、常微分方程或者是积分方程，也可以是随机微分方程或偏微分方程，甚至可以是上述一些方程的耦合组。受控动态方程常称作控制系统或状态方程，而它的解常称为系统的状态。控制作用全体常常是某个函数空间。另外，还有一个评价控制作用优劣的性能指标，控制的目的就是最小化或最大化这个性能指标。此外，还可能存在若干状态和控制的约束条件。所有这些加在一起形成了一个最优控制问题的数学描述。当状态方程是常微分方程时，状态空间是有限维的，当状态方程是随机微分方程或偏微分方程时，状态空间是无限维的。

最优控制理论是从20世纪50年代末60年代初发展起来的现代控制理论的一个重要分支。它最初研究的对象是从导弹、航天、航空、航海中的制导、导航和控制中所总结出来的一类按某个性能指标取最优（性能指标达到极小或极大）的控制问题。其核心问题是如何为被控制系统选择一个控制策略，使得被控制系统本身获得优良的技术品质和满意的经济效益。随着最优控制理论的发展，它不但在航空和空间飞行器的控制设计方面得到了卓有成效的应用，而且在民用工业中的汽车、造纸、化工等部门亦有广泛的应用。特别值得指出的是，最优控制理论发展到今天，早已突破了产生它的军事控制工程领域，已经渗透

到生态环境、社会经济和管理等多个领域，可以预期，在自然科学和社会科学交叉处生长出来的边缘学科中，最优控制理论也将会大有用武之地。

本书所说的最优控制理论，仅涉及由常微分方程所描述的控制系统。严格地讲，应称其为集中参数控制系统的最优控制理论(相对于由偏微分方程组所描述的分布参数控制系统而言)。本书具体内容包括变分法、极大值原理、仿射非线性控制系统的最短时间控制、动态规划、线性二次型最优控制和作者提出的最优控制数值算法等内容。

限于作者的知识面以及作者个人对最优控制理论的理解，书中必有许多表达不够确切，或者叙述不够严谨之处，敬请读者不吝赐教。

(作者邮箱：jmli@mail. xidian. edu. cn)

编著者

2016 年 1 月 30 日

目　　录

第一章 绪 论

1.1 最优控制问题产生的背景及发展简史

从数学角度广义地讲，认识世界是数学建模问题，改造世界是控制问题，而“多快好省”地改造世界则是最优控制问题。在许多实际系统中，如航天、航空、航海、石油、化工、机械工业和群体智能系统中存在大量最优控制问题，例如最短时间问题、最少燃料问题、最小能耗问题、一般的最优调节问题和最优跟踪问题以及多智能体系统的最优一致性问题等。

许多先进的控制理论和技术均利用了最优控制理论的结果或与最优控制有密切关系，如自适应控制、鲁棒控制、预测控制、博弈与协同控制和智能控制等。

最优控制问题属于泛函极值的范畴，早在十七世纪 Euler 和 Lagrange 通过对最速降线问题和等周问题等的研究，分别得到了泛函极值的 Euler 方程和 Lagrange方程条件，这些条件都是必要条件，但非充分条件，这些条件是对弱极值问题给出的；Weierstrass 和 Mcshane 将 Euler 方程和 Lagrange 方程条件推进到强极值的情形，给出了 Weierstrass 条件。

二次世界大战以后，由于航天事业的发展，人们提出了一类不能用经典变分法求解的极值控制问题，这类问题的特点是控制集或决策集为闭集。极大值原理和动态规划就是为解决这类问题而创立的。动态规划是美国数学家 Bellman 于 1953 年在研究决策过程最优化理论与方法时提出的，起初的结果给出决策过程最优性原理，随后将最优性原理推广到连续时间动态系统的最优控制问题中，给出了最优性的充分条件，那就是非常著名的 Hamilton-Jacobi-Bellman 方程，简称为 HJB 方程。1957 年苏联数学家庞特里雅金(Pontryagin)提出并证明了极大值原理，成为处理闭集性约束变分问题的强有力工具。Kalman 在 20 世纪 50 年代后期和 1965 年分别提出了线性二次型理论(LQ 理论)和最优滤波理论，利用随机系统的输出估计出状态变量，解决了最优状态反馈系统中状态难以知道的困难。B. D. Anderson发展了线性二次型理论，使其成为最优控制理论中理论最完善、方

法最有效的一部分成果，在实际应用中已经发挥了重要的作用，同时也成为最优控制理论与其它理论相结合的主要途径和方法。

二次世界大战之后的二十年是最优控制理论与方法发展的二十年，其基本特征在理论上表现为凸分析的发现与采用，解决了约束集为闭集的种种极值问题，在方法上表现为基于迭代原理的各种数值方法(包括梯度法、拟线性化法和极值变分法等)的建立，解决了一些最优化理论到实际的应用问题，Bryson 和 Ho YC 的专著《Applied Optimal Control》系统总结了各种计算方法，强调了摄动法的有效性。二十世纪六十年代到七十年代初期，最优控制理论向纵深发展，建立了有限维空间中的约束极值和无限维空间中的约束极值的统一理论，七十年代初波兰学者 Mesarovic 提出了递阶优化控制理论，利用分解-协调的概念形成了两种递阶优化控制算法，即关联预测法(IPM)和关联平衡法(IBM)；八十年代出现了最优控制算法向并行化方向发展的热潮，提出了各种同步和异步并行算法。由于神经网络的第二次研究高潮的兴起，出现了利用 Hopfield 网络求解最优控制问题的新途径，这种方法以模拟电路假想实现为基本特征，使最优控制问题的求解更快速和更容易实现。H_∞ 控制是研究干扰在输出上影响达到最小的控制问题，首先由加拿大控制学家 G. Zames 在 1981 年提出，随后由 J. C. Doyle 等四人将 H_∞ 控制问题的求解归结为求解两个 Riccati 方程，沟通了线性二次型理论与 H_∞ 控制的联系，同时 H_∞ 最优控制可以解决许多鲁棒控制问题，说明鲁棒控制与 H_∞ 控制之间有某种联系。最优控制理论与稳定性理论之间有着密切的联系，最优控制的逆问题就是研究二者之间关系的重要问题，对于线性二次型问题的逆问题已经有了许多结果，而且这些结果在实际中得到了成功的应用。在二十世纪末，微分几何理论在非线性系统控制问题中的成功应用，为非线性系统提供了一种构造性的控制理论与方法，其中 Backstepping 方法是具有代表性的方法之一。这一时期利用构造性非线性控制理论研究最优控制问题的反问题也取得了重要进展，给出了非线性最优控制问题的构造方法。

二十世纪九十年代以前所有最优控制理论与算法都是建立在精确数学模型基础之上的，当精确模型难于知道(这恰好符合实际情况)时，现有的理论与算法都会失效。英国学者 P. D. Roberts 提出了动态系统优化与参数估计集成方法，试图解决这一问题，该方法在考虑模型与实际问题存在差异的情况下，通过构造一系列简单的最优控制问题，逐步逼近实际问题的最优解。这是一种迭代算法，同时该方法为最优控制问题的迭代算法提出了一种统一的迭代格式，几乎所有的迭代算法都是它的特例。

1.2 最优控制的几个实际问题

1. 升降机的最快升降问题

如图 1.1 所示，将升降机简化为一个内部带控制的物体 M，其质量为 1。控制器可提供一个作用于 M 质心上的使其垂直上升或下降的加速度 $u(t)$，由于 $u(t)$ 由动力设备产生，不妨设 $|u(t)|\leqslant k$，k 为常数。设 t_0 时刻 M 的质心距离地面的垂直距离为 $x(t_0)=x_1^0$，垂直运动速度为 $\dot{x}(t_0)=x_2^0$，问题是如何选取 $u(t)$，使 M 从初始时刻 t_0 的初态 (x_1^0, x_2^0) 最快速地到达终端时刻 t_f 的末态 $x(t_f)=0$（到达地面），$\dot{x}(t_f)=0$（到达地面时速度为零）。

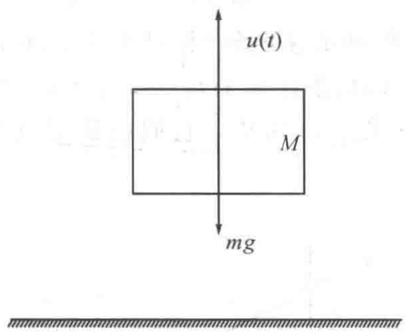


图 1.1 升降机示意图

设 $x(t)$ 为 M 的质心距离地面的高度，地面上为正，地面下为负，加速度 $u(t)$ 向上为正，向下为负。由牛顿第二定律得：

$$\ddot{x}(t) = u(t) - g$$

即

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = x_2 \\ \dot{x}_2 = u - g \end{cases}$$

其中 $x_1=x$。而初始条件为

$$\begin{cases} x_1(t_0) = x_1^0 \\ x_2(t_0) = x_2^0 \end{cases}$$

终端条件为

$$\begin{cases} x_1(t_f) = 0 \\ x_2(t_f) = 0 \end{cases}$$

于是升降机的最快升降问题可描述为：寻找满足 $|u|\leqslant k$ 的控制函数 $u(t)$，使得它把 M 从初态 $(x_1(t_0), x_2(t_0))$ 转移到末态 $(0, 0)$ 且使过度时间最短，即使得

$$J[u(\cdot)] = \int_{t_0}^{t_f} \mathrm{d}t = t_f - t_0$$

为最小。

2. 航天拦截问题

设在某一惯性坐标系内，$\boldsymbol{x}_L$ 和$\dot{\boldsymbol{x}}_L$ 为拦截器质心的位置和速度向量，而 $\boldsymbol{x}_M$ 和 $\dot{\boldsymbol{x}}_M$ 为目标质心的位置和速度向量，如图 1.2 所示。取 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}_L-\boldsymbol{x}_M$，$\boldsymbol{v}=\dot{\boldsymbol{x}}_L-\dot{\boldsymbol{x}}_M$ 分别为相对位置和速度向量。显然 $\boldsymbol{x}\in\mathbf{R}^3$，$\boldsymbol{v}\in\mathbf{R}^3$。若记 $m(t)$为拦截器 t 时刻的质量，$F(t)$为拦截器 t 时刻的推力大小，$\boldsymbol{u}(t)\in\mathbf{R}^3$ 为拦截器 t 时刻的推力方向向量，$C\in\mathbf{R}^1$ 为发动机的有效喷气速度常数，则拦截器与目标的相对运动方程为

$$\dot{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{v},\ \dot{\boldsymbol{v}} = \boldsymbol{a}(t) + \frac{F(t)}{m(t)}\boldsymbol{u}(t),\ \dot{m}(t) = -\frac{F(t)}{C} \tag{1.1}$$

其中 $\boldsymbol{a}(t)\in\mathbf{R}^3$ 是固有(除控制加速度外)相对加速度向量，它是已知 t 的向量函数。系统状态为 $\boldsymbol{x}$、$\boldsymbol{v}$、m，初始条件为 $\boldsymbol{x}(t_0)=\boldsymbol{x}_0$、$\boldsymbol{v}(t_0)=\boldsymbol{v}_0$、$m(t_0)=m_0$，控制量为 $F(t)$、$\boldsymbol{u}(t)$。显然从工程实际考虑，它们应满足 $0\leqslant F(t)\leqslant \max F(t)=F$，$\boldsymbol{u}(t)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{u}(t)=1$。

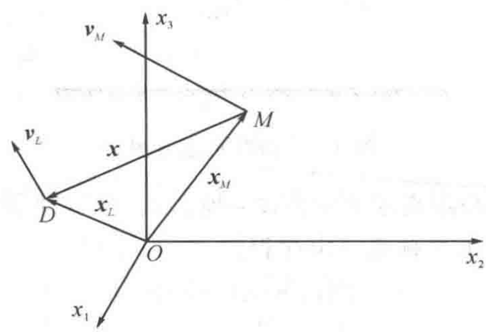


图 1.2 航天拦截系统

由于拦截器的质量永不能小于所有燃料消耗尽后的剩余质量 m_e，它包含仪器、壳体、武器等的质量，从而知终端时刻 t_f 的质量 $m(t_f)$应满足

$$m(t_f) \geqslant m_e \tag{1.2}$$

所谓航天拦截问题，就是要求在终端时刻 t_f 时，拦截器和目标的相对距离为零，而相对速度为任意，即

$$x(t_f) = 0,\ v(t_f)\ \text{任意} \tag{1.3}$$

若要求整个拦截过程的时间尽量短，又要求燃料消耗尽量省，则可取如下性能指标为最小，其中 C_1 为加权常数：

$$J[u(\cdot), F(\cdot)] = \int_{t_0}^{t_f} [C_1 + F(t)] \mathrm{d}t$$
$$= C_1(t_f - t_0) + C \cdot [m_0 - m(t_f)] \tag{1.4}$$

拦截问题就是选择满足约束的控制 $F(t)$、$u(t)$、$t \in [t_0, t_f]$，驱使状态方程(1.1)从初态出发的解在某终端时刻 $t_f > t_0$ 时满足式(1.2)和式(1.3)且使性能指标式(1.4)达到最小。

3. 生产库存控制问题

一种产品的生产与其库存有密切关系，采取什么样的策略可以使得库存适当且市场又不会脱销，是一个值得讨论的策略问题。

设 $x_1(t)$ 是 t 时刻的库存量，$u(t)$ 是 t 时刻产品的生产率，$x_2(t)$ 是 t 时刻的销售率。生产库存系统的状态方程为

$$\dot{x}_1 = u - x_2, \ \dot{x}_2 = -\lambda x_1, \ \lambda > 0$$

控制应满足：$u_0 \leqslant u \leqslant u_1$，$0 \leqslant u_0 < u_1$，$u_0$、$u_1$ 分别表示最小与最大生产率。

设 C 表示生产率为 $u(t)$ 时单位时间内的生产成本，h 表示库存为 $x_1(t)$ 时单位时间内的库存成本，C、h 皆为常数，对于给定的终端时刻 t_f，要求整个时间内总成本最小，即

$$\min_{u(\cdot)} J[u(\cdot)] = \int_{t_0}^{t_f} [Cu(t) + hx_1(t)] \mathrm{d}t$$

其中 x_1、x_2 和 u 满足状态方程。

1.3 最优控制问题的基本概念、分类及问题提法

1. 基本概念

定义 1.1 对于一个动态系统

$$\dot{\boldsymbol{x}}(t) = f(\boldsymbol{x}(t), \boldsymbol{u}(t), t), \ \boldsymbol{x}(t_0) = \boldsymbol{x}_0, \ t_0 \leqslant t \leqslant t_f \tag{1.5}$$

受到下面等式和不等式约束：

$$g(\boldsymbol{x}(t), \boldsymbol{u}(t), t) = 0, \ h(\boldsymbol{x}(t), \boldsymbol{u}(t), t) \leqslant 0, \ t_0 \leqslant t \leqslant t_f \tag{1.6}$$

称 $\boldsymbol{x}(t) \in \mathbf{R}^n$ 为状态向量，$\boldsymbol{u}(t) \in \mathbf{R}^m$ 为控制向量。

若 g、h 仅与 $\boldsymbol{x}(t)$ 有关，称约束(1.6)为状态约束；若 g、h 仅与 $\boldsymbol{u}(t)$ 有关，称约束式(1.6)为控制约束。称满足所有状态约束的状态轨线 $\boldsymbol{x}(t)$ 为容许轨线；称满足所有控制约束的控制向量 $\boldsymbol{u}(t)$ 为容许控制。

若容许控制 $\boldsymbol{u}(t)$ 带入状态方程(1.5)所得到的解 $\boldsymbol{x}(t)$ 为容许状态轨线，则称 $\boldsymbol{x}(t)$、$\boldsymbol{u}(t)$ 为一个容许对。满足末端状态约束的状态集合

$$M = \{\boldsymbol{x}(t_f): g(\boldsymbol{x}(t), \boldsymbol{u}(t), t) = 0, \ h(\boldsymbol{x}(t), \boldsymbol{u}(t), t) \leqslant 0\} \tag{1.7}$$

称为目标集。

定义 1.2 对于系统(1.5)的容许对集合中的每对函数 $\boldsymbol{x}(t)$、$\boldsymbol{u}(t)$都有一个确定的数 J 与之相对应，则称 J 为 $\boldsymbol{x}(t)$、$\boldsymbol{u}(t)$的泛函，记作 $J=J(\boldsymbol{x}(t), \boldsymbol{u}(t), t)$。把这样的泛函称为系统(1.5)的性能指标。

性能指标的常见形式有：

Mayer 型，也称末值型：

$$J=\theta(\boldsymbol{x}(t_f), t_f)$$

Lagrange 型，也称积分型：

$$J=\int_{t_0}^{t_f}\phi(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{u}, t)\mathrm{d}t$$

Bolza 型，也称混合型：

$$J=\theta(\boldsymbol{x}(t_f), t_f)+\int_{t_0}^{t_f}\phi(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{u}, t)\mathrm{d}t$$

2. 最优控制问题的分类

最优控制问题的分类有多种方法，我们给出以下几种常见的分类法。

· 根据性能指标的不同，可以分为 Mayer 型(或末值型)、Lagrange 型(或积分型)和 Bolza 型(或混合型)最优控制问题；

· 根据控制目标的不同，可以分为最优调节问题和最优跟踪问题；

· 根据被控对象的不同，可以分为线性系统最优控制问题和非线性系统最优控制问题，也可以分为定常系统最优控制问题和时变最优控制问题，亦可以分为确定性最优控制问题和随机最优控制问题，等等。

3. 最优控制问题的提法

对于(1.5)式所述的系统，在给定的容许控制集合 U 中选择一个容许控制 $\boldsymbol{u}(t)$，使对应满足系统方程的解 $\boldsymbol{x}(t)$是满足所有状态约束(1.6)和(1.7)的容许轨线，并使得与容许对 $\boldsymbol{x}(t)$、$\boldsymbol{u}(t)$相对应的性能指标 $J(\boldsymbol{u}(\cdot))$达到最优。

第二章　数学预备知识

本章将简要复习和回顾矩阵微分的主要内容和函数极值的相关知识，这些数学预备知识是后面学习最优控制理论的基础。

2.1　向量、矩阵变量的导数

定义 2.1　设 $f(\boldsymbol{x})=[f_1(\boldsymbol{x}) \quad \cdots \quad f_m(\boldsymbol{x})]^{\mathrm{T}}$ 是 $\boldsymbol{x}\in\mathbf{R}^n$ 的函数向量，则 $f(\boldsymbol{x})$ 对 $\boldsymbol{x}$ 的导数为

$$\frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}}=\frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}}=\begin{bmatrix}\dfrac{\partial f_1}{\partial x_1} & \cdots & \dfrac{\partial f_1}{\partial x_n}\\ \vdots & & \vdots\\ \dfrac{\partial f_m}{\partial x_1} & \cdots & \dfrac{\partial f_m}{\partial x_n}\end{bmatrix}=\left[\frac{\partial f_i}{\partial x_j}\right]_{m\times n}$$

称它为 $f(\boldsymbol{x})$ 的 Jacobi 矩阵。

类似地可以定义：

$$\frac{\partial f^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}}=\begin{bmatrix}\dfrac{\partial f_1}{\partial x_1} & \cdots & \dfrac{\partial f_m}{\partial x_1}\\ \vdots & & \vdots\\ \dfrac{\partial f_1}{\partial x_n} & \cdots & \dfrac{\partial f_m}{\partial x_n}\end{bmatrix}_{m\times n}=\left[\frac{\partial f_j}{\partial x_i}\right]_{n\times m}$$

由以上定义易得如下结果：

- $\dfrac{\partial f^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}}=\left(\dfrac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}}\right)^{\mathrm{T}}$，$\dfrac{\partial \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}}{\partial \boldsymbol{x}}=\boldsymbol{I}=\dfrac{\partial \boldsymbol{x}}{\partial \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}}$。
- 常用$\dfrac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}}$表示$\dfrac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}}$。
- 标量 $f(\boldsymbol{x})$ 对向量 $\boldsymbol{x}$ 的导数$\dfrac{\partial f}{\partial \boldsymbol{x}}=\begin{bmatrix}\dfrac{\partial f}{\partial x_1}\\ \vdots\\ \dfrac{\partial f}{\partial x_n}\end{bmatrix}=\mathrm{grad}f=\nabla f$，称为 $f(\boldsymbol{x})$ 的梯度

向量。

性质 2.1 设 $\boldsymbol{a}$、$\boldsymbol{b}$ 均是 n 维向量 $\boldsymbol{x}$ 的 m 维函数向量，即 $\boldsymbol{a}(\boldsymbol{x})=[a_1(\boldsymbol{x}) \quad \cdots \quad a_m(\boldsymbol{x})]^{\mathrm{T}}$，$\boldsymbol{b}(\boldsymbol{x})=[b_1(\boldsymbol{x}) \quad \cdots \quad b_m(\boldsymbol{x})]^{\mathrm{T}}$，则有

$$\frac{\partial(\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{b}(\boldsymbol{x}))}{\partial \boldsymbol{x}}=\frac{\partial \boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}}\boldsymbol{b}(\boldsymbol{x})+\frac{\partial \boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}}\boldsymbol{a}(\boldsymbol{x})$$

证明

$$\begin{aligned}
\frac{\partial(\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{b}(\boldsymbol{x}))}{\partial \boldsymbol{x}} &= \begin{bmatrix} \dfrac{\partial(\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{b}(\boldsymbol{x}))}{\partial x_1} \\ \vdots \\ \dfrac{\partial(\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{b}(\boldsymbol{x}))}{\partial x_n} \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} \dfrac{\partial \boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x})}{\partial x_1}\boldsymbol{b}(\boldsymbol{x})+\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x})\dfrac{\partial \boldsymbol{b}(\boldsymbol{x})}{\partial x_1} \\ \vdots \\ \dfrac{\partial \boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x})}{\partial x_n}\boldsymbol{b}(\boldsymbol{x})+\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x})\dfrac{\partial \boldsymbol{b}(\boldsymbol{x})}{\partial x_n} \end{bmatrix} \\
&= \frac{\partial \boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}}\boldsymbol{b}(\boldsymbol{x})+\frac{\partial \boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}}\boldsymbol{a}(\boldsymbol{x})
\end{aligned}$$

由此性质可得，若 $\boldsymbol{\lambda}$ 是 m 维常向量，$\boldsymbol{a}$ 为 m 维函数向量，则

$$\frac{\partial(\boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{a})}{\partial \boldsymbol{x}}=\frac{\partial \boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}}{\partial \boldsymbol{x}}\boldsymbol{\lambda}$$

例 2.1 已知 $\boldsymbol{x}$ 为 n 维列向量，$\boldsymbol{A}$ 为 $n\times m$ 常数矩阵，试求$\dfrac{\partial \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}}{\partial \boldsymbol{x}}$。

解

$$\boldsymbol{A}=[a_1 \quad \cdots \quad a_m]$$

则

$$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}=[\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}a_1 \quad \cdots \quad \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}a_m]$$

又

$$\frac{\partial \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}a_i}{\partial \boldsymbol{x}}=\frac{\partial \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}}{\partial \boldsymbol{x}}a_i+\frac{\partial a_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}}{\partial \boldsymbol{x}}=a_i$$

所以

$$\frac{\partial \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}}{\partial \boldsymbol{x}}=\boldsymbol{A}$$

利用$\dfrac{\partial \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}}{\partial \boldsymbol{x}}=\boldsymbol{A}$，若 $\boldsymbol{B}$ 为 $m\times n$ 常数矩阵，可得

$$\frac{\partial(\boldsymbol{B}\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}}=\left(\frac{\partial(\boldsymbol{B}\boldsymbol{x})^{\mathrm{T}}}{\partial \boldsymbol{x}}\right)^{\mathrm{T}}=(\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}})^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{B}$$

定义 2.2 设 $F(\boldsymbol{x})$是 n 维变量 $\boldsymbol{x}$ 的 $m\times l$ 维函数阵，则

$$\frac{\partial F(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}}=\begin{bmatrix}\dfrac{\partial F}{\partial x_1}\\ \vdots\\ \dfrac{\partial F}{\partial x_n}\end{bmatrix}_{nm\times l},\quad \frac{\partial F(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}}=\begin{bmatrix}\dfrac{\partial F}{\partial x_1} & \cdots & \dfrac{\partial F}{\partial x_n}\end{bmatrix}_{m\times nl}$$

注意：向量的乘法性质 2.1 对矩阵一般不成立。

定义 2.3　设 $f(\boldsymbol{X})$是矩阵变量 $\boldsymbol{X}$ 的数量函数，$\boldsymbol{X}=(x_{ij})_{n\times m}$为 $n\times m$ 阵，则

$$\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{X}}=\begin{bmatrix}\dfrac{\partial f}{\partial x_{11}} & \cdots & \dfrac{\partial f}{\partial x_{1m}}\\ \cdots & \cdots & \cdots\\ \dfrac{\partial f}{\partial x_{n1}} & \cdots & \dfrac{\partial f}{\partial x_{nm}}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\dfrac{\partial f}{\partial x_{ij}}\end{bmatrix}_{n\times m}$$

定义 2.4　设 $z(\boldsymbol{X})$是矩阵变量 $\boldsymbol{X}$ 的 l 维函数向量，而 $\boldsymbol{X}$ 是 $n\times m$ 阵，则

$$\frac{\partial z(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}}=\begin{bmatrix}\dfrac{\partial z}{\partial x_{11}} & \cdots & \dfrac{\partial z}{\partial x_{1m}}\\ \cdots & \cdots & \cdots\\ \dfrac{\partial z}{\partial x_{n1}} & \cdots & \dfrac{\partial z}{\partial x_{nm}}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\dfrac{\partial z}{\partial x_{ij}}\end{bmatrix}_{nl\times m}$$

其中$\dfrac{\partial z}{\partial x_{ij}}=\begin{bmatrix}\dfrac{\partial z_1}{\partial x_{ij}} & \cdots & \dfrac{\partial z_l}{\partial x_{ij}}\end{bmatrix}^{\mathrm{T}}$。

定义 2.5　设 $F(\boldsymbol{X})$是 $l\times p$ 矩阵变量 $\boldsymbol{X}$ 的 $n\times m$ 函数矩阵，则

$$\frac{\partial F(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}}=\begin{bmatrix}\dfrac{\partial F(\boldsymbol{X})}{\partial x_{11}} & \cdots & \dfrac{\partial F(\boldsymbol{X})}{\partial x_{1m}}\\ \cdots & \cdots & \cdots\\ \dfrac{\partial F(\boldsymbol{X})}{\partial x_{n1}} & \cdots & \dfrac{\partial F(\boldsymbol{X})}{\partial x_{nm}}\end{bmatrix}_{nl\times pm}$$

其中$\dfrac{\partial F}{\partial x_{ij}}=\begin{bmatrix}\dfrac{\partial f_{11}}{\partial x_{ij}} & \cdots & \dfrac{\partial f_{1p}}{\partial x_{ij}}\\ \cdots & \cdots & \cdots\\ \dfrac{\partial f_{l1}}{\partial x_{ij}} & \cdots & \dfrac{\partial f_{lp}}{\partial x_{ij}}\end{bmatrix}_{l\times p}$。

记$\nabla_{\boldsymbol{X}}=\begin{bmatrix}\dfrac{\partial}{\partial x_{ij}}\end{bmatrix}_{n\times m}$，则

$$\frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{X}}=\nabla_{\boldsymbol{X}}\otimes F(\boldsymbol{X})$$

这里$\otimes$表示 Kronecker 乘积，若 $\boldsymbol{A}\in\mathbf{R}^{m\times n}$，$\boldsymbol{B}\in\mathbf{R}^{l\times p}$，则

$$\boldsymbol{A} \otimes \boldsymbol{B} = \begin{bmatrix} a_{11}\boldsymbol{B} & \cdots & a_{1n}\boldsymbol{B} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{m1}\boldsymbol{B} & \cdots & a_{mn}\boldsymbol{B} \end{bmatrix}_{ml \times np}$$

矩阵积的求导法则如下：

性质 2.2 设 $\boldsymbol{A}$ 是 $l\times p$ 矩阵，$\boldsymbol{C}$ 为 $l\times r$ 矩阵，$\boldsymbol{D}$ 为 $r\times p$ 矩阵，$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{CD}$ 且 $\boldsymbol{C}$、$\boldsymbol{D}$ 均对矩阵变量 $\boldsymbol{X}$ 可微，$\boldsymbol{X}$ 为 $n\times m$ 矩阵变量，则

$$\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial \boldsymbol{X}} = \frac{\partial (\boldsymbol{CD})}{\partial \boldsymbol{X}} = \frac{\partial \boldsymbol{C}}{\partial \boldsymbol{X}}(\boldsymbol{I}_m \otimes \boldsymbol{D}) + (\boldsymbol{I}_n \otimes \boldsymbol{C})\frac{\partial \boldsymbol{D}}{\partial \boldsymbol{X}}$$

证明 因为

$$\begin{aligned}
\frac{\partial (\boldsymbol{CD})}{\partial \boldsymbol{X}} &= \left[\frac{\partial (\boldsymbol{CD})}{\partial x_{ij}}\right]_{n\times m} \\
&= \begin{bmatrix} \dfrac{\partial \boldsymbol{C}}{\partial x_{11}}\boldsymbol{D} & \cdots & \dfrac{\partial \boldsymbol{C}}{\partial x_{1m}}\boldsymbol{D} \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ \dfrac{\partial \boldsymbol{C}}{\partial x_{n1}}\boldsymbol{D} & \cdots & \dfrac{\partial \boldsymbol{C}}{\partial x_{nm}}\boldsymbol{D} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \boldsymbol{C}\dfrac{\partial \boldsymbol{D}}{\partial x_{11}} & \cdots & \boldsymbol{C}\dfrac{\partial \boldsymbol{D}}{\partial x_{1m}} \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ \boldsymbol{C}\dfrac{\partial \boldsymbol{D}}{\partial x_{n1}} & \cdots & \boldsymbol{C}\dfrac{\partial \boldsymbol{D}}{\partial x_{nm}} \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} \dfrac{\partial \boldsymbol{C}}{\partial x_{11}} & \cdots & \dfrac{\partial \boldsymbol{C}}{\partial x_{1m}} \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ \dfrac{\partial \boldsymbol{C}}{\partial x_{n1}} & \cdots & \dfrac{\partial \boldsymbol{C}}{\partial x_{nm}} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{D} & & \\ & \ddots & \\ & & \boldsymbol{D} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \boldsymbol{C} & & \\ & \ddots & \\ & & \boldsymbol{C} \end{pmatrix} \begin{bmatrix} \dfrac{\partial \boldsymbol{D}}{\partial x_{11}} & \cdots & \dfrac{\partial \boldsymbol{D}}{\partial x_{1m}} \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ \dfrac{\partial \boldsymbol{D}}{\partial x_{n1}} & \cdots & \dfrac{\partial \boldsymbol{D}}{\partial x_{nm}} \end{bmatrix}
\end{aligned}$$

所以

$$\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial \boldsymbol{X}} = \frac{\partial (\boldsymbol{CD})}{\partial \boldsymbol{X}} = \frac{\partial \boldsymbol{C}}{\partial \boldsymbol{X}}(\boldsymbol{I}_m \otimes \boldsymbol{D}) + (\boldsymbol{I}_n \otimes \boldsymbol{C})\frac{\partial \boldsymbol{D}}{\partial \boldsymbol{X}}$$

例 2.2 设 $\boldsymbol{x}\in\mathbf{R}^n$，$\boldsymbol{y}\in\mathbf{R}^m$，$\boldsymbol{A}$ 是 $n\times m$ 阵，求导数$\dfrac{\partial \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{y}}{\partial \boldsymbol{A}}$。

解 因为

$$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{y} = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m} a_{ij}x_i y_j$$

所以

$$\frac{\partial \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{y}}{\partial a_{ij}} = x_i y_j$$

所以

$$\frac{\partial \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{y}}{\partial \boldsymbol{A}} = \left[\frac{\partial \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{y}}{\partial a_{ij}}\right]_{n\times m} = [x_i y_j]_{n\times m} = \boldsymbol{x}\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}$$

例 2.3 求证$\dfrac{\partial}{\partial \boldsymbol{X}}\det\boldsymbol{X}=(\boldsymbol{X}^{-1})^{\mathrm{T}}\det\boldsymbol{X}$。