

13

Bivariate Functions

二元函数

从三维几何图形角度理解



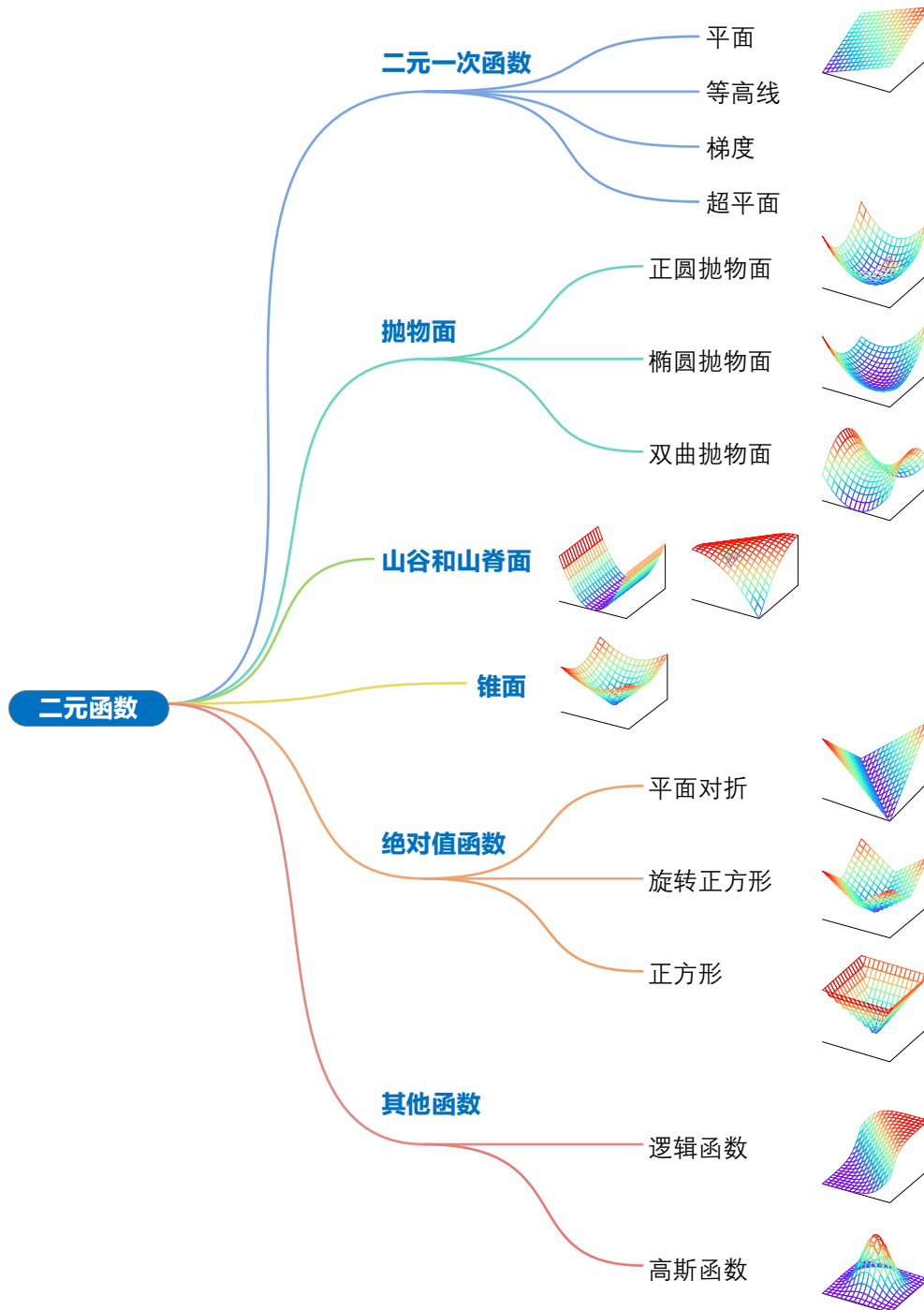
当然，我们可以使用任何需要符号。不要嘲笑符号。发明它们，它们很强大。事实上，很大程度数学就是在发明更好的符号。

We could, of course, use any notation we want; do not laugh at notations; invent them, they are powerful. In fact, mathematics is, to a large extent, invention of better notations.

—— 理查德·费曼 (Richard P. Feynman) | 美国理论物理学家 | 1918 ~ 1988



- ▶ Axes3D.plot_surface() 绘制三维曲面
- ▶ matplotlib.pyplot.contour() 绘制等高线图
- ▶ matplotlib.pyplot.contourf() 绘制填充等高线图
- ▶ numpy.linspace() 在指定的间隔内，返回固定步长的数据
- ▶ numpy.meshgrid() 生成网格数据



本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。

版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。

代码及 PDF 文件下载：<https://github.com/Visualize-ML>

本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger：<https://space.bilibili.com/513194466>

欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：jiang.visualize.ml@gmail.com

13.1 二元一次函数：平面

二元一次函数是一元一次函数的扩展，一般式如下：

$$y = f(x_1, x_2) = w_1 x_1 + w_2 x_2 + b \quad (1)$$

当 w_1 和 w_2 均为 0 时， $f(x_1, x_2) = b$ 为二元常数函数，平行于 $x_1 x_2$ 水平面。

用矩阵乘法，(1) 可以写成：

$$y = f(x_1, x_2) = \mathbf{w}^T \mathbf{x} + b \quad (2)$$

其中，

$$\mathbf{w} = \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \quad (3)$$

当 y 取一定值时，比如 $y = c$ ，平面蜕化为一条直线：

$$w_1 x_1 + w_2 x_2 + b = c \quad (4)$$

从另外一个角度， c 相当于 $f(x_1, x_2)$ 平面的某一条等高线，即 $f(x_1, x_2)$ 等高线为直线。

举个例子

图 1 所示图像对应如下解析式：

$$y = f(x_1, x_2) = x_1 + x_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \quad (5)$$

图 1 (a) 所示为 (5) 对应平面，图中黑色直线对应 $x_1 + x_2 = 0$ ，即 $x_2 = -x_1$ 。图 1 (b) 所示 $f(x_1, x_2)$ 平面等高线都平行于 $x_1 + x_2 = 0$ 。由于 $f(x_1, x_2)$ 为线性函数，因此等高线平行，且间距相同。

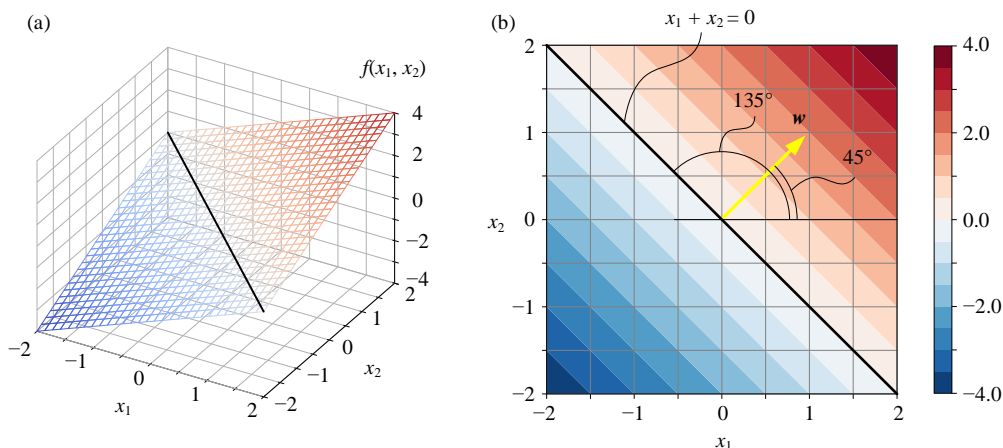


图 1. $f(x_1, x_2) = x_1 + x_2$ 网格图和等高线图

图 1 (b) 中黄色箭头为 $f(x_1, x_2)$ 增大方向，箭头和 x_1 轴正方向夹角为 45° 。有心的读者可能发现，黄色箭头对应的向量就是 w ：

$$w = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (6)$$

图 1 (b) 中， w 向量垂直于等高线并指向 $f(x_1, x_2)$ 增大方向。这并非巧合，实际上 w 向量便是**梯度向量** (gradient vector)。本书在前文讲解不等式时，提到过梯度这个概念，不过当时我们关注的是梯度的反方向，即梯度下降方向。

本系列丛书内容不断深入，大家会理解 w 的几何意义以及梯度向量这一重要概念。这里先给大家留下一个印象。

此外，相信大家已经意识到向量是个多面手，向量不仅仅是一列或一行数，还是有方向的线段。大家会在本系列丛书《矩阵力量》经常听到这句提醒——有向量的地方，就有几何！希望大家在看到向量出现时，多从几何视角思考向量的几何内涵。

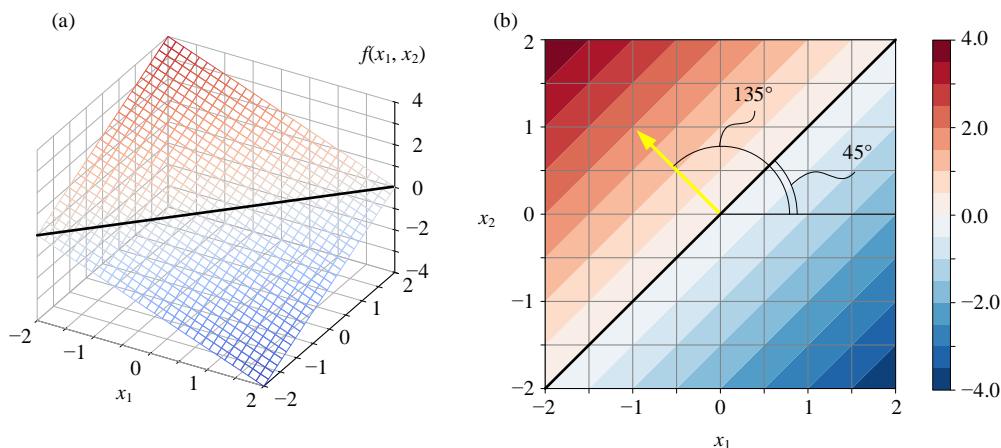
第二个例子

图 2 所示平面对应解析式如下：

$$y = f(x_1, x_2) = -x_1 + x_2 = \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \quad (7)$$

$w \quad x$

图 2 (b) 中黄箭头同样指向 $f(x_1, x_2)$ 增大方向，对应 (7) 中 w 。箭头和 x_1 轴正方向夹角为 135° 。

图 2. $f(x_1, x_2) = -x_1 + x_2$ 网格图和等高线图

等高线平行纵轴

当 $w_1 = -1$, $w_2 = 0$, $b = 0$ 时, $f(x_1, x_2)$ 平面高度仅仅受到 x_1 影响。图 3 所示图像对应如下解析式:

$$y = f(x_1, x_2) = -x_1 = \begin{bmatrix} -1 \\ 0 \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \quad (8)$$

图 3 (a) 所示平面平行于 x_2 轴, 即纵轴。图 3 (b) 所示 $f(x_1, x_2)$ 平面等高线同样平行于 x_2 轴。图 3 (b) 中, 黄色箭头为函数 $f(x_1, x_2)$ 增大方向, 箭头平行 x_1 轴朝左, 即朝向 x_1 轴负方向。

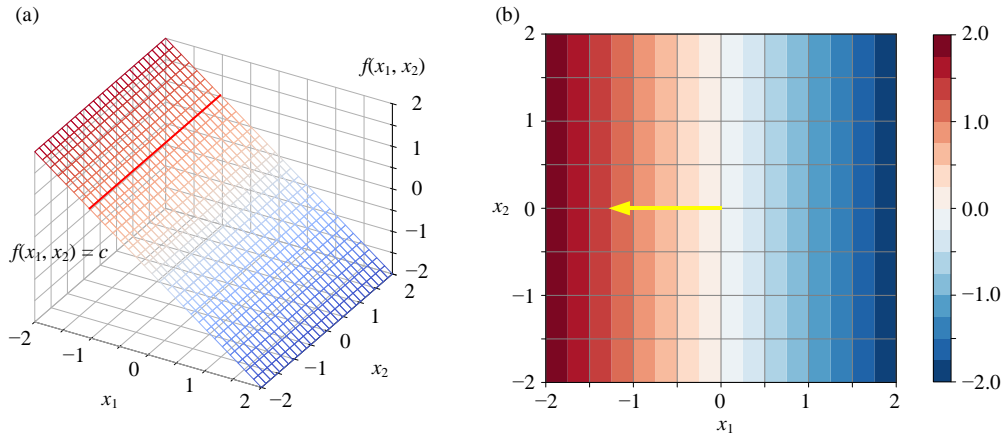


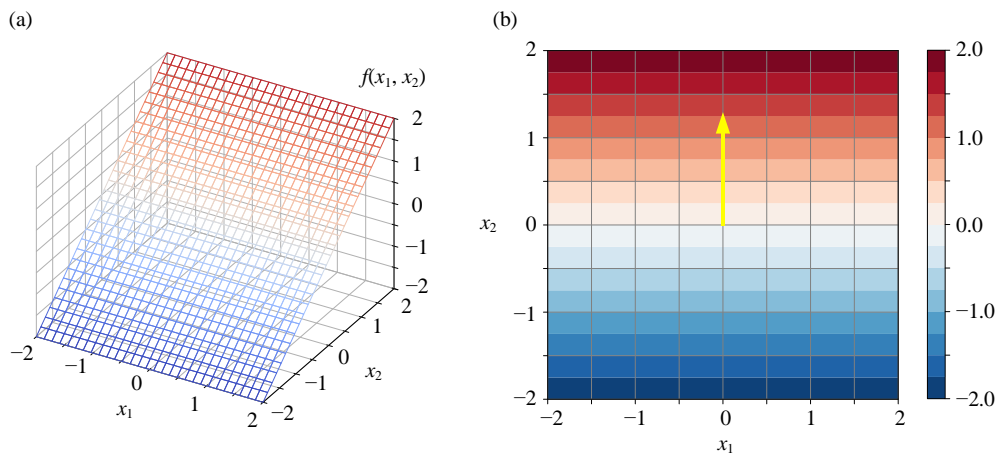
图 3. $f(x_1, x_2) = -x_1$ 网格图和等高线图

等高线平行横轴

当 $w_1 = 0$, $w_2 = 1$, $b = 0$ 时, $f(x_1, x_2)$ 平面仅仅受到 x_2 影响。图 4 所示图像对应如下解析式:

$$y = f(x_1, x_2) = x_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \quad (9)$$

图 4 (a) 所示平面平行于 x_1 轴。图 4 (b) 所示 $f(x_1, x_2)$ 平面等高线同样平行于 x_1 轴。图 4 (b) 中黄色箭头同样为 $f(x_1, x_2)$ 增大方向, 箭头指向 x_2 轴正方向。

图 4. $f(x_1, x_2) = x_2$ 网格图和等高线图

平面叠加

如图 5 所示，若干平面叠加得到的还是平面。函数 $f_i(x_1, x_2)$ 中下角标 i 为函数序号，不同序号代表不同函数。

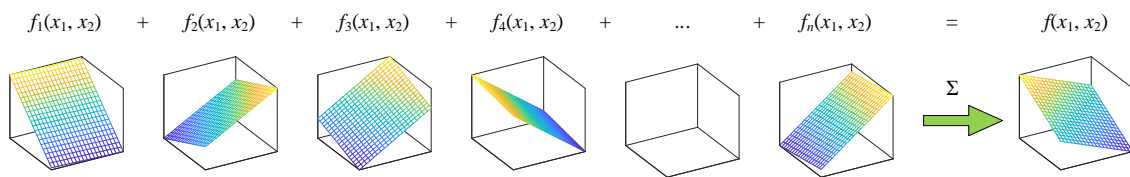


图 5. 若干平面叠加得到的还是平面

超平面

一次函数中变量数量继续增多时，将获得超平面 (hyperplane)，对应的解析式如下：

$$y = f(x_1, x_2, \dots, x_D) = w_1 x_1 + w_2 x_2 + \dots + w_D x_D + b \quad (10)$$

将 (10) 写成矩阵运算形式：

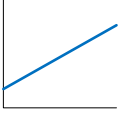


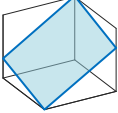
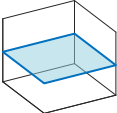

$$y = f(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^T \mathbf{x} + b \quad (11)$$

其中，

$$\mathbf{w} = \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_D \end{bmatrix}, \quad \mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_D \end{bmatrix} \quad (12)$$

平面直线、三维空间直线、三维空间平面可以借助不同数学工具进行描述，如表 1 所总结。请读者格外注意区分，代数中函数、方程式、参数方程三个概念之间区别。

表 1. 不同数学工具描绘直线和平面

	类型	图像
$f(x_1) = w_1x_1 + b$	函数	
$w_1x_1 + w_2x_2 + b = 0$	方程式	
$\begin{cases} x_1 = c_1 + \tau_1 t \\ x_2 = c_2 + \tau_2 t \end{cases}$	参数方程	
$f(x_1, x_2) = w_1x_1 + w_2x_2 + b$	函数	
$w_1x_1 + w_2x_2 + w_3x_3 + b = 0$	方程式	
$\begin{cases} x_1 = c_1 + \tau_1 t \\ x_2 = c_2 + \tau_2 t \\ x_3 = c_3 + \tau_3 t \end{cases}$	参数方程	



本书前文介绍过一元线性回归，回归模型中只含有一个自变量和一个因变量。从图像上来看，一元线性回归模型就是一条直线。

自变量的个数增加到两个，我们便得到二元线性回归。二元线性回归解析式可以写成 $y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2$ ，这就是我们本节介绍的二元一次函数，对应的图像是一个平面。

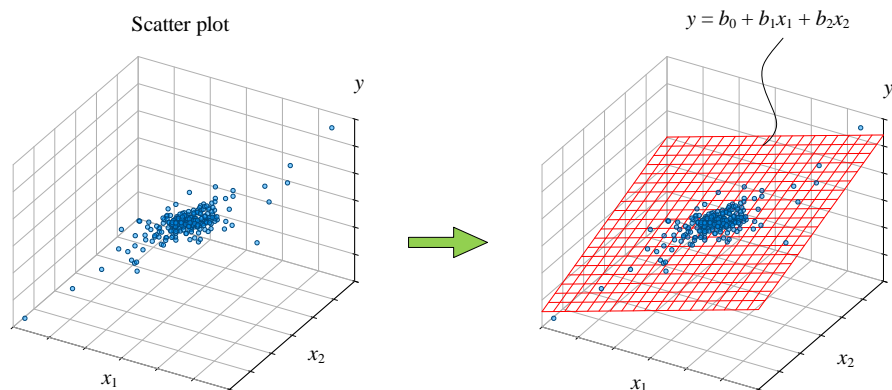


图 6. 从散点图到二元回归平面

图 6 左图是三维直角坐标系散点图。通过观察散点图，我们可以发现因变量随自变量变化的大致趋势。

图 6 右图中红色平面就是二元线性回归模型对应的图形，这个平面试图用一个平面（线性）解释自变量和因变量之间的量化关系。



Bk3_Ch13_01.py 绘制图 1 到图 4。代码中创建了三个自定义函数，用来可视化。另外，请大家修改 Bk3_Ch13_01.py 并绘制本章后续图像。

13.2 正圆抛物面：等高线为正圆

正圆抛物面 (circular paraboloid) 的是 **抛物面** (paraboloid) 的一种特殊形式，它的等高线为正圆。正圆抛物面的最简单的形式为：

$$y = f(x_1, x_2) = a(x_1^2 + x_2^2) \quad (13)$$

(13) 可以写成如下矩阵运算形式：

$$y = f(x_1, x_2) = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} a & 0 \\ 0 & a \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = a \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = a \mathbf{x}^T \mathbf{x} = a \|\mathbf{x}\|^2 \quad (14)$$

向量的模

本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。

版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。

代码及 PDF 文件下载：<https://github.com/Visualize-ML>

本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger：<https://space.bilibili.com/513194466>

欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：jiang.visualize.ml@gmail.com

请大家格外注意，(14) 可以写成 $y = f(x_1, x_2) = a\|\mathbf{x}\|^2$ 这种形式，其中 $\|\mathbf{x}\|$ 叫向量 \mathbf{x} 的模 (norm)。

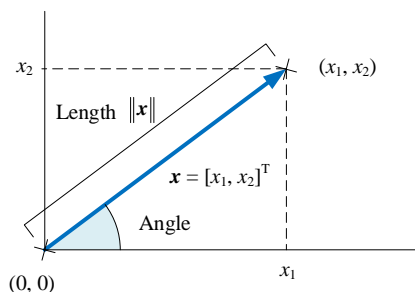


图 7. 向量有大小和方向两个性质

如图 7 所示，有了坐标系，向量 \mathbf{x} 可以理解为平面上有方向的线段，它有大小和方向两个性质。 $\|\mathbf{x}\|$ 为向量 \mathbf{x} 的模，就是向量的长度，定义为：

$$\|\mathbf{x}\| = \sqrt{x_1^2 + x_2^2} \quad (15)$$

观察 (15)，利用勾股定理， $\|\mathbf{x}\|$ 相当于 (x_1, x_2) 和原点 $(0, 0)$ 之间的距离，即欧氏距离。而 (14) 相当于欧氏距离的平方。

建议大家回想本书第 7 章介绍的“等距线”这个概念，回忆欧氏距离对应的等距线有怎样特点。本书第 22 章将继续这一话题。

开口朝上

图 8 所示为正圆抛物面开口朝上，对应的解析式如下：

$$y = f(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2 = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \mathbf{x}^T \mathbf{x} = \|\mathbf{x}\|^2 \quad (16)$$

观察图 8 (b)，曲面等高线为一系列同心正圆。观察等高线变化和曲面，可以发现等高线越密集，曲面变化越剧烈，也就是说曲面坡面越陡峭。图 8 所示曲面最小值点为 $(0, 0)$ 。

注意，图 8 (b) 中黄色箭头不再平行。但是，不同位置的黄色箭头都垂直于等高线，并指向函数增大方向。

要想获得黄色箭头 (梯度向量) 准确解析式就需要用到偏导数这个数学工具，偏导数是本书第 16 章要介绍的内容。

另外，当 x_1 为定值时，比如 $x_1 = 1$ ，得到的曲线为抛物线：

$$y = f(x_1, x_2 = 1) = 1 + x_2^2 \quad (17)$$

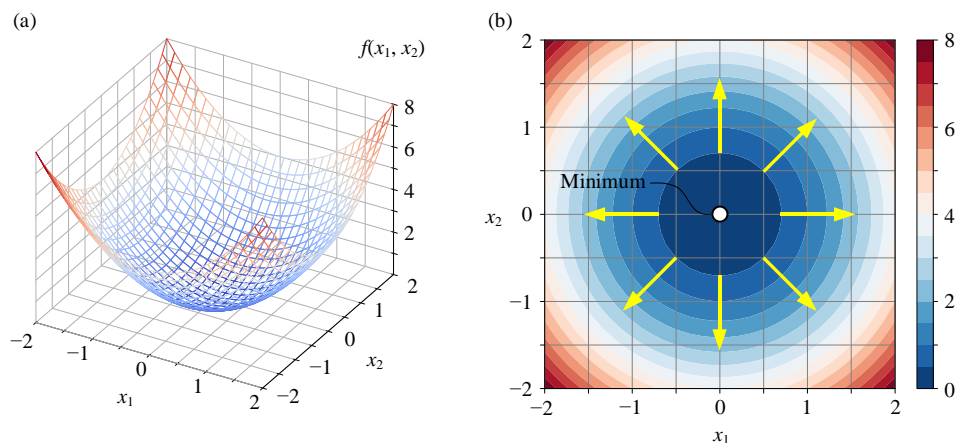


图 8. 开口朝上正圆抛物面，网格图和等高线图

开口朝下

图 9 所示同样为正圆抛物面，但开口朝下，解析式如下所示：

$$y = f(x_1, x_2) = -x_1^2 - x_2^2 = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = -\mathbf{x}^T \mathbf{x} \quad (18)$$

图 9 所示曲面在 (0, 0) 处取得最大顶点。

图 9 (b) 中不同位置的黄色箭头也都垂直于等高线，并指向函数增大方向。图 8 (b) 中箭头发散，但是图 9 (b) 箭头汇聚。这和曲面的凸凹性有关。图 8 (a) 曲面为凸面，而图 9 (a) 曲面为凹面。

值得注意的是，图 8 关于 x_1x_2 平面镜像便得到图 9。

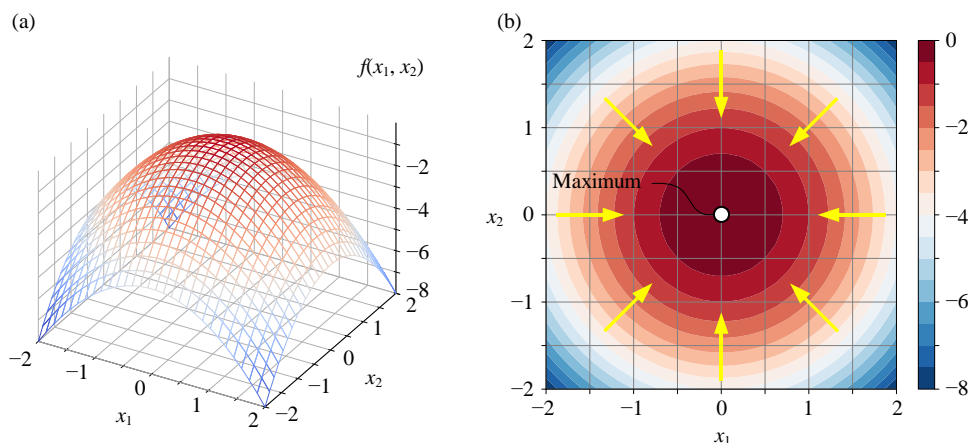


图 9. 开口朝下正圆抛物面，网格图和等高线图

平移

本书前文介绍过函数变换思想，在三维直角坐标系中，将 (14) 中二元函数变量 (x_1, x_2) 平移 (c_1, c_2) 得到：

$$y = f(x_1, x_2) = (x_1 - c_1)^2 + (x_2 - c_2)^2 = (\mathbf{x} - \mathbf{c})^T (\mathbf{x} - \mathbf{c}) = \|\mathbf{x} - \mathbf{c}\|^2 \quad (19)$$

其中， $\mathbf{c} = [c_1, c_2]^T$ 。

举个例子，当 $\mathbf{c} = [1, 1]^T$ 时，(19) 对应的抛物面曲面和等高线如图 10 所示。图 9 图像在 x_1x_2 平面平移 $\mathbf{c} = [1, 1]^T$ ，得到图 10 图像。正圆抛物面的中心移动到了 $(0, 0)$ 。相应地，最大值点也移动到了 $(0, 0)$ 。

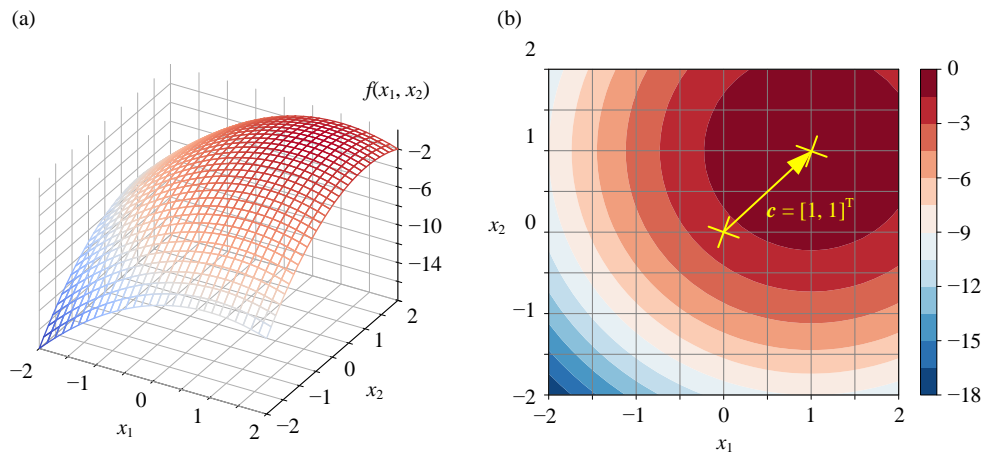


图 10. 抛物面平移

13.3 椭圆抛物面：等高线为椭圆

开口朝上

开口朝上椭圆抛物面 (elliptic paraboloid) 的一般形式为：

$$y = f(x_1, x_2) = \frac{x_1^2}{a^2} + \frac{x_2^2}{b^2} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} 1/a^2 & 0 \\ 0 & 1/b^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \quad (20)$$

其中， a 和 b 都不为 0。特别地，当 $a^2 = b^2$ 时，椭圆抛物面便是正圆抛物面。

将 (20) 写成：

$$y = f(x_1, x_2) = \mathbf{x}^T \begin{bmatrix} 1/a & 0 \\ 0 & 1/b \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1/a & 0 \\ 0 & 1/b \end{bmatrix} \mathbf{x} = \left(\begin{bmatrix} 1/a & 0 \\ 0 & 1/b \end{bmatrix} \mathbf{x} \right)^T \begin{bmatrix} 1/a & 0 \\ 0 & 1/b \end{bmatrix} \mathbf{x} \quad (21)$$

我们可以发现，从几何视角来看，上式中的对角方阵起到的就是“缩放”这个几何操作。

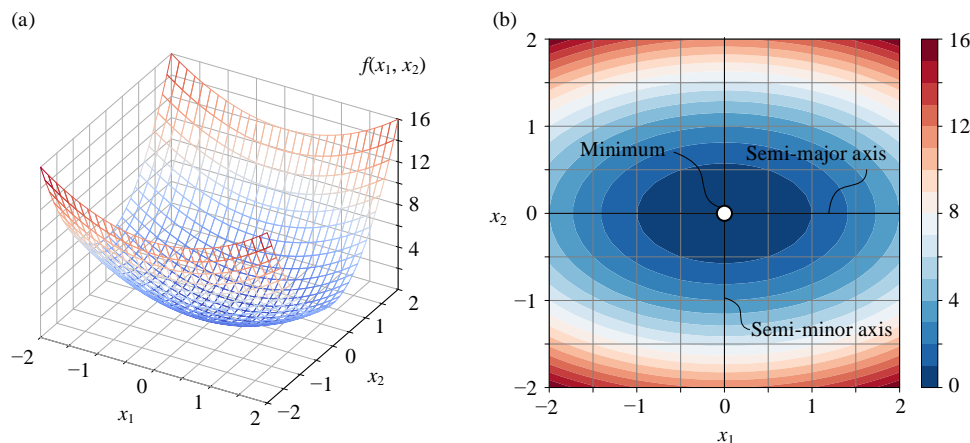


图 11. 开口朝上正椭圆抛物面，等高线为正椭圆，半长轴位于 x_1 轴，网格图和等高线图

举个例子

图 11 所示椭圆抛物面开口朝上，解析式如下：

$$y = f(x_1, x_2) = x_1^2 + 3x_2^2 = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \quad (22)$$

图 11 所示椭圆抛物面的最小值点位于 $(0, 0)$ 。图 8 在 x_2 轴方向以一定比例缩放便得到图 11。

如图 11 (b) 所示，曲面等高线为一系列椭圆。这些椭圆为正椭圆，其半长轴位于 x_1 轴。

回顾一下前文介绍过的椭圆相关概念。**长轴** (major axis) 是过焦点与椭圆相交的线段长，也叫做椭圆最长的直径；**半长轴** (semi-major axis) 是椭圆长轴的一半长。**短轴** (minor axis) 为椭圆最短的直径，**半短轴** (semi-minor axis) 为短轴的一半。

开口朝下

图 12 所示正椭圆抛物面开口朝下，对应解析式如下：

$$y = f(x_1, x_2) = -3x_1^2 - x_2^2 = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} -3 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \quad (23)$$

如图 12 (b) 所示，曲面等高线为正椭圆，半长轴位于 x_2 轴。图 12 所示曲面最大值点位于 (0, 0)。

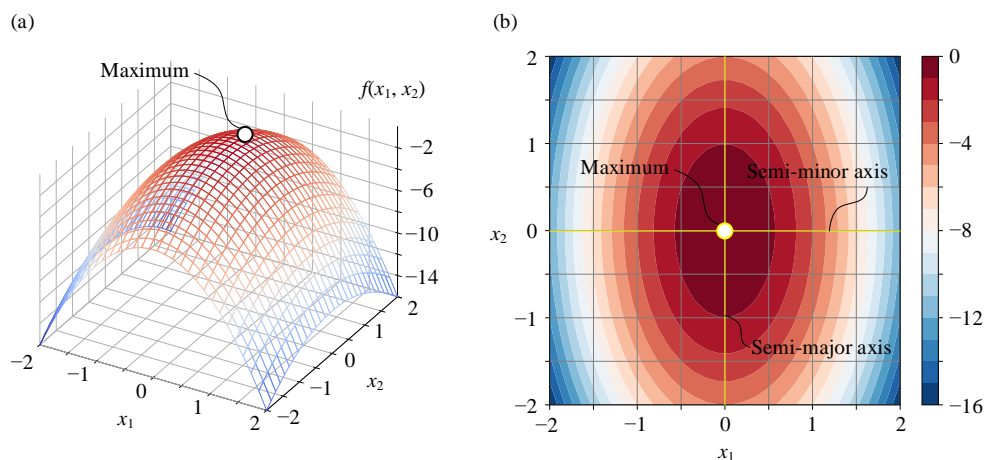


图 12. 开口朝下正椭圆抛物面，半长轴位于 x_2 轴，网格图和等高线图

旋转

图 13 所示旋转椭圆抛物面开口朝上，解析式如下：

$$y = f(x_1, x_2) = x_1^2 + x_1 x_2 + x_2^2 = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} 1 & 1/2 \\ 1/2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \quad (24)$$

观察图 13 (b) 可以容易发现曲面等高线不再是正椭圆，而是旋转椭圆。旋转椭圆的长半轴和 x_1 轴正方向夹角 135° 。

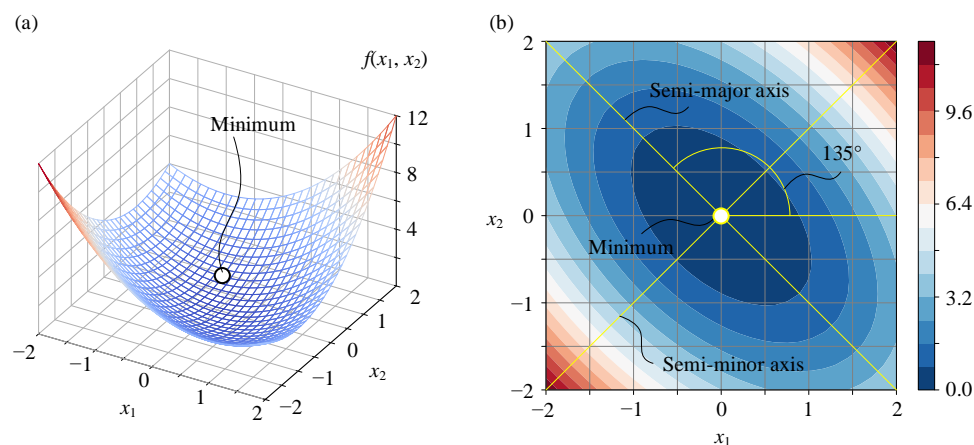


图 13. 开口朝上旋转椭圆抛物面，网格图和等高线图

图 14 所示为旋转椭圆抛物面开口朝下，对应解析式如下：

$$y = f(x_1, x_2) = -x_1^2 + x_1x_2 - x_2^2 = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} -1 & 1/2 \\ 1/2 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \quad (25)$$

图 14 曲面等高线椭圆旋转方向和图 13 正好相反。图 14 最大值点位于 (0, 0)。

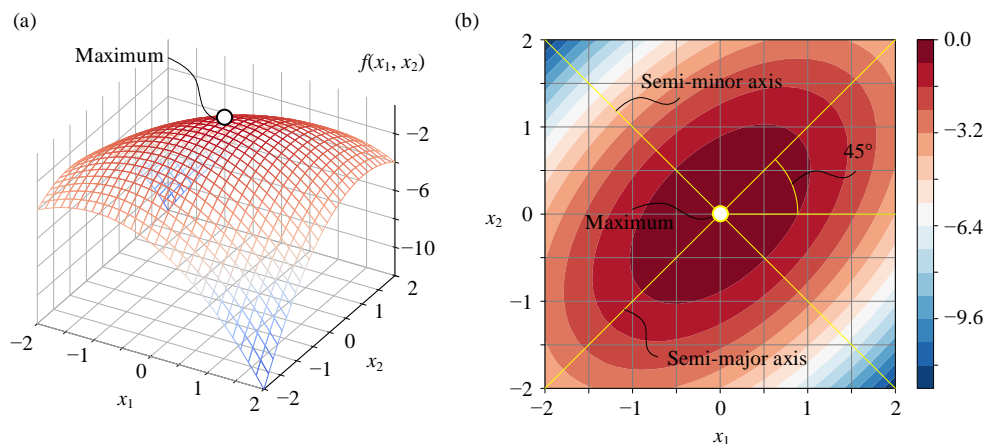


图 14. 开口朝下旋转椭圆抛物面，网格图和等高线图



在多元线性回归中，为了简化模型复杂度，可以引入**正则项** (regularizer)。正则项的目的是“收缩”，即让某些估计参数变小，甚至为 0。

L2 正则则是常见的正则方法之一。图 15 左上旋转椭圆抛物面上红叉 × 对应的位置就是二元线性回归中最优参数 b_1 和 b_2 (不考虑常数 b_0) 所在位置。

从几何角度，引入 L2 正则项，就相当于在旋转抛物面上叠加一个正圆抛物面。观察图 15 右图，可以发现引入正圆抛物面后，参数 b_1 和 b_2 位置相对于更靠近原点。这便是 L2 正则项 (正圆曲面) 起到的作用。

L2 正则项权重越大，其影响越大，即红叉 × 位置越靠近原点。

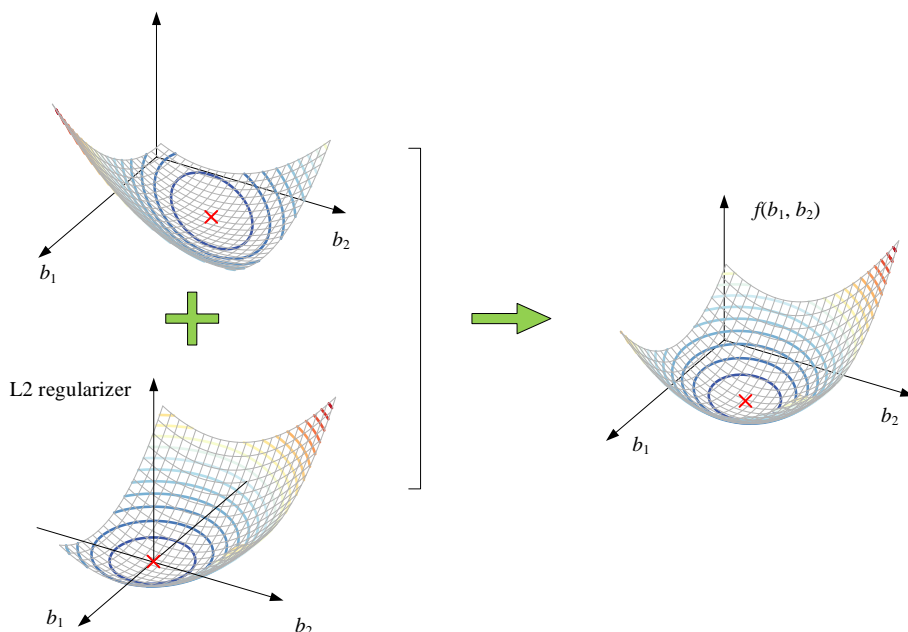


图 15. 线性回归中，L2 正则化相当于椭圆抛物面和正圆抛物面叠加

椭圆相关性质对于数据科学和机器学习很多算法相关重要，本系列丛书后续将继续探讨椭圆和其他数学知识的联系。

13.4 双曲抛物面：马鞍面

双曲抛物面 (hyperbolic paraboloid)，也叫**马鞍面** (saddle surface)，因其形状酷似马鞍而得名。双曲抛物面的一般形式为：

$$y = f(x_1, x_2) = \frac{x_1^2}{a^2} - \frac{x_2^2}{b^2} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} 1/a^2 & 0 \\ 0 & -1/b^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \quad (26)$$

举个例子

图 16 所示为双曲抛物面解析式为：

$$y = f(x_1, x_2) = x_1^2 - x_2^2 = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \quad (27)$$

观察图 16 (b)，可以发现曲面等高线为一系列双曲线。而曲面中心点，也称作**鞍点** (saddle point)，鞍点既不是曲面的最大值点也不是最小值点。有关鞍点的性质，本系列丛书会逐步介绍。

本章前文看到正圆和椭圆抛物面的等高线为闭合曲线；而图 16 (b) 中等高线不再闭合。此外请大家自行在图 16 (b) 中四条黑色等高线不同点处，画出前文介绍的黄色箭头（即梯度向量）；要求是，箭头垂直该点处等高线，并指向函数增大方向（朝向暖色系）。

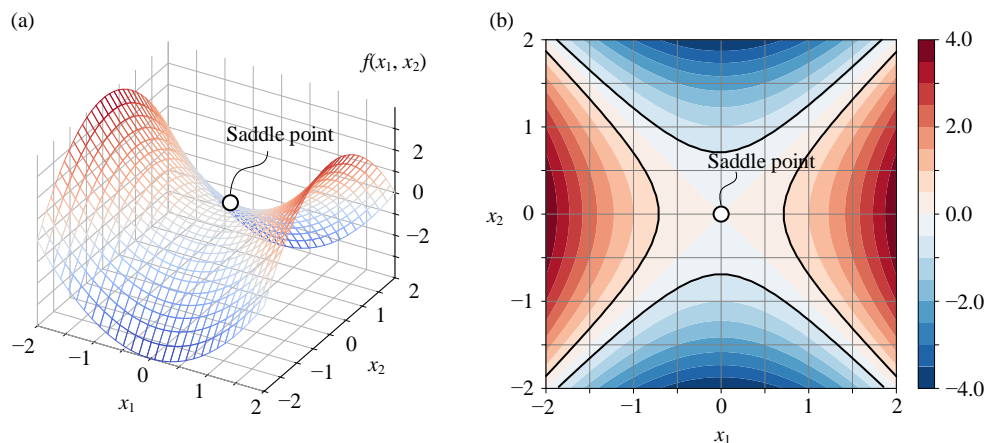


图 16. 双曲抛物面，网格图和等高线图

旋转

图 17 所示为旋转双曲线抛物面，解析式如下：

$$y = f(x_1, x_2) = x_1 x_2 = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} 0 & 1/2 \\ 1/2 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \quad (28)$$

(28) 图 17 (b) 所示等高线实际上是一系列反比例函数曲线。

比较图 16 (b)，可以发现图 17 (b) 中双曲线旋转 45 度。

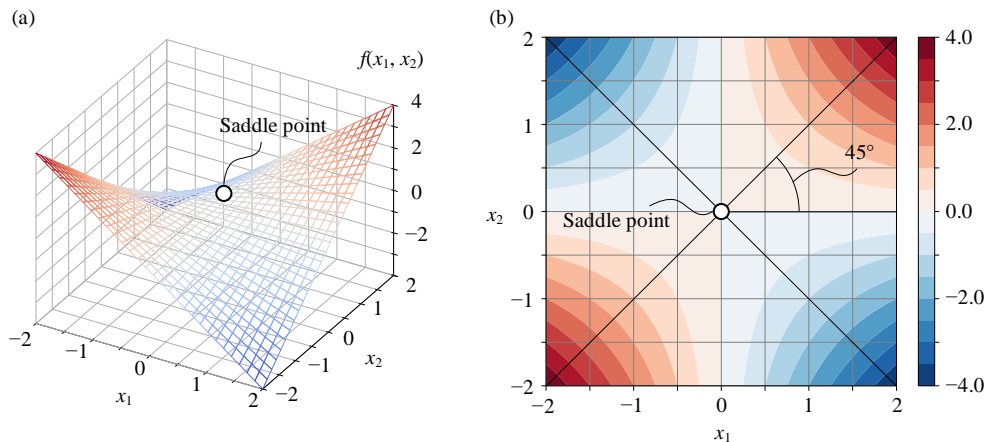


图 17. 旋转双曲抛物面，网格图和等高线图

13.5 山谷和山脊：无数极值点

本节介绍山谷面和山脊面，和它们的几何特征。

山谷面

图 18 所示为山谷面 (valley surface)，对应解析式如下：

$$y = f(x_1, x_2) = x_1^2 = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \quad (29)$$

观察图 18 (b) 可以发现，山谷面存在无数极小值点，并且这些极小值点均在一条直线上。

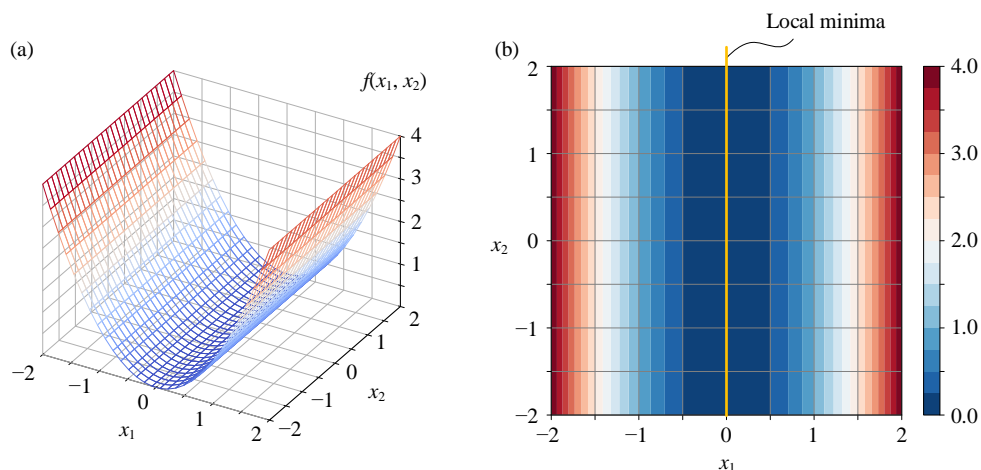


图 18. 山谷面，网格图和等高线图

叠加

如图 19 所示，如下正圆抛物面可以看做由两个山谷面叠加得到：

$$y = f(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2 \quad (30)$$

很多曲面都可以看做是若干不同类型曲面叠加而成。这个几何视角对于理解一些机器学习和数据科学算法非常重要。

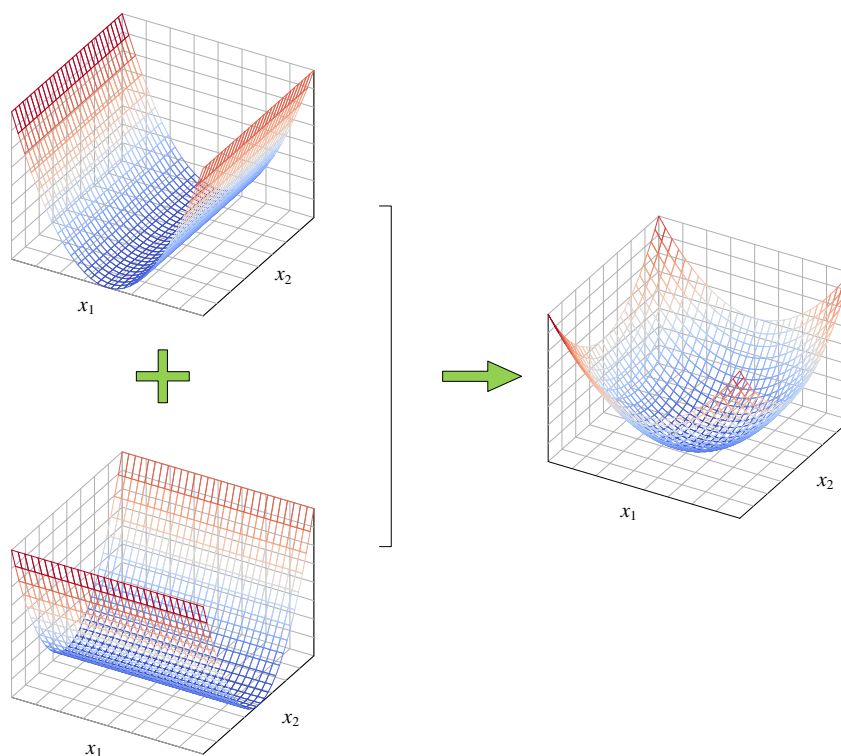


图 19. 两个山谷面合成得到正圆面

山脊面

图 20 所示为旋转**山脊面** (ridge surface)，解析式如下：

$$y = f(x_1, x_2) = -\frac{x_1^2}{2} + x_1x_2 - \frac{x_2^2}{2} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} -1/2 & 1/2 \\ 1/2 & -1/2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \quad (31)$$

图 20 (b) 告诉我们，山脊面有一系列极大值点，它们在同一条斜线上。

也请大家在图 20 (b) 中黑色等高线不同点绘制梯度方向箭头。

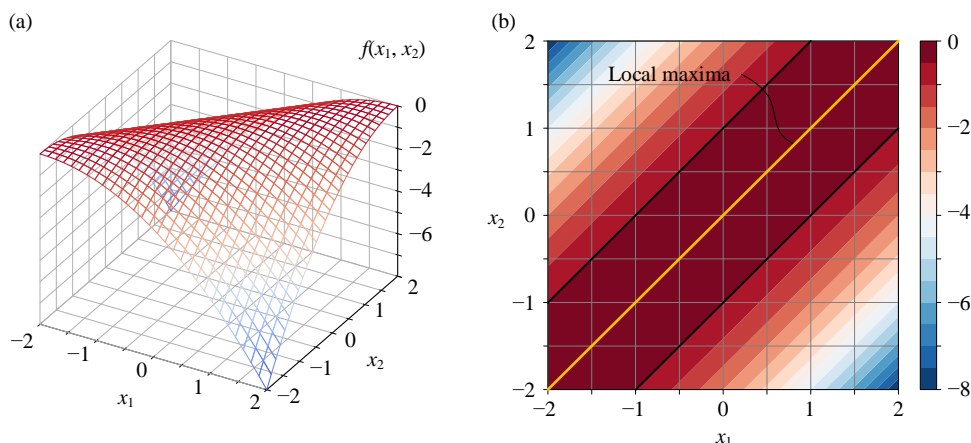


图 20. 旋转山脊面，网格图和等高线图

大家可能已经发现本章前文介绍的平面或二次曲面都可以写成如下一般式：

$$f(x_1, x_2) = ax_1^2 + bx_1x_2 + cx_2^2 + dx_1 + ex_2 + f \quad (32)$$

在 `Bk3_Ch13_01.py` 基础上，我们做了一个 App 用来交互呈现不同参数对上述函数对应的曲面影响。并采用 `Plotly` 呈现交互 3D 曲面。请参考 `Streamlit_Bk3_Ch13_01.py`。

13.6 锥面：正圆抛物面开方

开口朝上

开口朝上正圆抛物面解析式开平方取正，便得到锥面。图 21 所示锥面 (cone surface) 开口朝上，对应解析式如下：

$$y = f(x_1, x_2) = \sqrt{x_1^2 + x_2^2} = \sqrt{\mathbf{x}^T \mathbf{x}} = \|\mathbf{x}\| \quad (33)$$

观察图 21 (b) 可以发现，锥面的等高线为一系列同心圆。

图 21 所示曲面在 $(0, 0)$ 处取得最小值。但是 $(0, 0)$ 并不光滑，该点为尖点。

▲ 注意，在这个尖点处，无法找到曲面的切线或切面。

值得注意的是，图 21 (b) 中不同等高线之间均匀渐变，这显然不同于图 8 (b)。为了更好地量化比较，请大家试着写代码绘制 $y = |x|$ 和 $y = x^2$ 这两个函数，观察曲线变化大家就会理解为什么图 21 等高线均匀变化，而图 8 等高线离中心越远越密集。这个分析思路就是通过“降维”来分析二元、多元函数，即固定其他变量，观察函数随某个特定变量变化。



本书第 16 章介绍的偏导数这个工具，用的也是“降维”这个思路。

前文说过，向量模 $\|\mathbf{x}\|$ 代表向量长度，也就是距离，即欧氏距离。图 21 (b) 中不同等高线代表和 $(0, 0)$ 距离相同，这些等高线就是欧氏距离“等距线”。

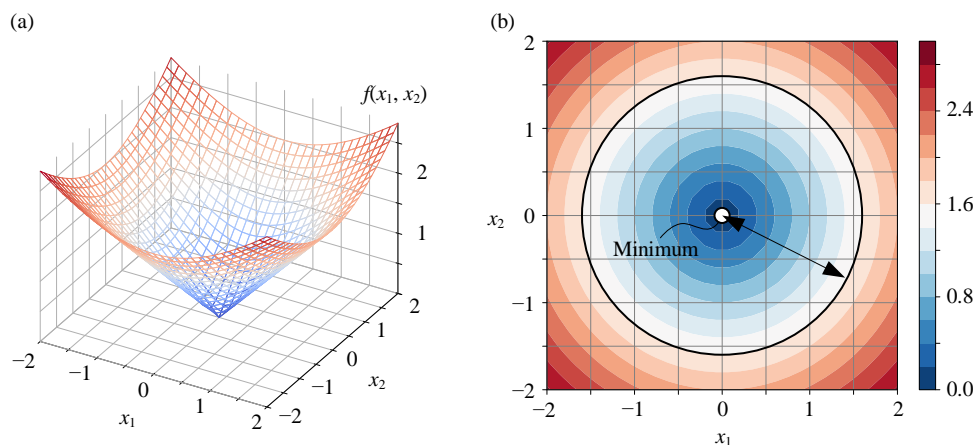


图 21. 正圆锥面，开口朝上，网格图和等高线图

开口朝下

(33) 解析式加个负号便得到如图 22 所示开口向下锥面，解析式如下：

$$y = f(x_1, x_2) = -\sqrt{x_1^2 + x_2^2} \quad (34)$$

图 22 (b) 锥面等高线同样为一系列均匀渐变同心圆，锥面在 $(0, 0)$ 取得最大值。最大值点处也是尖点。

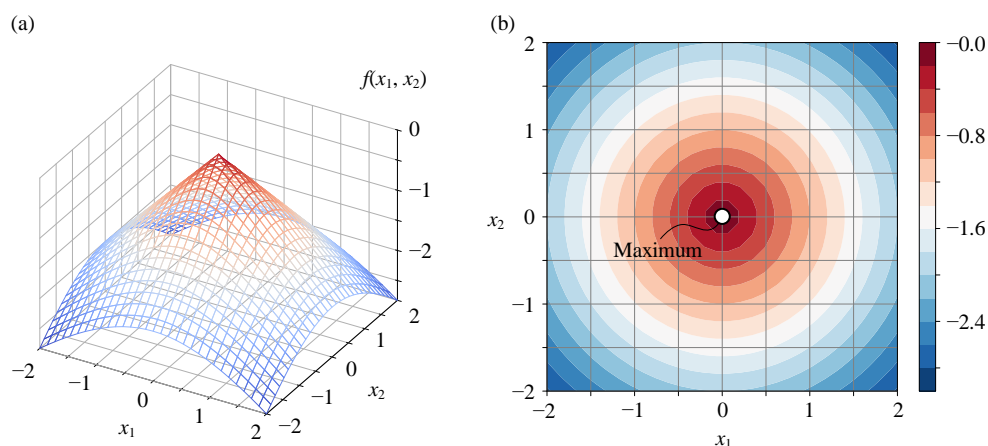


图 22. 正圆锥面，开口朝下，网格图和等高线图

对顶圆锥

中轴保持在一条直线上，将图 21 和图 22 两个圆锥面在顶点处拼接在一起便获得如图 23 所示**对顶圆锥** (double cone 或 vertically opposite circular cone)。大家在前文已经看到看到对顶圆锥和圆锥曲线之间的关系。

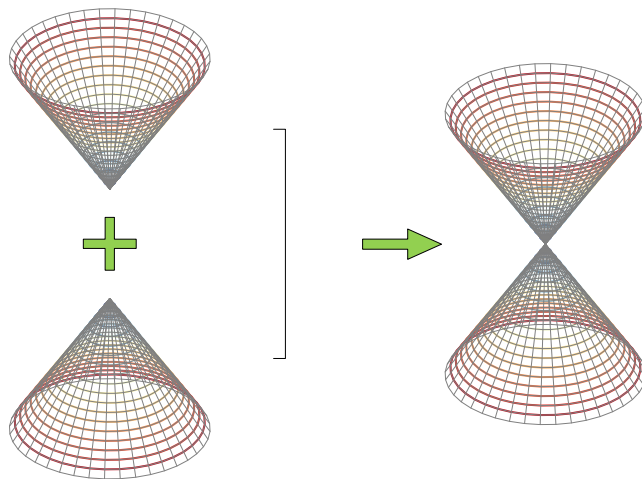


图 23. 对顶圆锥



Bk3_Ch13_02.py 绘制图 23 中开口朝上的圆锥面。注意，图 23 中网格面在极坐标系中生成。

13.7 绝对值函数：和超椭圆有关

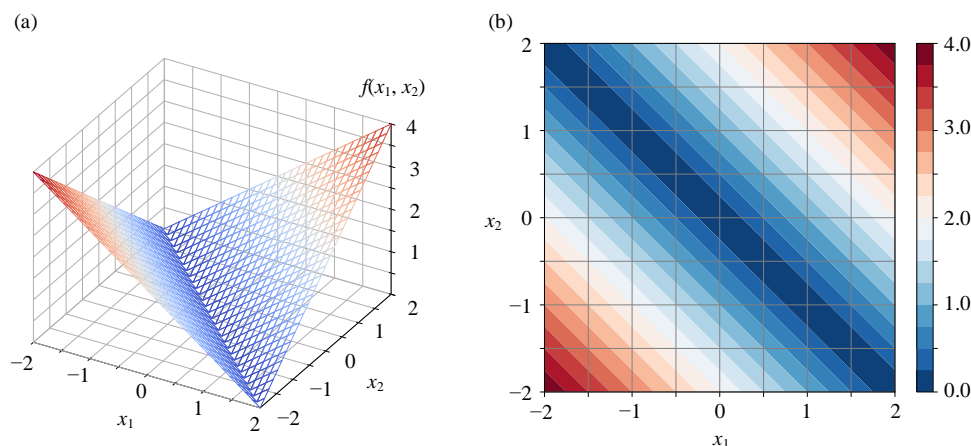
本节将绝对值函数扩展到二元，本节将构造三个不同绝对值函数。

平面对折

第一个例子， $x_1 + x_2$ 取绝对值，具体解析式如下：

$$y = f(x_1, x_2) = |x_1 + x_2| \quad (35)$$

如图 24 所示，(35) 相当于 $f(x_1, x_2) = x_1 + x_2$ 平面对折。

图 24. $f(x_1, x_2) = |x_1 + x_2|$ 空间形状

此外, (35) 相当于旋转山谷面解析式开平方取正:

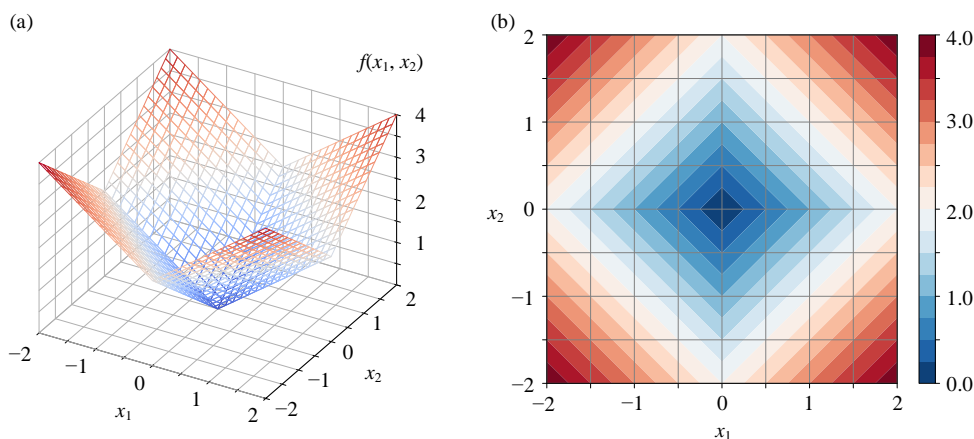
$$y = f(x_1, x_2) = \sqrt{(x_1 + x_2)^2} \quad (36)$$

旋转正方形

第二个例子, x_1 和 x_2 分别取绝对值再求和, 解析式如下:

$$y = f(x_1, x_2) = |x_1| + |x_2| \quad (37)$$

图 25 所示 $f(x_1, x_2) = |x_1| + |x_2|$ 等高线图像为一系列旋转正方形。

图 25. $f(x_1, x_2) = |x_1| + |x_2|$ 空间形状

正方形

第三个绝对值函数的例子为, x_1 和 x_2 分别取绝对值, 比大小后、取两者中最大值, 如下:

$$y = f(x_1, x_2) = \max(|x_1|, |x_2|) \quad (38)$$

如图 26 所示, $\max(|x_1|, |x_2|)$ 对应曲面等高线为正方形。

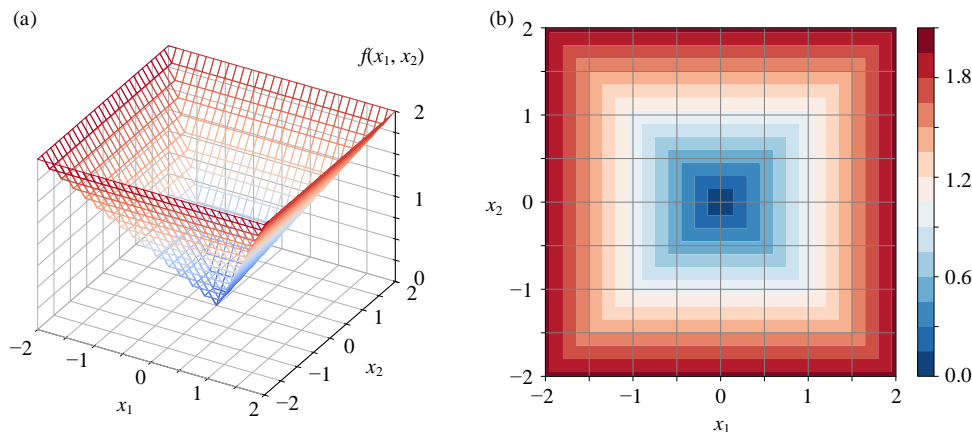


图 26. $f(x_1, x_2) = \max(|x_1|, |x_2|)$ 空间形状



本节介绍的三个绝对值函数和本书第 9 章介绍的超椭圆存在联系。此外, 本系列丛书后续还会介绍它们和 L^p 范数、距离度量之间的联系。

实际上, 上一节介绍的锥面也可以看做是一种绝对值函数:

$$y = f(x_1, x_2) = \sqrt{|x_1|^2 + |x_2|^2} = \|\mathbf{x}\| \quad (39)$$

⚠ 请大家注意区分绝对值和向量模这两个数学概念。



本章前文介绍过, 引入正则项可以简化在多元线性回归。

除了 L2 正则项, L1 正则项也经常使用。

如图 27 所示, 引入 L1 正则项, 相当于在旋转抛物面上叠加一个解析式为 $f(b_1, b_2) = \alpha(|b_1| + |b_2|)$ 绝对函数曲面。观察图 27 右图, 发现曲面出现“折痕”, 这些“折痕”来自于 L1 正则项曲面, 它们破坏了曲面的光滑。

引入 L1 正则项, 参数 b_1 和 b_2 位置更靠近原点。特别地, 当 L1 正则项权重增大到一定程度, b_1 或 b_2 优化解可以 0。也就是说, 红叉 \times 位置可能在横轴或者纵轴上。这种特性是 L2 正则项不具备的。

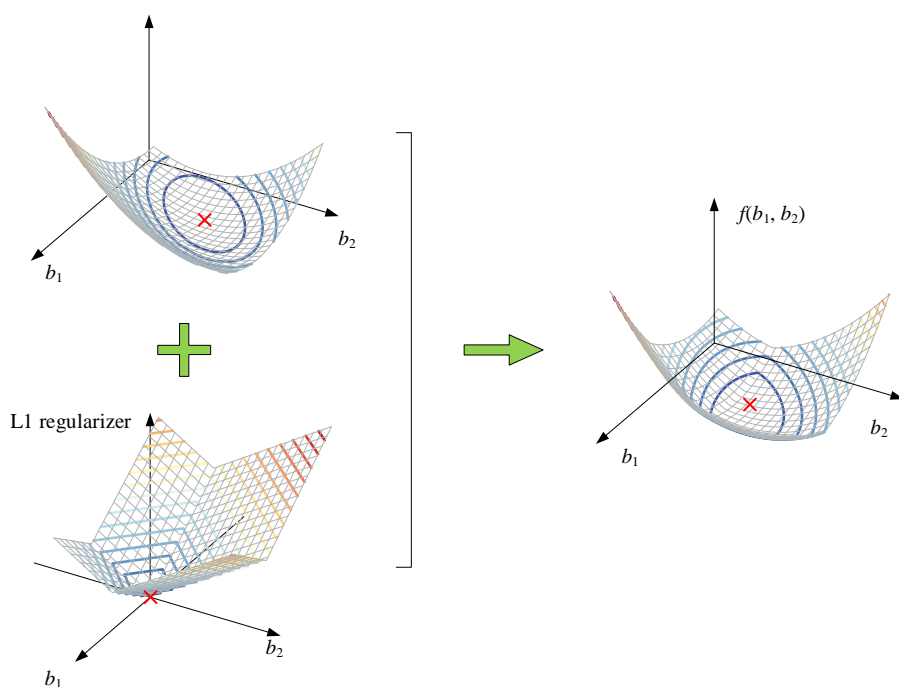


图 27. 线性回归中 L1 正则化相当于椭圆抛物面和绝对值曲面叠加

13.8 逻辑函数：从一元到二元

本节将一元逻辑函数推广到二元。二元逻辑函数对应的一般解析式如下：

$$y = f(x_1, x_2) = \frac{1}{1 + \exp(-(w_1 x_1 + w_2 x_2 + b))} \quad (40)$$

写成矩阵运算形式：

$$y = f(\mathbf{x}) = \frac{1}{1 + \exp(-(\mathbf{w}^T \mathbf{x} + b))} \quad (41)$$

▲ 注意，(41) 可以看做一个复合函数。

举个例子

当 $w_1 = 1, w_2 = 1, b = 0$ 时，(40) 可以写成：

$$y = f(x_1, x_2) = \frac{1}{1 + \exp(-(x_1 + x_2))} \quad (42)$$

观察图 28 曲面可以发现，当 $x_1 + x_2$ 趋近正无穷时，(42) 趋近 1，却无法达到 1。当 $x_1 + x_2$ 趋向于负无穷时，(42) 趋近 0，却无法达到 0。

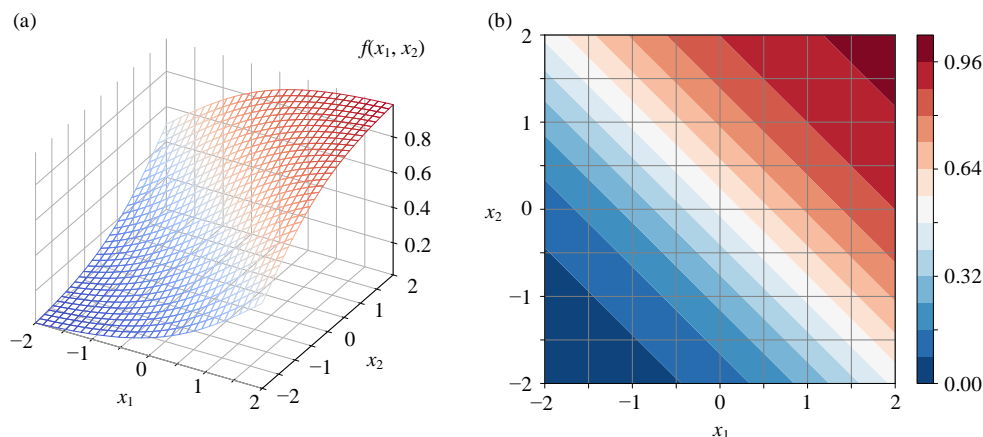


图 28. $f(x_1, x_2) = 1/(1 + \exp(-(x_1 + x_2)))$ 空间形状

再举个例子

当 $w_1 = 4, w_2 = 4, b = 0$ 时，(40) 可以写成：

$$y = f(x_1, x_2) = \frac{1}{1 + \exp(-4(x_1 + x_2))} \quad (43)$$

图 29 所示为 (43) 对应的曲面。对比图 28 和 图 29，不难发现，当 w_1 和 w_2 增大后，坡面变得陡峭。

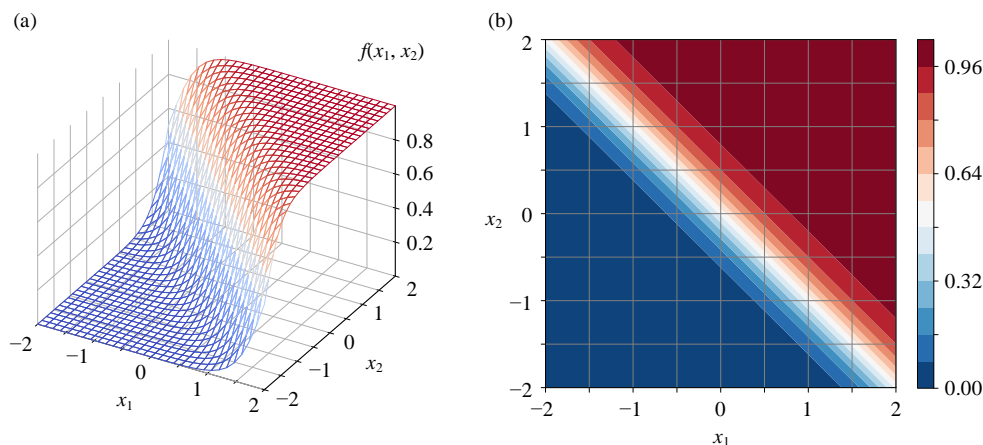


图 29. $f(x_1, x_2) = 1/(1 + \exp(-4(x_1 + x_2)))$ 空间形状

二元 tanh() 函数

本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。

版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。

代码及 PDF 文件下载：<https://github.com/Visualize-ML>

本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger：<https://space.bilibili.com/513194466>

欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：jiang.visualize.ml@gmail.com

上一章提到，逻辑函数是 S 型函数的一种；而机器学习中，sigmoid 函数很多时候特指 $\tanh()$ 函数。二元 $\tanh()$ 函数形式如下：

$$y = f(x_1, x_2) = \tanh(\gamma(w_1x_1 + w_2x_2) + r) \quad (44)$$

写成矩阵运算形式：

$$y = f(\mathbf{x}) = \tanh(\gamma \mathbf{w}^T \mathbf{x} + r) \quad (45)$$

举个例子

$\gamma = 1$, $w_1 = 0$, $w_2 = 0$, $r = 0$ 时，

$$y = f(x_1, x_2) = \tanh(x_1 + x_2) \quad (46)$$

图 30 所示为 (46) 对应的曲面以及平面等高线。当 γ 增大时，曲面也变得陡峭。比如，图 31 对应 $\gamma = 4$, $w_1 = 0$, $w_2 = 0$, $r = 0$ 函数曲面。

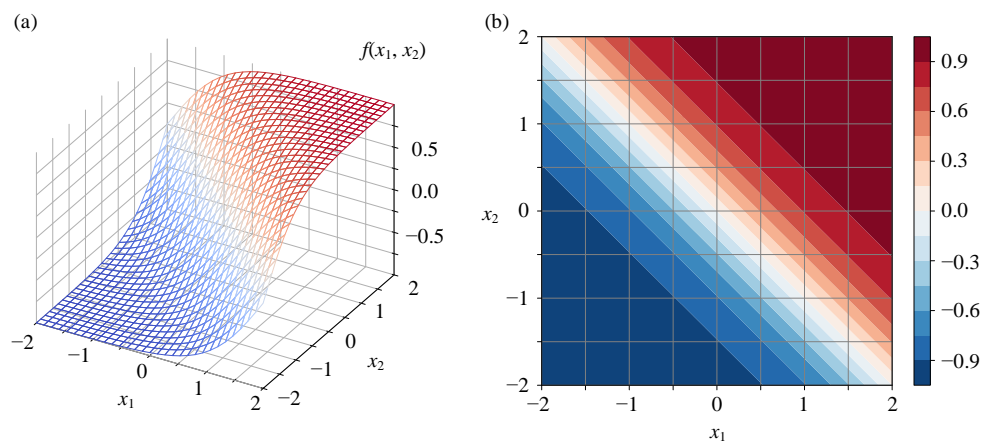
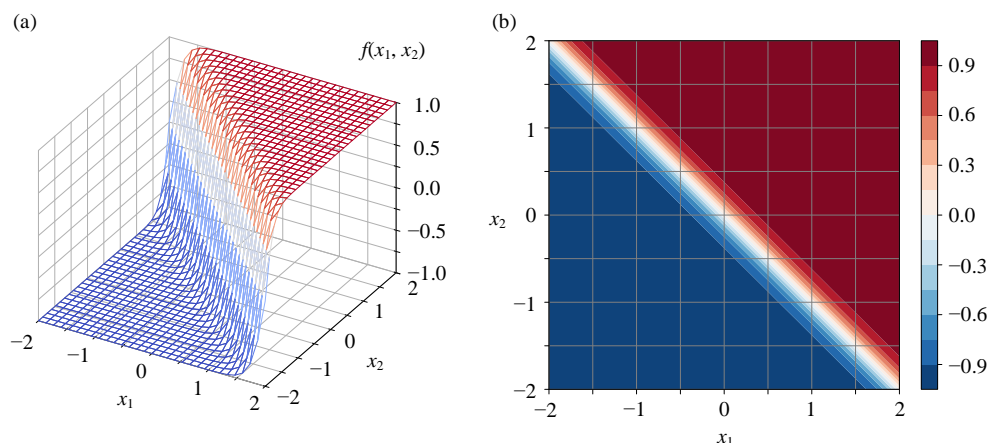


图 30. 二元 Sigmoid 核函数, $\gamma = 1$, $w_1 = 0$, $w_2 = 0$, $r = 0$

图 31. 二元 Sigmoid 核函数, $\gamma = 4$, $w_1 = 0$, $w_2 = 0$, $r = 0$

13.9 高斯函数：机器学习的多面手

本节将一元高斯函数推广到二元。

二元高斯函数的一般形式为：

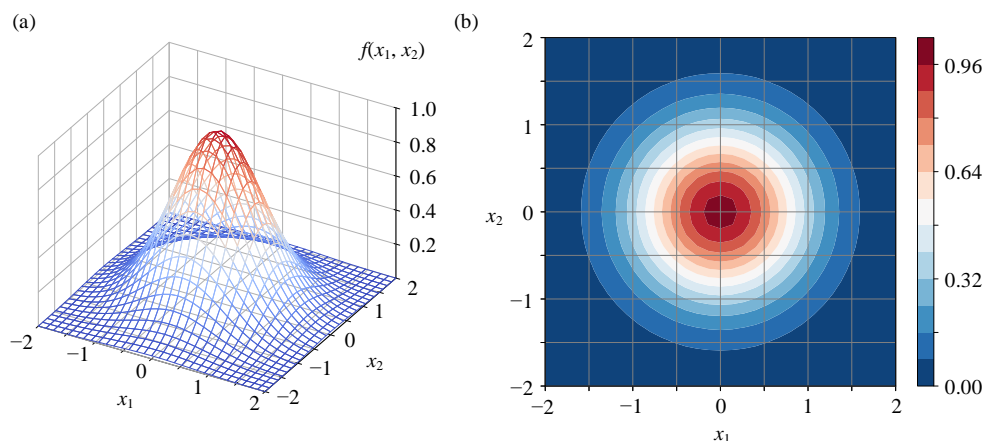
$$y = f(x_1, x_2) = \exp\left(-\gamma\left((x_1 - c_1)^2 + (x_2 - c_2)^2\right)\right) \quad (47)$$

举个例子

$\gamma = 1$, $c_1 = 0$, $c_2 = 0$ 时，二元高斯函数函数解析式为：

$$y = f(x_1, x_2) = \exp\left(-(x_1^2 + x_2^2)\right) = \exp(-\mathbf{x}^T \mathbf{x}) = \exp(-\|\mathbf{x}\|^2) \quad (48)$$

图 32 所示为 (48) 对应的曲面和平面等高线。

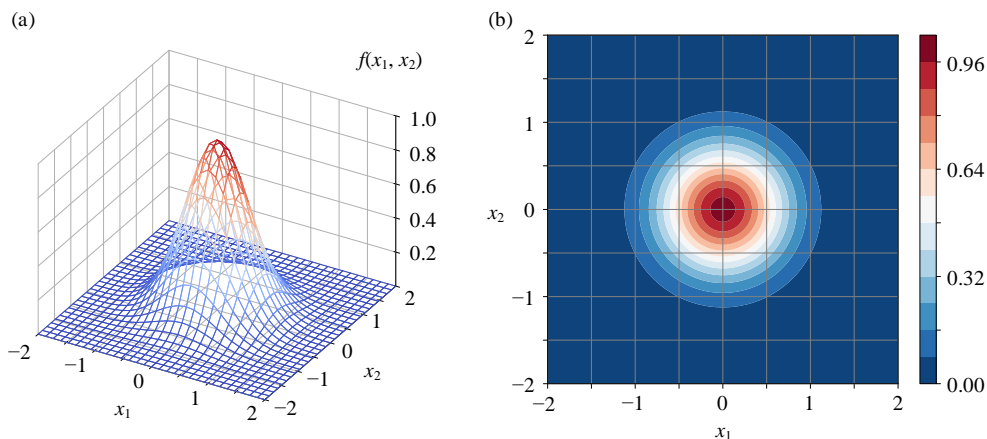
图 32. 高斯核曲面, $\gamma = 1$, $c_1 = 0$, $c_2 = 0$

再举个例子

$\gamma = 2$, $c_1 = 0$, $c_2 = 0$ 时, 二元高斯函数为:

$$y = f(x_1, x_2) = \exp(-2(x_1^2 + x_2^2)) = \exp(-2\mathbf{x}^T \mathbf{x}) = \exp(-2\|\mathbf{x}\|^2) \quad (49)$$

图 33 所示为 (49) 对应的曲面和平面等高线。比较图 32 和图 33, 可以发现随着 γ 增大, 曲面变得更尖, 更陡峭。

图 33. 高斯核曲面, $\gamma = 2$, $c_1 = 0$, $c_2 = 0$ 

本书前文简单介绍过一种重要的机器学习方法——**支持向量机**。如图 34 所示, SVM 基本原理是找到一条灰色“宽带”, 将绿色点和蓝色点分开, 并让灰色“**间隔 (margin)**”最宽。

本 PDF 文件为作者草稿, 发布目的为方便读者在移动终端学习, 终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。

版权归清华大学出版社所有, 请勿商用, 引用请注明出处。

代码及 PDF 文件下载: <https://github.com/Visualize-ML>

本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger: <https://space.bilibili.com/513194466>

欢迎大家批评指教, 本书专属邮箱: jiang.visualize.ml@gmail.com

灰色“间隔”中心线(图 34 中红色直线)便是分割边界,即分类**决策边界** (decision boundary)。

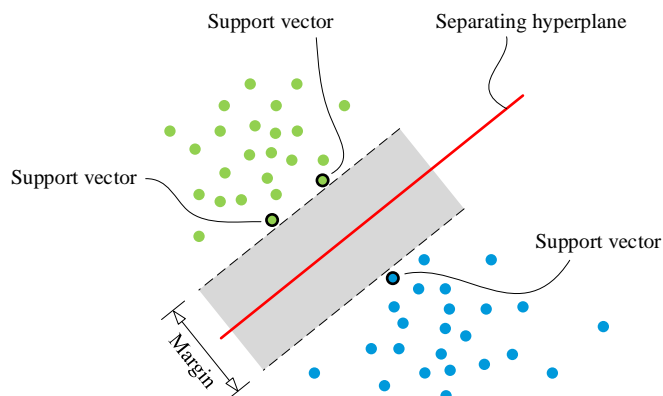


图 34. 支持向量机原理

但是,实际情况却是,很多数据并不能用一条直线将不同标签样本分类,比如图 35 所示情况。

对于这种情况,我们需要采用**核技巧** (kernel trick)。核技巧的基本思路就是将数据映射到高维空间中,让数据在这个高维空间中线性可分。

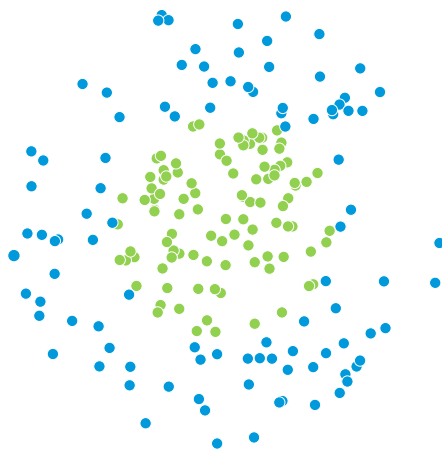


图 35. 线性不可分数据

核技巧原理如图 36 所示。原数据线性不可分,显然不能用一条直线将数据分成两类。

但是,将原来二维数据投射到三维空间之后,就可以用一个平面将数据轻易分类。这个投射规则便是**核函数** (kernel function),而高斯函数是重要的核函数之一。图 36 (b) 右图是由若干高斯函数叠加而成。

红色等高线便是分类决策边界。

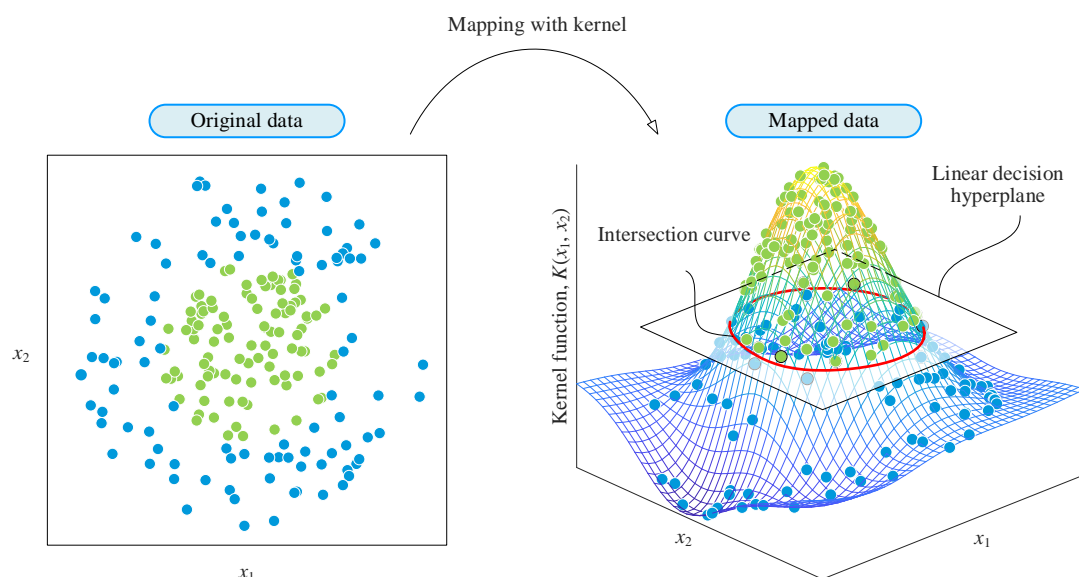


图 36. SVM 核技巧

本节将一元函数推广到二元情况，并将它们和几何、优化、机器学习联系起来。虽然，这样显得“急功近利”，但是必须承认带着“学以致用”目标学习数学将大大提高学习效率。