21 Surfaces and Positive Definiteness

曲面和正定性

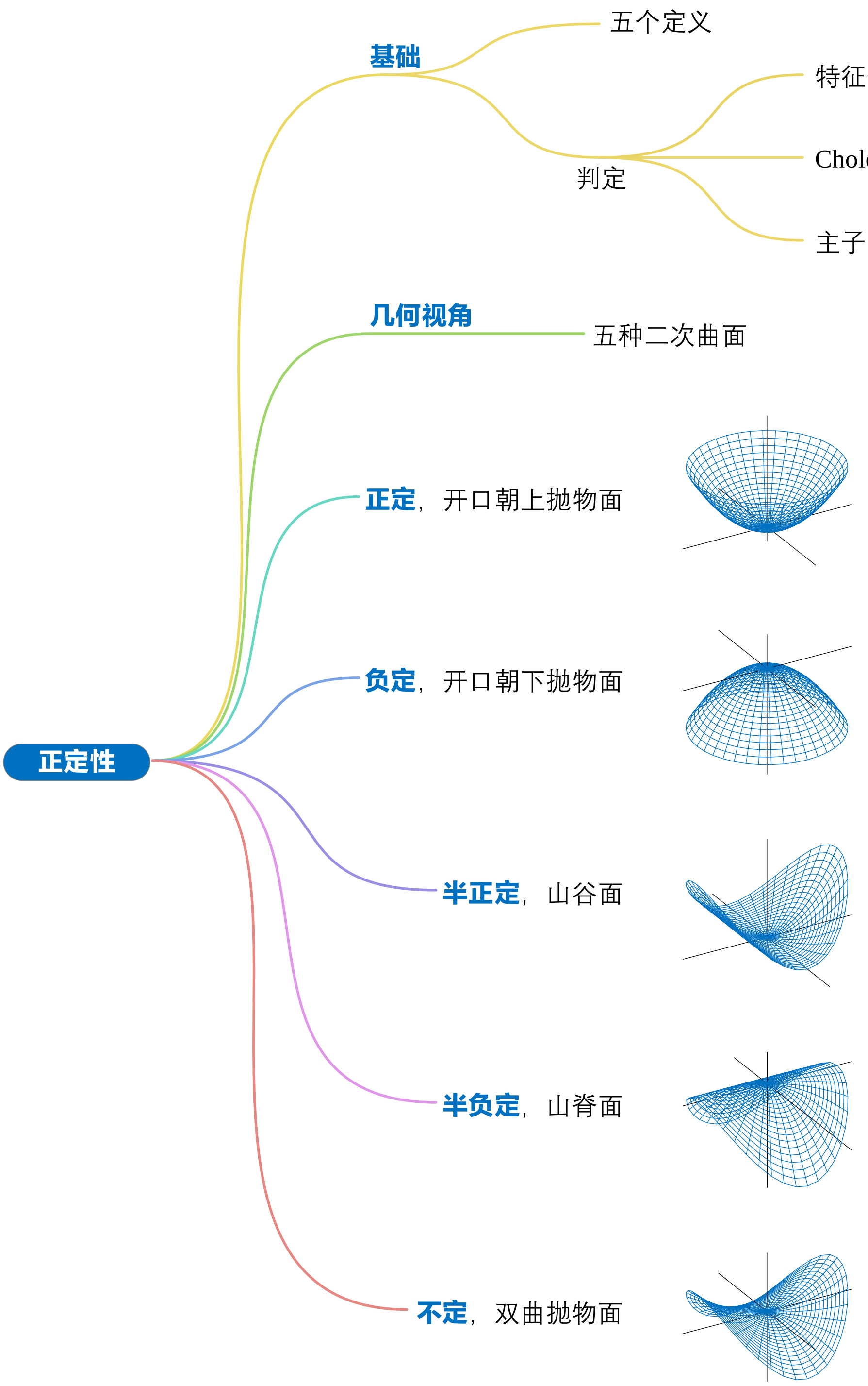
代数、微积分、几何、线性代数的结合体

神，几何化一切。

God ever geometrizes.

—— 柏拉图 (Plato) | 古希腊哲学家 | 424/423 ~ 348/347 BC

- matplotlib.pyplot.contour() 绘制等高线线图
- matplotlib.pyplot.contourf() 绘制填充等高线图
- matplotlib.pyplot.scatter() 绘制散点图
- numpy.arange() 在指定区间内返回均匀间隔数组
- numpy.array() 创建 array 数据类型
- numpy.cos() 余弦函数
- numpy.linalg.cholesky() Cholesky 分解函数
- numpy.linspace() 产生连续均匀间隔数组
- numpy.meshgrid() 生成网格化数据
- numpy.multiply() 向量或矩阵逐项乘积
- numpy.roots() 多项式求根
- numpy.sin() 正弦函数
- numpy.sqrt() 计算平方根
- sympy.abc import x 定义符号变量 x
- sympy.diff() 求解符号导数和偏导解析式
- sympy.Eq() 定义符号等式
- sympy.evalf() 将符号解析式中未知量替换为具体数值
- sympy.plot_implicit() 绘制隐函数方程
- sympy.symbols() 定义符号变量


正定性
基础
五个定义
判定
特征值
Cholesky分解
主子式
几何视角
五种二次曲面
正定，开口朝上抛物面
负定，开口朝下抛物面
半正定，山谷面
半负定，山脊面
不定，双曲抛物面

21.1 正定性

正定性 (positive definiteness) 是优化问题经常出现线性代数概念。本章结合**二次曲面** (quadratic surface)，和大家聊一聊正定性及其应用。

五个定义

矩阵正定性分为如下五种情况。

当 $\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}$ ($\boldsymbol{x}$ 为非零列向量) 时，如果满足：

$$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{A} \boldsymbol{x} > 0 \tag{1}$$

矩阵 $\boldsymbol{A}$ 为**正定矩阵** (positive definite matrix)。

当 $\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}$ 时，

$$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{A} \boldsymbol{x} \geq 0 \tag{2}$$

矩阵 $\boldsymbol{A}$ 为**半正定矩阵** (positive semi-definite matrix)。

当 $\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}$ 时，

$$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{A} \boldsymbol{x} < 0 \tag{3}$$

矩阵 $\boldsymbol{A}$ 为**负定矩阵** (negative definite matrix)。

当 $\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}$ 时，

$$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{A} \boldsymbol{x} \leq 0 \tag{4}$$

矩阵 $\boldsymbol{A}$ 为**半负定矩阵** (negative semi-definite matrix)。

矩阵 $\boldsymbol{A}$ 不属于以上任何一种情况，$\boldsymbol{A}$ 为**不定矩阵** (indefinite matrix)。

判定正定矩阵

判断矩阵是否为正定矩阵，本书主要采用如下两种方法：

◀ 若矩阵为对称矩阵，并且所有特征值为正，则矩阵为正定矩阵；

◀ 若矩阵可以进行 Cholesky 分解，则矩阵为正定矩阵。

Bk4_Ch21_01.py 介绍如何使用 Cholesky 分解判定矩阵是否为正定矩阵。

Cholesky 分解

如果矩阵 $\boldsymbol{A}$ 为正定矩阵，对 $\boldsymbol{A}$ 进行 Cholesky 分解，得到：

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{R}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R} \tag{5}$$

利用 (5)，将 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ 写成如下形式：

$$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R}\boldsymbol{x} = \left(\boldsymbol{R}\boldsymbol{x}\right)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R}\boldsymbol{x} = \left\|\boldsymbol{R}\boldsymbol{x}\right\|^{2} \tag{6}$$

$\boldsymbol{R}$ 中列向量线性无关，若 $\boldsymbol{x}$ 为非零向量，则 $\boldsymbol{R}\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}$，因此 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} > 0$。

特征值分解

对称矩阵 $\boldsymbol{A}$ 进行特征值分解得到：

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}} \tag{7}$$

将 (7) 代入 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$，得到：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} &= \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} \\ &= \Big(\underbrace{\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}}_{\boldsymbol{z}}\Big)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Lambda}\Big(\underbrace{\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}}_{\boldsymbol{z}}\Big)\end{aligned} \tag{8}$$

令：

$$\boldsymbol{z} = \boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} \tag{9}$$

(8) 可以写成：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} &= \boldsymbol{z}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{z} \\ &= \lambda_1 z_1^2 + \lambda_2 z_2^2 + \cdots + \lambda_D z_D^2 = \sum_{j=1}^{D}\lambda_j z_j^2\end{aligned} \tag{10}$$

当上式中特征值均为正数，除非 z_1、z_2 … z_D 均为 0 (即 $\boldsymbol{z}$ 为零向量)，否则上式大于 0。

若 $\boldsymbol{A}$ 的特征值均为负值，则矩阵 $\boldsymbol{A}$ 为负定矩阵。若矩阵 $\boldsymbol{A}$ 特征值为正值或 0，$\boldsymbol{A}$ 为半正定矩阵。若矩阵特征值为负值或 0，则矩阵 $\boldsymbol{A}$ 为半负定矩阵。

格拉姆矩阵

给定数据矩阵 $\boldsymbol{X}$，它的格拉姆矩阵为 $\boldsymbol{G} = \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$。格拉姆矩阵至少都是半正定矩阵。

将 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}\boldsymbol{x}$ 写成如下形式：

$$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\boldsymbol{x} = \left\|\boldsymbol{X}\boldsymbol{x}\right\|^{2} \geq 0 \tag{11}$$

特别地，当 $\boldsymbol{X}$ 满秩时，$\boldsymbol{x}$ 为非零向量，则 $\boldsymbol{X}\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}$，因此 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}\boldsymbol{x} > 0$。也就是说，当 $\boldsymbol{X}$ 满秩，格拉姆矩阵 $\boldsymbol{G} = \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$ 为正定矩阵。

这一节介绍了正定性相关性质，但是想要直观理解这个概念，还需要借助几何视角。

21.2 几何视角看正定性

给定如下 2 × 2 对称矩阵 $\boldsymbol{A}$：

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} a & b \\ b & c \end{bmatrix} \tag{12}$$

构造如下二元函数 $y = f(x_1, x_2)$：

$$y = f\left(x_1, x_2\right) = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a & b \\ b & c \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = ax_1^2 + 2bx_1x_2 + cx_2^2 \tag{13}$$

在三维正交空间中，当矩阵 $\boldsymbol{A}_{2\times 2}$ 正定性不同时，$y = f(x_1, x_2)$ 对应曲面展现出不同的形状：

◀ 当 $\boldsymbol{A}_{2\times 2}$ 为正定矩阵时，$y = f(x_1, x_2)$ 为开口向上抛物面；

◀ 当 $\boldsymbol{A}_{2\times 2}$ 为半正定矩阵时，$y = f(x_1, x_2)$ 为山谷面；

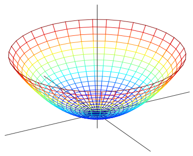
◀ 当 $\boldsymbol{A}_{2\times 2}$ 为负定矩阵时，$y = f(x_1, x_2)$ 为开口向下抛物面；

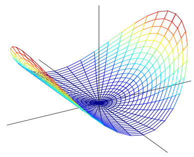
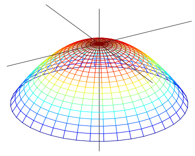
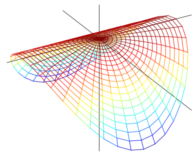
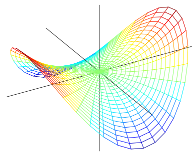
◀ 当 $\boldsymbol{A}_{2\times 2}$ 为半负定矩阵时，$y = f(x_1, x_2)$ 为山脊面；

◀ 当 $\boldsymbol{A}_{2\times 2}$ 不定时，$y = f(x_1, x_2)$ 为马鞍面，也叫做双曲抛物面。

表 1 总结了矩阵 $\boldsymbol{A}$ 不同正定性条件下对应的曲面形状。本章以下六节就按表中形状顺序展开。

表 1. 正定性的几何意义

$\boldsymbol{A}_{D\times D}$	特征值	形状
$\boldsymbol{A}_{D\times D}$ 为正定矩阵 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} > 0, \boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}$	D 个特征值均为正值	

$A_{D\times D}$ 为半正定矩阵，秩为 r $x^{\mathrm{T}}Ax \geq 0, x \neq 0$	r 个正特征值，$D-r$ 个特征值为 0	
$A_{D\times D}$ 为负定矩阵 $x^{\mathrm{T}}Ax < 0$	D 个特征值均为负值	
$A_{D\times D}$ 为半负定矩阵，秩为 r $x^{\mathrm{T}}Ax \leq 0$	r 个负特征值，$D-r$ 个特征值为 0	
$A_{D\times D}$ 为不定矩阵	特征值符号正负不定	

21.3 开口朝上抛物面：正定

正圆

先来看一个单位矩阵的例子。若矩阵 A 为 2 × 2 单位矩阵：

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \tag{14}$$

单位矩阵显然是正定矩阵。构造如下二元函数 $y = f(x_1, x_2)$：

$$y = f(x_1, x_2) = x^{\mathrm{T}}Ax = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = x_1^2 + x_2^2 \tag{15}$$

观察上式，容易发现只有当 $x_1 = 0$ 且 $x_2 = 0$ 时，即 $x = 0$，$y = f(x_1, x_2) = 0$。

容易求得 A 特征值分别为 $\lambda_1 = 1$ 和 $\lambda_2 = 1$，对应特征向量分别为：

$$v_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad v_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \tag{16}$$

计算矩阵 A 的秩，$\mathrm{rank}(A) = 2$。

图 1 (a) 所示为 $y = f(x_1, x_2)$ 曲面。在该曲面边缘 A、B 和 C 放置小球，小球都会朝着曲面最低点滚动。

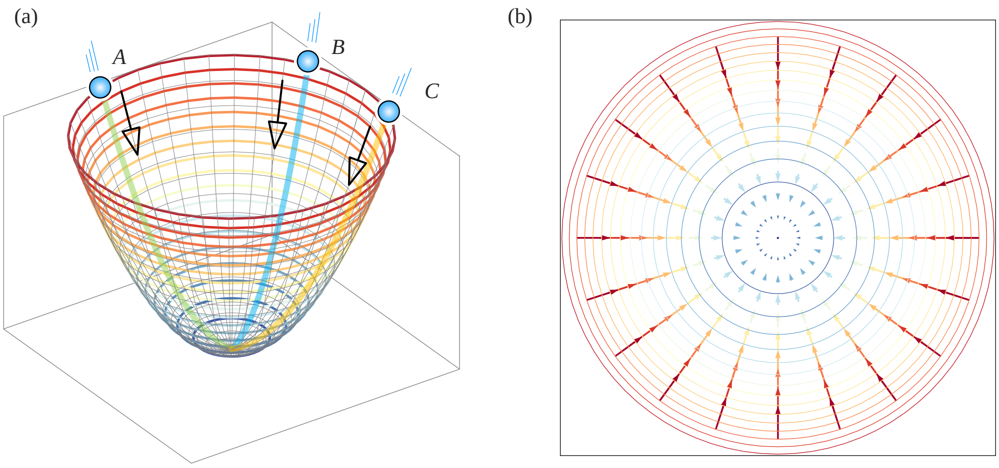


图 1. 正定矩阵曲面和梯度下降，正圆抛物面

(15) 的梯度向量为：

$$\nabla f\left(\boldsymbol{x}\right)=\begin{bmatrix}2x_1\\2x_2\end{bmatrix} \tag{17}$$

而 (15) 的梯度下降向量就是上式中梯度向量反向：

$$-\nabla f\left(\boldsymbol{x}\right)=\begin{bmatrix}-2x_1\\-2x_2\end{bmatrix} \tag{18}$$

图 1 (b) 展示 $f(x_1, x_2)$ 平面等高线为正圆。图 1 (b) 还给出不同位置的梯度下降向量，即指向下山方向，梯度向量的反方向。在本章中，除了最后一节外，平面等高线中的向量场都是梯度下降向量。

如图 1 (b) 所示，梯度下降向量均指向最小值点。此外，梯度下降向量方向垂直所在等高线。梯度下降向量的长度代表坡度的陡峭程度。向量长度越大，坡度越陡，该方向上函数值变化率越大。当梯度下降向量的长度为 0 时，对应驻点。

梯度下降向量为零向量 $\boldsymbol{0}$ 的点，就是 $y = f(x_1, x_2)$ 两个偏导均为 0 的点。本系列丛书《数学要素》介绍过，(0, 0) 这个点被称作驻点。通过图 1，很容易判断 (0, 0) 就是二元函数最小值点。

⚠ 再次强调，图 1 给出的是梯度下降向量 (下山方向)，方向和梯度向量 (上山方向) 正好相反。沿着梯度下降向量方向移动，函数值减小；沿着梯度向量方向移动，函数值增大。

正椭圆

再看一个 2×2 正定矩阵例子。矩阵 $\boldsymbol{A}$ 具体值如下:

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 2\end{bmatrix} \tag{19}$$

同样，构造二元函数 $y = f(x_1, x_2)$，具体如下:

$$y=f\left(x_1,x_2\right)=\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\begin{bmatrix}x_1 & x_2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\end{bmatrix}=x_1^2+2x_2^2 \tag{20}$$

同样，只有 $x_1 = 0$ 且 $x_2 = 0$ 时，$y = f(x_1, x_2) = 0$。图 2 所示为 (20) 对应开口向上正椭圆抛物面，函数等高线为一系列正椭圆。

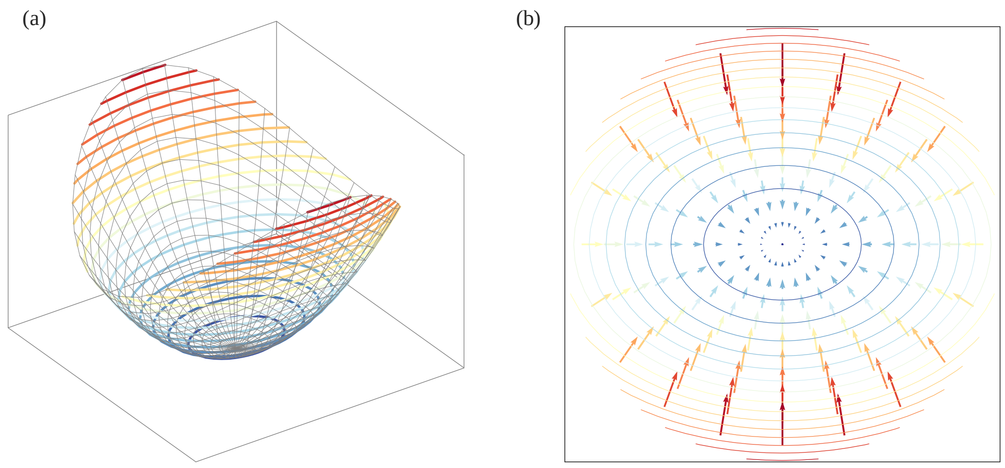


图 2. 正定矩阵曲面和梯度下降，正椭圆抛物面

容易求得 $\boldsymbol{A}$ 特征值分别为 $\lambda_1 = 1$ 和 $\lambda_2 = 2$，对应特征向量分别为:

$$\boldsymbol{v}_1=\begin{bmatrix}1\\ 0\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{v}_2=\begin{bmatrix}0\\ 1\end{bmatrix} \tag{21}$$

(15) 的梯度向量为:

$$\nabla f\left(\boldsymbol{x}\right)=\begin{bmatrix}\dfrac{\partial f}{\partial x_1}\\ \dfrac{\partial f}{\partial x_2}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}2x_1\\ 4x_2\end{bmatrix} \tag{22}$$

梯度向量为 $\boldsymbol{0}$ 的点 (0, 0) 是 (20) 函数的最小值点。

旋转椭圆

本节前两个例子对应的曲面的等高线分别是正圆和正椭圆，下面再看一个旋转椭圆情况。$\boldsymbol{A}$ 矩阵具体如下：

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1.5 & 0.5\\0.5 & 1.5\end{bmatrix} \tag{23}$$

构造函数 $y = f(x_1, x_2)$：

$$y=f\left(x_1,x_2\right)=\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\begin{bmatrix}x_1 & x_2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1.5 & 0.5\\0.5 & 1.5\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\x_2\end{bmatrix}=1.5x_1^2+x_1x_2+1.5x_2^2 \tag{24}$$

同样，只有当 $x_1 = 0$ 且 $x_2 = 0$ 时，$y = f(x_1, x_2) = 0$。

经过计算得到 $\boldsymbol{A}$ 特征值也是 $\lambda_1 = 1$ 和 $\lambda_2 = 2$；这两个特征值对应特征向量分别为：

$$\boldsymbol{v}_1=\begin{bmatrix}-\dfrac{\sqrt{2}}{2}\\\dfrac{\sqrt{2}}{2}\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{v}_2=\begin{bmatrix}\dfrac{\sqrt{2}}{2}\\\dfrac{\sqrt{2}}{2}\end{bmatrix} \tag{25}$$

(24) 梯度向量为：

$$\nabla f\left(\boldsymbol{x}\right)=\begin{bmatrix}\dfrac{\partial f}{\partial x_1}\\\dfrac{\partial f}{\partial x_2}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}3x_1+x_2\\x_1+3x_2\end{bmatrix} \tag{26}$$

$y = f(x_1, x_2)$ 曲面对应图像如图 3。图 2 和图 3 两个椭圆唯一的差别就是旋转角度。根据前文所学，我们知道这两组椭圆的半长轴和半短轴的比例关系为 $\sqrt{\lambda_2}/\sqrt{\lambda_1}$，即 $\sqrt{2}/1$。

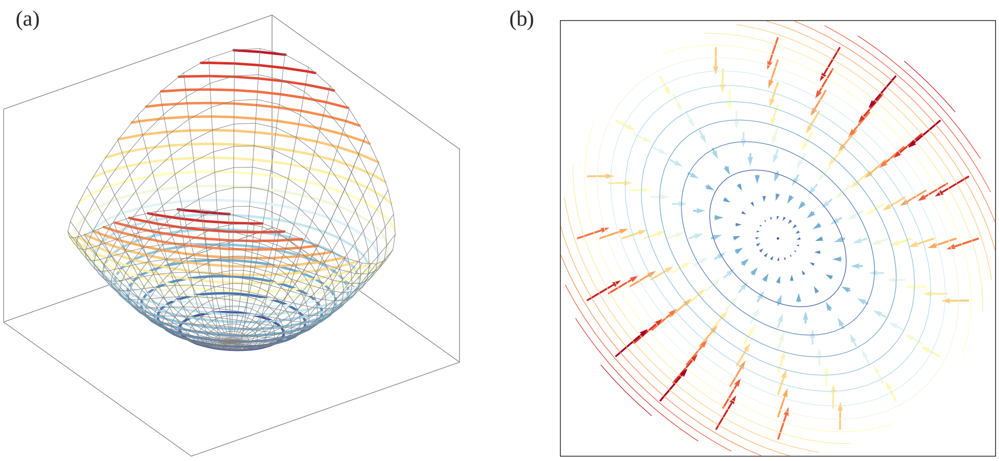


图 3. 正定矩阵曲面和梯度下降，开口向上旋转椭圆抛物面

Bk4_Ch21_02.py 绘制图 1、图 2、图 3，此外请大家修改代码并绘制本章其他图像。

21.4 山谷面：半正定

下面来聊一聊半正定矩阵情况。举个例子，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 取值如下：

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 0\end{bmatrix} \tag{27}$$

容易判定 rank($\boldsymbol{A}$) = 1。构造如下二元函数 $y = f(x_1, x_2)$：

$$y=f\left(x_1,x_2\right)=\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\begin{bmatrix}x_1 & x_2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\end{bmatrix}=x_1^2 \tag{28}$$

$x_1 = 0$ 时，不管 x_2 取任何值，上式为 0。

图 4 展示 $y = f(x_1, x_2)$ 对应曲面。观察该图容易发现，除了纵轴以外任意点处放置一个小球，小球都会滚动到谷底。

(28) 梯度向量为：

$$\nabla f\left(\boldsymbol{x}\right)=\begin{bmatrix}\dfrac{\partial f}{\partial x_1}\\ \dfrac{\partial f}{\partial x_2}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}2x_1\\ 0\end{bmatrix} \tag{29}$$

谷底位置对应一条直线，这条直线上每一点处梯度向量均为 $\boldsymbol{0}$，它们都是函数 $y = f(x_1, x_2)$ 极小值。

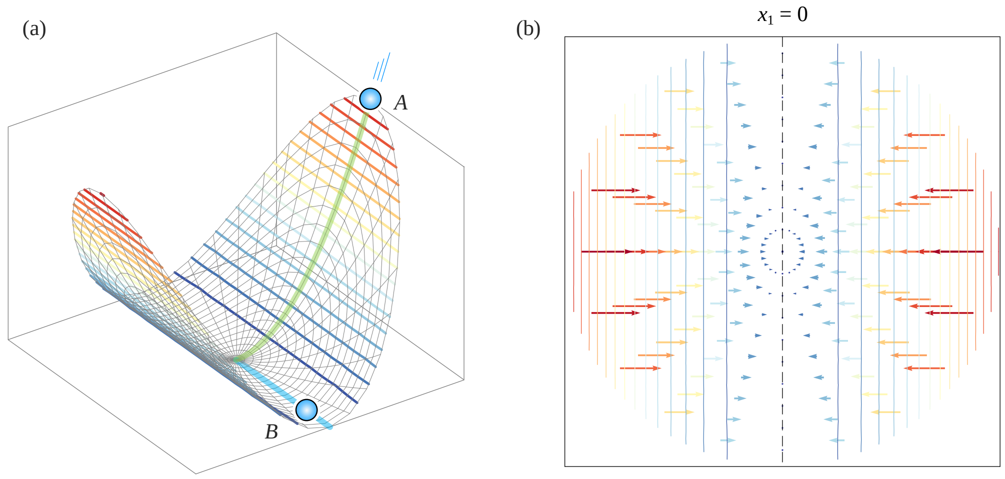


图 4. 半正定矩阵对应曲面

旋转山谷面

下式中矩阵 $\boldsymbol{A}$ 也是半正定矩阵：

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 0.5 & -0.5 \\ -0.5 & 0.5 \end{bmatrix} \tag{30}$$

构造函数 $y = f(x_1, x_2)$：

$$y = f(x_1, x_2) = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{A} \boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0.5 & -0.5 \\ -0.5 & 0.5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = 0.5x_1^2 - x_1x_2 + 0.5x_2^2 \tag{31}$$

(31) 配方得到：

$$f(x_1, x_2) = 0.5x_1^2 - x_1x_2 + 0.5x_2^2 = \frac{1}{2}(x_1 - x_2)^2 \tag{32}$$

容易发现，任何满足 $x_1 = x_2$ 的点，都会使得 $y = f(x_1, x_2)$ 为 0。

(31) 中矩阵 $\boldsymbol{A}$ 特征值为 $\lambda_1 = 0$ 和 $\lambda_2 = 1$，对应特征向量如下：

$$\boldsymbol{v}_1 = \begin{bmatrix} -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{v}_2 = \begin{bmatrix} -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix} \tag{33}$$

图 5 展示 (31) 对应的旋转山谷面。同样，小球沿图 5 中 $\boldsymbol{v}_1$ (特征值为 0 对应特征向量) 方向运动，函数值没有任何变化。这条直线上的点都是 (32) 二元函数极小值点。

(32) 梯度向量为：

$$\nabla f(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial f}{\partial x_1} \\ \dfrac{\partial f}{\partial x_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 - x_2 \\ -x_1 + x_2 \end{bmatrix} \tag{34}$$

观察图 5 (b)，容易发现梯度下降向量长度各有不同，但是它们相互平行，且都垂直于等高线，指向函数减小方向，即下山方向。

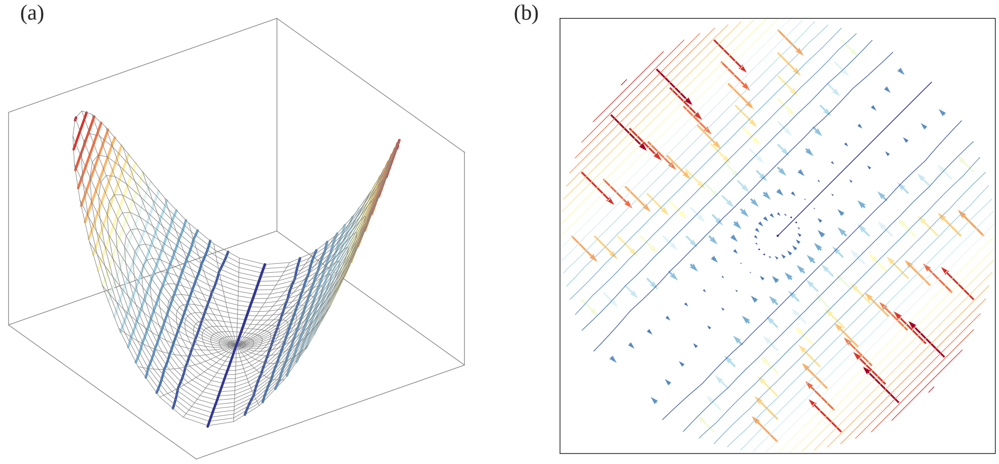


图 5. 旋转山谷面

21.5 开口朝下抛物面：负定

最简单的负定矩阵是单位矩阵取负，即$-\boldsymbol{I}$。$-\boldsymbol{I}$ 的特征值都为-1。

下面也用 2 × 2 矩阵讨论负定。如下 $\boldsymbol{A}$ 为负定矩阵：

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -2 \end{bmatrix} \tag{35}$$

构造如下二元函数 $y = f(x_1, x_2)$：

$$y = f(x_1, x_2) = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{A} \boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = -x_1^2 - 2x_2^2 \tag{36}$$

观察上式，容易发现只有当 $x_1 = 0$ 且 $x_2 = 0$ 时，$y = f(x_1, x_2) = 0$。

很容易求得 $\boldsymbol{A}$ 特征值分别为 $\lambda_1 = -2$ 和 $\lambda_2 = -1$，对应特征向量分别为：

$$\boldsymbol{v}_1 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{v}_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{37}$$

图 6 展示负定矩阵对应曲面，容易发现 $y = f(x_1, x_2)$ 对应曲面为凹面。在曲面最大值处放置一个小球，小球处于不稳定平衡状态。受到轻微扰动后，小球沿着任意方向运动，都会下落。

(36) 中 $y = f(x_1, x_2)$ 梯度向量为：

$$\nabla f(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial f}{\partial x_1} \\ \dfrac{\partial f}{\partial x_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2x_1 \\ -4x_2 \end{bmatrix} \tag{38}$$

如图 6 所示，梯度下降向量指向均背离最大值点。

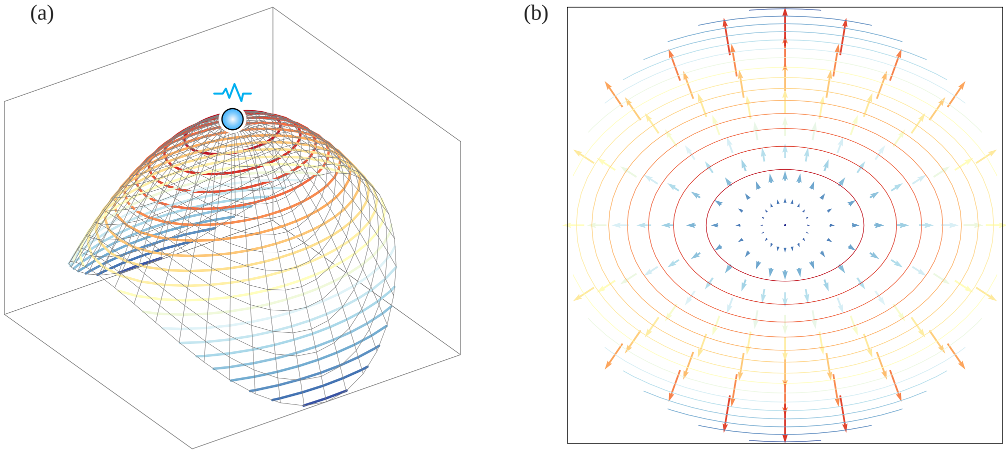


图 6. 负定矩阵对应曲面

21.6 山脊面：半负定

下面看一个半负定矩阵例子，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 取值如下：

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \tag{39}$$

构造 $y = f(x_1, x_2)$：

$$y = f(x_1, x_2) = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{A} \boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = -x_2^2 \tag{40}$$

$x_2 = 0$，x_1 为任意值，上式为 0。矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的秩为 1，$\mathrm{rank}(\boldsymbol{A}) = 1$。

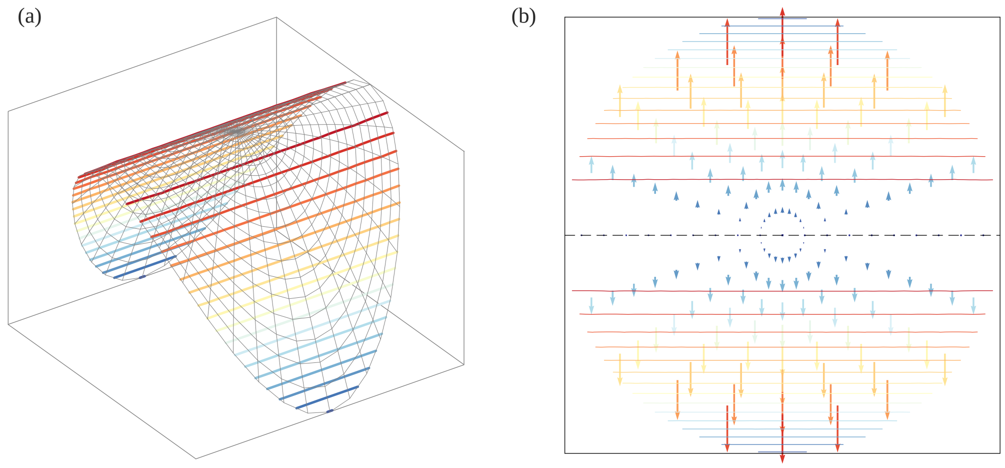


图 7. 半负定矩阵对应山脊面

图 7 展示半负定矩阵对应山脊面，发现曲面有无数个极大值。在任意极大值 (山脊) 处放置一个小球，受到扰动后，小球会沿着曲面滚下。然而，沿着山脊方向运动，函数值没有任何变化。

(40) 梯度向量为：

$$\nabla f(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial f}{\partial x_1} \\ \dfrac{\partial f}{\partial x_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ -2x_2 \end{bmatrix} \tag{41}$$

图 7 (b) 中梯度下降方向平行于纵轴，指向函数值减小方向。

21.7 双曲抛物面：不定

本节最后聊一下不定矩阵情况。举个例子，$\boldsymbol{A}$ 为：

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \tag{42}$$

构造函数 $y = f(x_1, x_2)$：

$$y = f(x_1, x_2) = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{A} \boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = x_1^2 - x_2^2 \tag{43}$$

求得矩阵 $\boldsymbol{A}$ 对应特征值为 $\lambda_1 = -1$ 和 $\lambda_2 = 1$，对应特征向量如下：

$$\boldsymbol{v}_1 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{v}_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{44}$$

图 8 展示 $y = f(x_1, x_2)$ 对应曲面。

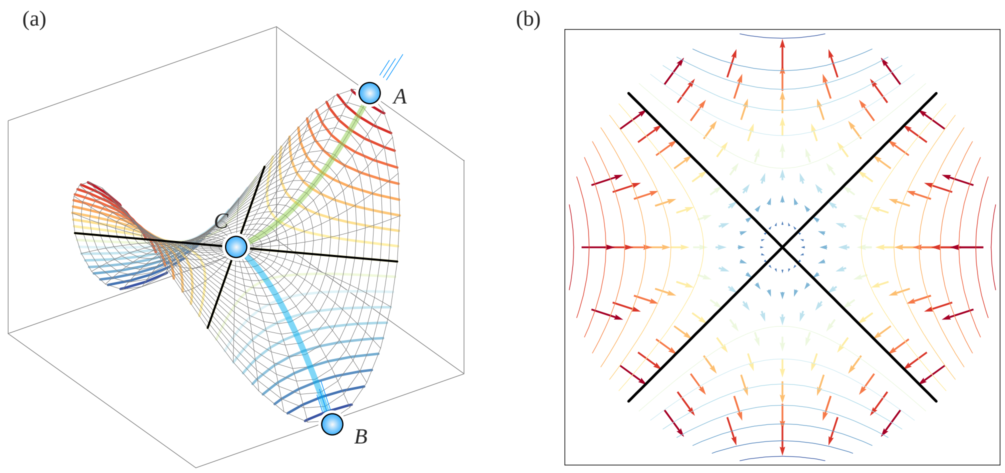


图 8. 不定矩阵对应曲面，马鞍面

当 $y \neq 0$，曲面对应等高线为双曲线。当 $y = 0$，曲面对应等高线是两条在 x_1x_2 平面内直线 (图 8 (a) 中黑色直线)，它们是双曲线渐近线。

图 8 告诉我们，曲面边缘不同位置放置小球会有完全不同运动方向。A 点处松手小球会向向着中心方向滚动，B 点处小球会朝远离中心方向滚动。

$y = f(x_1, x_2)$ 梯度向量为：

$$\nabla f(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f}{\partial x_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2x_1 \\ -2x_2 \end{bmatrix} \tag{45}$$

图 8 所示马鞍面中心 C 既不是极小值点，也不是极大值点；图 8 中马鞍面中心点被称作为**鞍点** (saddle point)。另外，沿着图 8 中黑色轨道运动，小球高度没有任何变化。

旋转双曲抛物面

图 8 中马鞍面顺时针旋转 45°得到图 9 曲面。图 9 曲面对应矩阵 $\boldsymbol{A}$ 如下：

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix} \tag{46}$$

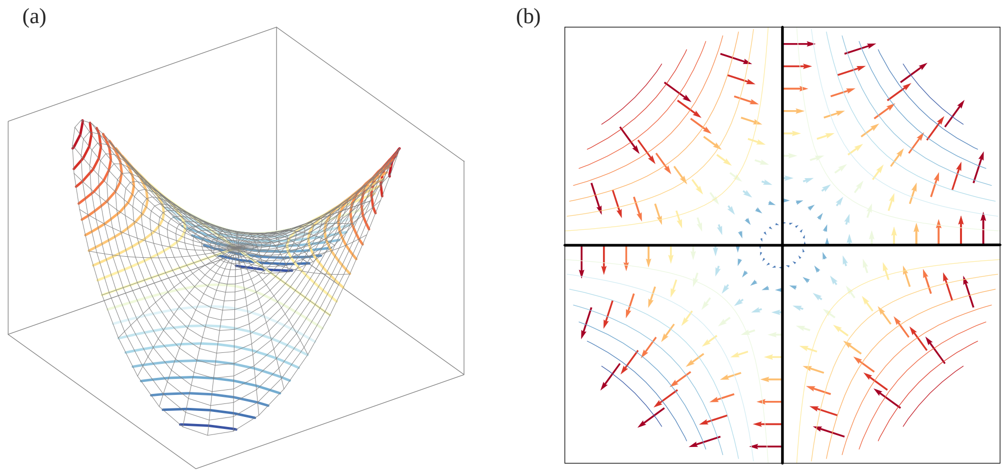


图 9. 不定矩阵对应曲面，旋转马鞍面

构造如下二元函数 $y = f(x_1, x_2)$:

$$y = f(x_1, x_2) = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{A} \boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = -2x_1x_2 \tag{47}$$

在 $y = f(x_1, x_2)$ 为非零定值时，上式相当于反比例函数。

(47) 的梯度向量为:

$$\nabla f(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial f}{\partial x_1} \\ \dfrac{\partial f}{\partial x_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2x_2 \\ -2x_1 \end{bmatrix} \tag{48}$$

请大家自行分析图 8 两幅图。

在 `Bk4_Ch21_02.py` 基础上，我们用 Streamlit 和 Plotly 制作了一个 App，可以调节参数 a、b、c 观察图像变化。App 还显示矩阵的特征值分解结果。请参考 Streamlit_Bk4_Ch21_02.py。

21.8 多极值曲面：局部正定性

判定二元函数极值点

本系列丛书在《数学要素》一册介绍过如何判定二元函数 $y = f(x_1, x_2)$ 的极值。对于 $y = f(x_1, x_2)$，一阶偏导数 $f_{x1}(x_1, x_2) = 0$ 和 $f_{x2}(x_1, x_2) = 0$ 同时成立的点 (x_1, x_2) 为二元函数 $f(x_1, x_2)$ 的驻点。如图 10 所示，驻点可以是极大值、极小值或鞍点。

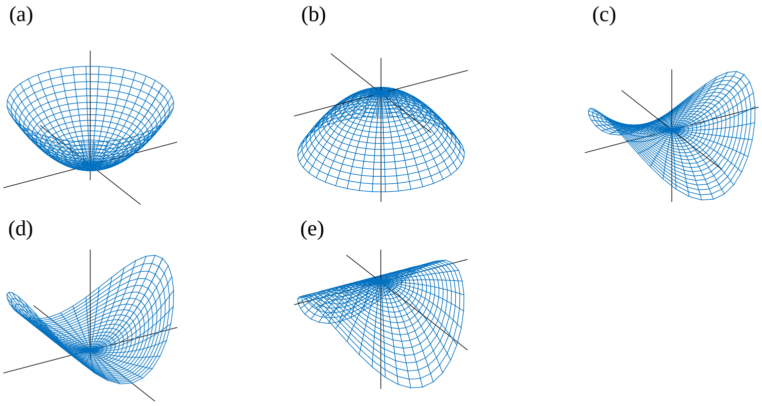


图 10. 二元函数驻点的三种情况

当时，我们聊过为了进一步判定驻点到底是极大值、极小值或是鞍点，需要知道二元函数 $f(x_1, x_2)$ 二阶偏导。如果 $f(x_1, x_2)$ 在 (a, b) 邻域内连续，且 $f(x_1, x_2)$ 二阶偏导连续。令，

$$A = f_{x1x1}, \quad B = f_{x1x2}, \quad C = f_{x2x2} \tag{49}$$

$f(a, b)$ 是否为极值点可以通过如下条件判断：

a) $AC - B^2 > 0$ 存在极值，且当 $A < 0$ 有极大值，$A > 0$ 时有极小值；

b) $AC - B^2 < 0$ 没有极值；

c) $AC - B^2 = 0$，可能有极值，也可能没有极值，需要进一步讨论。

当时我们留了一个问题，$AC - B^2$ 这个表达值的含义到底是什么？本节就来回答这个问题。

(13) 中函数的**黑塞矩阵** (Hessian matrix) 为：

$$\boldsymbol{H} = \frac{\partial^2 \left(\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{A} \boldsymbol{x}\right)}{\partial \boldsymbol{x} \partial \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}} = 2\boldsymbol{A} = 2\begin{bmatrix} a & b \\ b & c \end{bmatrix} \tag{50}$$

注意上式中 $\boldsymbol{A}$ 为对称矩阵。

$\boldsymbol{A}$ 的行列式值为：

$$|\boldsymbol{A}| = ac - b^2 \tag{51}$$

相信大家已经在上式中看到和 $AC - B^2$ 一样的形式。

对于二元函数，$\boldsymbol{A}$ 的形状为 2×2。$\boldsymbol{A}$ 为正定或负定时，$\boldsymbol{A}$ 的两个特征值同号，因此 $\boldsymbol{A}$ 的行列式值都大于 0。而 a 的正负则决定了开口方向，也就是决定了 $\boldsymbol{A}$ 是正定还是负定，因此决定了极大值或极小值。

再进一步，a 实际上是 $\boldsymbol{A}$ 的一阶主子式，即矩阵 A 的第一行、第一列元素构成矩阵的行列式值。这实际上引出了判断正定的第三个方法——$\boldsymbol{A}$ 正定的充分必要条件为 $\boldsymbol{A}$ 的顺序主子式全大于零。

举个例子

继续采用《数学要素》一书中反复出现的多极值曲面的例子。

图 11 为曲面平面等高线。图中，深绿色线代表 $f_{x1}(x_1, x_2) = 0$，深蓝色线代表 $f_{x2}(x_1, x_2) = 0$。两个颜色线交点标记为 ×。也就是说，图中 × 对应的位置为梯度向量为 $\boldsymbol{0}$。

观察图中等高线不难发现，I、II、III 点为极大值点，其中 I 为最大值点。IV、V、VI 为极小值点，其中 IV 为最小值点。VII、VIII、IX 是鞍点。

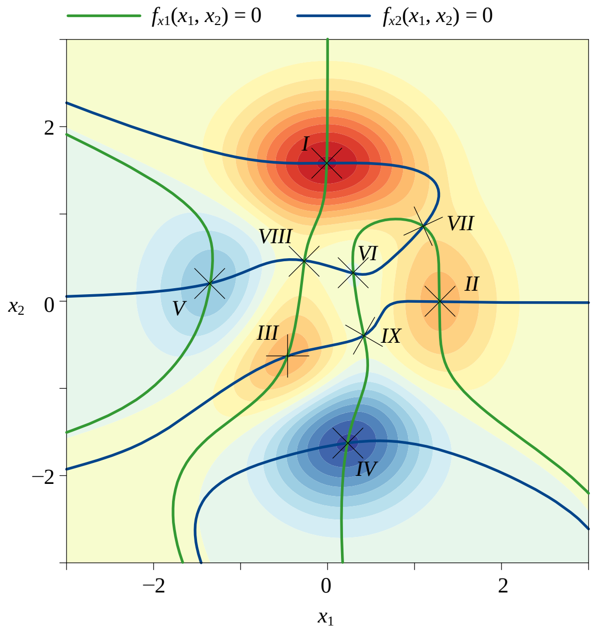


图 11. $f_{x1}(x_1, x_2) = 0$ 和 $f_{x2}(x_1, x_2) = 0$ 同时投影在 $f(x_1, x_2)$ 曲面填充等高线，来自本系列丛书《数学要素》

图 12 给出的是二元函数的梯度向量图 (和梯度下降向量方向相反)。极大值点处，梯度向量 (上山方向) 汇聚；极小值点处，梯度向量发散。这一点很好理解，在极大值点附近，朝着极大值走就是上山；相反，在极小值点附近，背离极小值走则对应上山，朝着极小值走则是下山。

而鞍点处，有些梯度向量指向鞍点，有些梯度向量背离鞍点。也就是说，鞍点处，既可以下山，也可以上山。

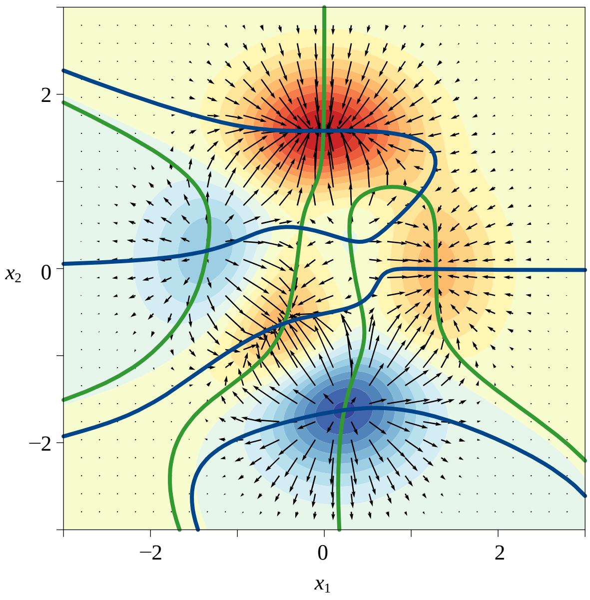


图 12. $f(x_1, x_2)$ 梯度向量图，梯度向量对应"上山"，和梯度下降 (下山) 反向

图 13 所示为二次函数黑塞矩阵行列式值对应的等高线图，阴影圈出来的六个点对应行列式值为正，因此它们是要考察的极值点。图 13 中虚线为行列式值为 0 对应位置。

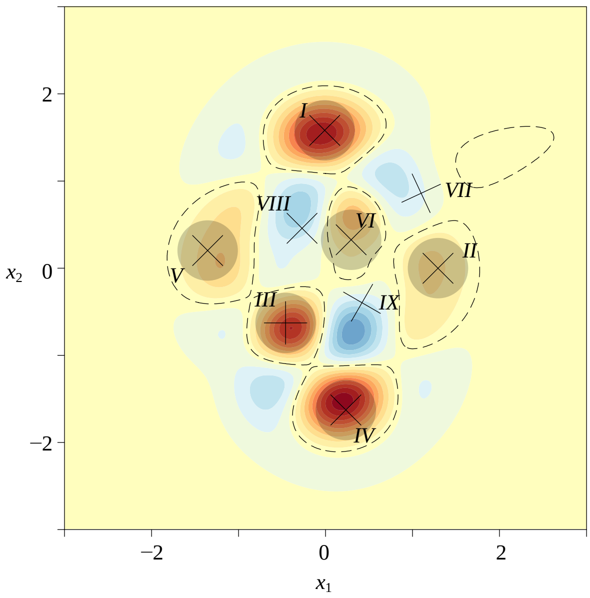


图 13. 黑塞矩阵行列式值

根据图 14 所示一阶主子式对应等高线。通过一阶主子式值的正负，即 f_{x1x1} 正负，可以进一步判定极值点为极大值或极小值点，最终得出的结论和图 11 一致。

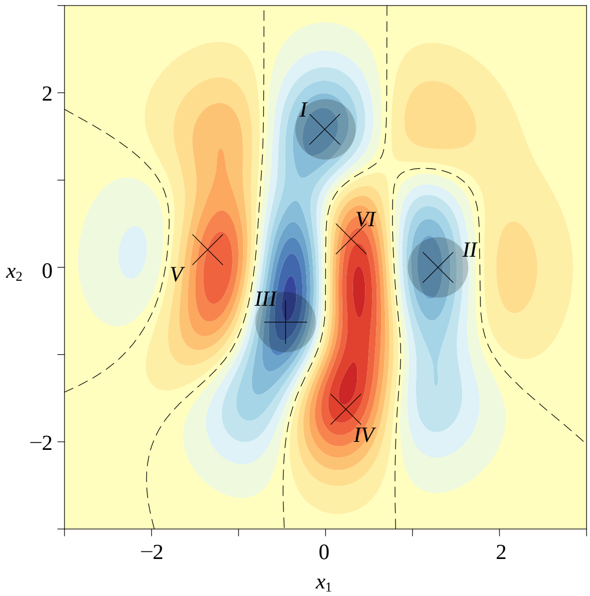


图 14. 一阶主子式正负

更一般情况

对于多元函数 $f(\boldsymbol{x})$，利用本书第 17 章介绍的二次逼近 $f(\boldsymbol{x})$ 可以写成：

$$
\begin{aligned}
f(\boldsymbol{x}) &\approx f(\boldsymbol{x}_p)+\nabla f(\boldsymbol{x}_p)^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_p)+\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_p)^{\mathrm{T}}\nabla^2 f(\boldsymbol{x}_p)(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_p) \\
&= f(\boldsymbol{x}_p)+\nabla f(\boldsymbol{x}_p)^{\mathrm{T}}\Delta\boldsymbol{x}+\frac{1}{2}\Delta\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\nabla^2 f(\boldsymbol{x}_p)\Delta\boldsymbol{x} \\
&= f(\boldsymbol{x}_p)+\nabla f(\boldsymbol{x}_p)^{\mathrm{T}}\Delta\boldsymbol{x}+\frac{1}{2}\Delta\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{H}\Delta\boldsymbol{x}
\end{aligned}
\tag{52}
$$

其中 $\boldsymbol{x}_P$ 为展开点。

假设 $\boldsymbol{x}_P$ 处存在梯度向量，且梯度向量为 $\boldsymbol{0}$。

当 $\boldsymbol{x}\to\boldsymbol{x}_P$ 时，$\nabla f(\boldsymbol{x}_p)^{\mathrm{T}}\Delta\boldsymbol{x}\to 0$。但是如果在 $\boldsymbol{x}_P$ 点处黑塞矩阵 $\boldsymbol{H}$ 为正定，$\frac{1}{2}\Delta\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{H}\Delta\boldsymbol{x}$ 为正。这意味着：

$$
f(\boldsymbol{x}_p)+\underbrace{\nabla f(\boldsymbol{x}_p)^{\mathrm{T}}\Delta\boldsymbol{x}}_{\to 0}+\underbrace{\frac{1}{2}\Delta\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{H}\Delta\boldsymbol{x}}_{+}>f(\boldsymbol{x}_p)
\tag{53}
$$

这种情况称 $\boldsymbol{x}_P$ 局部正定，对应 $\boldsymbol{x}_P$ 为极小值点。这个判断也适用于半正定情况，不过要将上式的 > 改为 ⩾。

同理，如果在 $\boldsymbol{x}_P$ 点处黑塞矩阵 $\boldsymbol{H}$ 为负定，$\frac{1}{2}\Delta\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{H}\Delta\boldsymbol{x}$ 为负，因此：

$$f(\boldsymbol{x}) = f(\boldsymbol{x}_P) + \underbrace{\nabla f(\boldsymbol{x}_P)^{\mathrm{T}} \Delta \boldsymbol{x}}_{\to 0} + \underbrace{\frac{1}{2} \Delta \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{H} \Delta \boldsymbol{x}}_{-} < f(\boldsymbol{x}_P) \tag{54}$$

我们称 $\boldsymbol{x}_P$ 局部负定，对应 $\boldsymbol{x}_P$ 为极大值点。如上判断也适用于半负定情况，同样将上式的 $<$ 改为 $\leq$。

我们用 Streamlit 和 Plotly 制作了一个 App 可视化本节多极值曲面。这个 App 采用三种可视化方案：1) 3D 曲面；2) 平面等高线 + 箭头图；3) 平面等高线 + 水流图。水流图相当于将梯度向量连起来，形似水流。注意，水流图中，水流汇聚点为极大值。大家思考应该如何修改代码，让水流汇聚点为极小值点。请参考 Streamlit_Bk4_Ch21_03.py。

本章把曲面、梯度向量、正定性、极值这几个重要的概念有机的联系起来。本章给出的各种例子告诉我们几何视角是学习线性代数的捷径。

请大家再次回顾图 15 给出的五种情况，并且将正定性、极值 (最值) 对号入座。相信大家学完本章之后，会觉得正定性变得极容易理解。

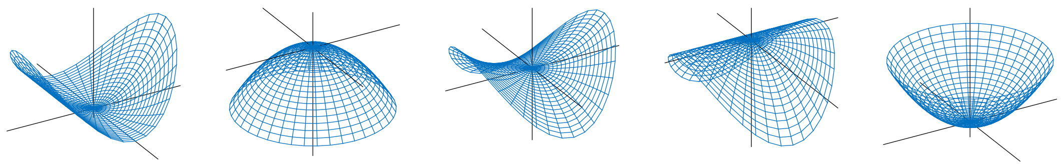


图 15. 总结本章重要内容的五副图