1、多元函数定义

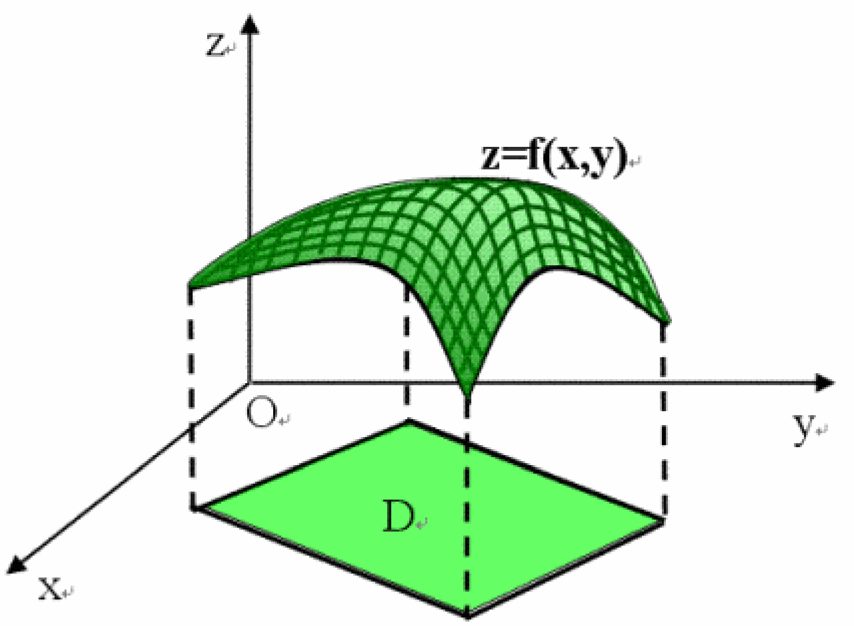
设 D 为一个非空的 n 元有序数组的集合， $f(x)$ 为某一确定的对应规则，也称为函数关系。

$(x_1, x_2, \ldots\ldots, x_n) \in D$ 如果对于每一个有序数组，通过对应规则 $f(x)$ 都有唯一确定的实数 y 与之对应，则称对

应规则 $f(x)$ 为定义在 D 上的 n 元函数。记为：

$y = f(x_1, x_2, \ldots\ldots, x_n)$ ，$(x_1, x_2, \ldots\ldots, x_n) \in D$ 。变量 $x_1, x_2, \ldots\ldots, x_n$ 称为自变量；y称为因变量。

- 当 n=1 时，为一元函数，记为 $y = f(x)$ ，$x \in D$；
- 当 n=2 时，为二元函数，记为 $z = f(x, y)$ ，$(x, y) \in D$ ，如图所示：

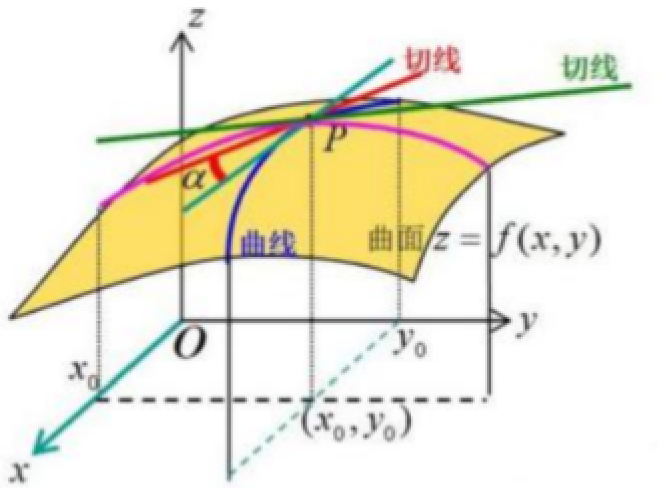


- 二元及以上的函数统称为多元函数。

2、偏导数

$$\frac{\partial f}{\partial x_i} = \lim_{\Delta x_i \to 0} \frac{f(x_i, \ldots, x_i + \Delta x_i, \ldots, x_n) - f(x_i, \ldots, x_i, \ldots, x_n)}{\Delta x_i}$$

偏导数，可以看作是导数的推广，对于多元函数来说，我们把其它的自变量固定不动，看成是**常量**，我们对其中的某一个变量求导数的话，那就是偏导数了，只对一个变量求导数！



几何意义上面来说就是在某个方向上对原函数来切一下，再去求导，就是偏导数。举例说明：

$$f(x,y) = x^2 + 3xy - 2y^2$$

对变量 x 求偏导数，其中 y 是常量

$$f'x = \frac{\partial f}{\partial x} = 2x + 3y$$

对变量 y 求偏导数，则 x 是常量

$$f'y = \frac{\partial f}{\partial y} = 3x - 4y$$

3、高阶偏导数

有高阶导数，同样也有高阶偏导数，它的情况比高阶导数要复杂一些，因为它的求导变量有多个，比如说：

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}$$

它对 x, y 求高阶偏导数的话，就是先对 x 求偏导，再对 y 求偏导，其实跟一元函数的高阶导数是一样的，依次对每个变量反复求导即可，我们还是以上面的公式为例：

$$f(x,y) = x^2 + 3xy - 2y^2$$

二元函数的二阶偏导数有四个：

$$\frac{\partial^2 f}{\partial^2 x} = 2$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} = 3$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x} = 3$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial^2 y} = -4$$

有个重要的结论，就是高阶导数和求导次序无关:

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} = \frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x}$$

4、梯度

机器学习中的梯度下降法，和牛顿法很多地方都会用到**梯度**这个概念。

$$\nabla f(x) = \left[\frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}, \ldots, \frac{\partial f}{\partial x_n} \right]^T$$

梯度可以看成一元函数的导数，对于多元函数来说就是偏导数而已。

对于多元函数如果它的自变量有 N 个：$x_1, x_2, \ldots\ldots, x_n$ 。它的梯度是个向量，是由对 $x_1, x_2, \ldots\ldots, x_n$ 变量

求偏导数构成的这样一个向量，称之为梯度。梯度我们用**倒三角**这个符号来表示，对 $f(x)$ 求梯度得到上面所示的

向量 $\nabla f(x)$ 。

5、雅可比矩阵

5.1、雅克比矩阵定义

这个可能很多同学学高等数学的时候可能没有学过，但是这个也比较好理解，就是由一阶偏导数构成的矩阵，发明它的目的主要是为了简化求导公式，对多元的复合函数求导，如果我们用雅可比矩阵来计算的话，它会写起来非常简洁，这在我们的人工神经网络反向推导的过程中往往会看到的。

$y = f(x)$ ，其中 x 是 n 维向量表示有 n 个未知数即 n 个自变量，y 是 k 维的向量表示函数对应关系计算返回k个因变量。

$y_i = f(x_i)$ ，其中每个 x_i 和每个 y_i 都是相关的，也就是每个 y_i 是单独从 x_i 映射过来的函数。

函数 $f(x)$ 的雅可比矩阵就是每个 y_i 分别对每个 x_i 求偏导，然后构成的矩阵叫做雅可比矩阵：

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial y_1}{\partial x_1}, & \frac{\partial y_1}{\partial x_2}, & \cdots, & \frac{\partial y_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial y_2}{\partial x_1}, & \frac{\partial y_2}{\partial x_2}, & \cdots, & \frac{\partial y_2}{\partial x_n} \\ \cdots, & \cdots, & \cdots, & \cdots \\ \frac{\partial y_k}{\partial x_1}, & \frac{\partial y_k}{\partial x_2}, & \cdots, & \frac{\partial y_k}{\partial x_n} \end{bmatrix}$$

第一行就是 y_1 对 $x_1, x_2, ..., x_n$ 求偏导；第二行就是 y_2 对 $x_1, x_2, ..., x_n$ 求偏导；第 k 行就是 y_k 对$x_1, x_2, ..., x_n$ 求偏导。如果 x 是 n 维向量，y 是 k 个值的因变量，那么雅可比矩阵就是 k*n 的矩阵。

5.2、雅克比矩阵示例

$$\begin{Bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{Bmatrix} \quad \begin{matrix} y_1 = x_1^2 + 3x_1x_2 + 2x_3 \\ y_2 = 2x_1 - 2x_1x_2 + x_3^2 \end{matrix} \quad \begin{Bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{Bmatrix}$$

自变量 x_1, x_2, x_3 根据函数 $f(x)$ 映射为因变量 y_1, y_2，那么 y_1 是 x_1, x_2, x_3 的函数，y_2 也是 x_1, x_2, x_3 的函数，那么函数 $f(x)$ 的雅可比矩阵如下：

$$\begin{bmatrix} 2x_1 + 3x_2, & 3x_1, & 2 \\ 2 - 2x_2, & -2x_1, & 2x_3 \end{bmatrix}$$

6、Hessian矩阵

6.1、Hessian矩阵定义

Hessian矩阵是对于一个多元函数来说的，它就相当于一元函数的二阶导数。

有一个关于 x 的 n 元函数 $f(x)$，自变量为 $x_1, x_2, ..., x_n$，那么Hessian矩阵为：

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial^2 x_1}, & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2}, & \cdots, & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_1}, & \frac{\partial^2 f}{\partial^2 x_2}, & \cdots, & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_n} \\ \cdots, & \cdots, & \cdots, & \cdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1}, & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_2}, & \cdots, & \frac{\partial^2 f}{\partial^2 x_n} \end{bmatrix}$$

Hessian 矩阵是一个 $n * n$ 的矩阵，里面的元素是二阶偏导数构成的。第一个元素是对 x_1 求二阶偏导数，第二个元素是对 $x_1 x_2$ 求偏导数，因为咱们前面讲过，多元函数高阶偏导数和顺序无关，所以 Hessian 矩阵是对称矩阵。

6.2、实例演示Hessian矩阵

$$f(x, y, z) = 3x^2 - 4xy + y^2 - 3z^2$$

首先求函数 $f(x, y, z)$ 的一阶偏导数：

- $f'x = 6x - 4y$
- $f'y = -4x + 2y$
- $f'z = -6z$

然后求解Hessian矩阵：

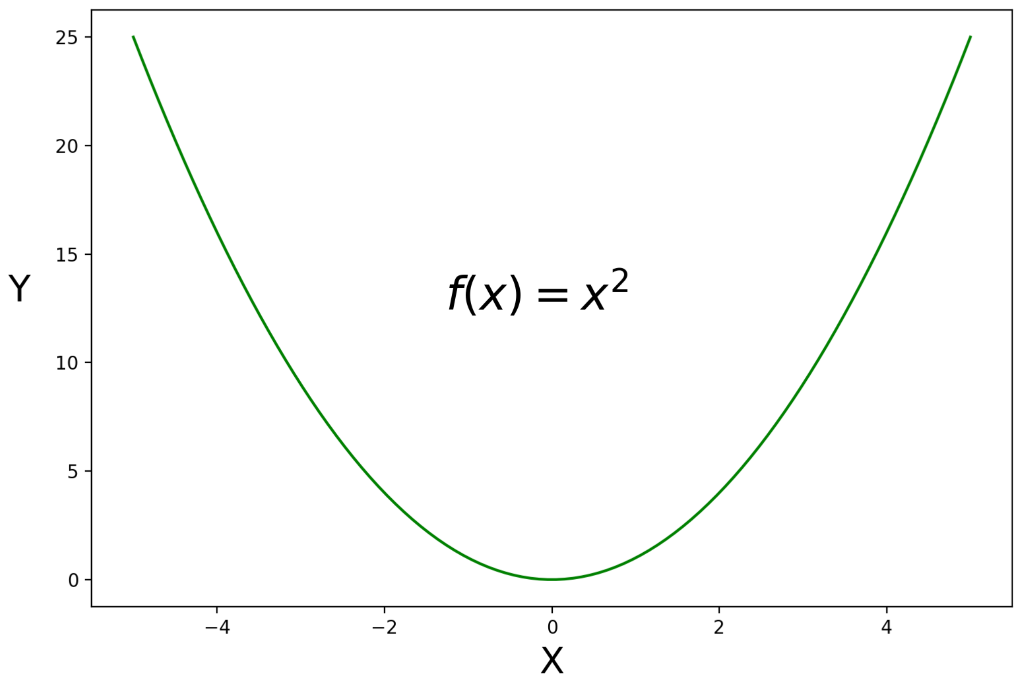
$$\begin{bmatrix} 6, & -4, & 0 \\ -4, & 2, & 0 \\ 0, & 0, & -6 \end{bmatrix}$$

Hessian 矩阵和函数的凹凸性是有密切关系的，如果 Hessian 矩阵**正定**，可以说函数 $f(x)$ 是**凸函数**，如果是**负定**，它就是**凹函数** 。矩阵正定是如何判定的呢？

7、极值判别法则

7.1、极值判定条件

对于一元函数，我们前面讲过， $f(x)$ 的一阶导数等于 0 处有极值，当 $f(x)$ 的二阶导数大于 0 时是**极小值**，当 $f(x)$ 的二阶导数小于 0 时是**极大值**，可以参考 $f(x) = x^2$ 的平方这个函数，其二阶导数是 $f''(x) = 2 > 0$ ，那么该函数是凸函数。



多元函数的极值判别法则，首先 $f(x)$ 的一阶导数等于 0，这点是**驻点**，那它就可能是**极值点**，它是极大值还是极小值或者不是极值怎么判定的？

看 Hessian 矩阵，在 $f(x)$ 的一阶导数等于 0 处，就是驻点处。

- 如果 Hessian 矩阵是**正定**的话，函数在该点有**极小值**；
- 如果 Hessian 矩阵是**负定**的话，函数在该点有**极大值**；
- 如果 Hessian 矩阵不定，函数在该点不是极值；

7.2、实对称矩阵正定负定判定

实对称矩阵 A 正定负定判定条件：

- 对于任意向量 $\vec{v} \neq 0$，都有 $\vec{v}^T A \vec{v} > 0$ ，那么 A 就是正定矩阵；
- 对于任意向量 $\vec{v} \neq 0$，都有 $\vec{v}^T A \vec{v} < 0$ ，那么 A 就是负定矩阵；

实对称矩阵 A 负定，代码演示：

```python
import numpy as np
A = np.array([[-2,-3,-1],
              [-3,-6,-4],
              [-1,-4,-5]])
v = np.array([3,5,6])
print('给定向量任意向量v: ',v)
print('求解矩阵A正定判定条件结果是: ',v.dot(A).dot(v))
'''
给定向量任意向量v:  [3 5 6]
求解矩阵A正定判定条件结果是:  -714
'''
```

实对称矩阵 A 正定，代码演示：

```python
import numpy as np
A = np.array([[5,1,-4],
              [1,3,-2],
              [-4,-2,7]])
v = np.array([-5,2,-3])
print('给定向量任意向量v: ',v)
print('求解矩阵A正定判定条件结果是: ',v.dot(A).dot(v))
'''
给定向量任意向量v:  [ 2 -3 -5]
求解矩阵A正定判定条件结果是:  128
'''
```

但是这样不太容易判断，我们还可以根据**特征值**正负去判断矩阵正定与否：

- 矩阵 A 的特征值全部大于 0，那么矩阵 A 为正定矩阵；
- 矩阵 A 的特征值全部小于 0，那么矩阵 A 为负定矩阵；

实对称矩阵 A 负定，特征值代码演示：

```python
import numpy as np
A = np.array([[-2,-3,-1],
              [-3,-6,-4],
              [-1,-4,-5]])
w,v = np.linalg.eig(A)
print('矩阵A的特征值特征向量是: ')
display(w,v)
'''
矩阵A的特征值特征向量是:
array([-10.54287655,  -0.03922866,  -2.41789479])
array([[ 0.32798528,  0.73697623, -0.59100905],
       [ 0.73697623, -0.59100905, -0.32798528],
       [ 0.59100905,  0.32798528,  0.73697623]])
'''
```

实对称矩阵 A 正定，特征值代码演示：

```python
import numpy as np
A = np.array([[5,1,-4],
              [1,3,-2],
              [-4,-2,7]])
w,v = np.linalg.eig(A)
print('矩阵A的特征值特征向量是: ')
```

```
display(w,v)
'''
矩阵A的特征值特征向量是:
array([10.74515039,  1.63251546,  2.62233415])
array([[-0.58123713, -0.60851363, -0.54025416],
       [-0.27299496, -0.4796241 ,  0.83392714],
       [ 0.76657495, -0.63219608, -0.11265418]])
'''
```

8、二次型

8.1、二次型定义

二次型就是纯二次项构成的一个函数。

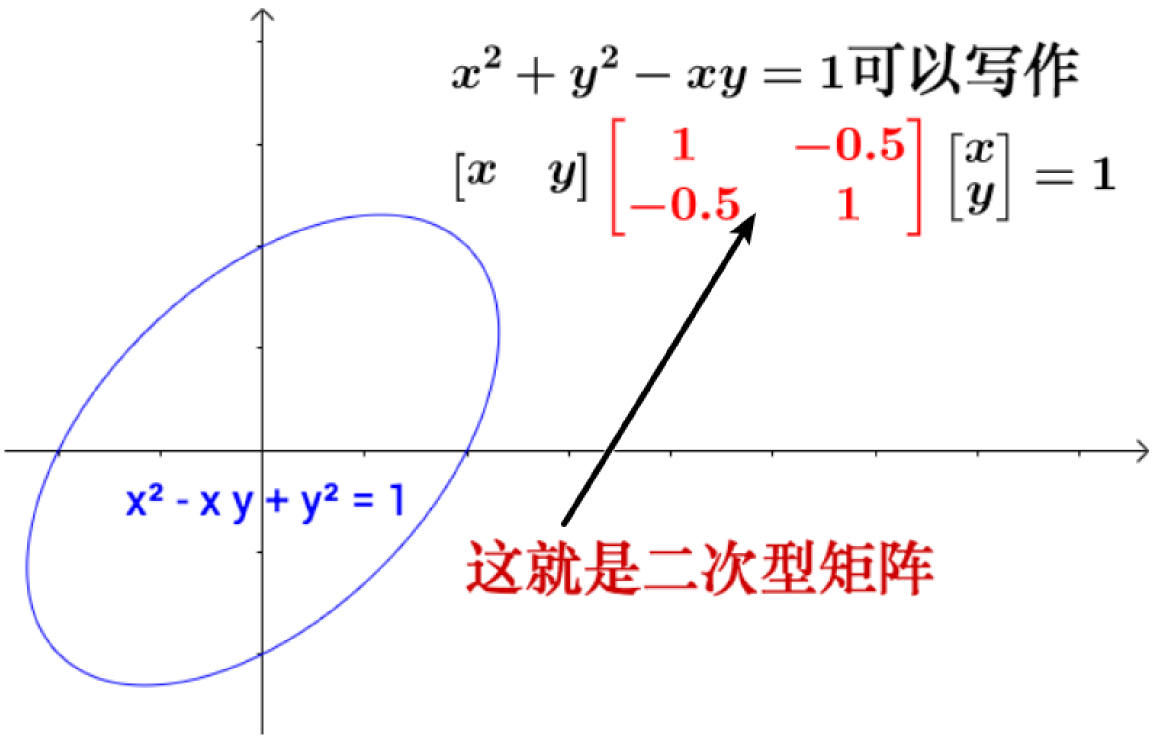
因为二次函数(方程)的二次部分最重要，为了方便研究，我们把含有 n 个变量的二次齐次函数:

$$f(x_1, x_2, \cdots, x_n) = a_{11}x_1^2 + a_{22}x_2^2 + \cdots + a_{nn}x_n^2 + 2a_{12}x_1x_2 + 2a_{13}x_1x_3 + \cdots + 2a_{n-1,n}x_{n-1}x_n$$

称为二次型。

8.2、二次型表示

我们可以通过矩阵来进行表示



二次型**通俗**表现形式:

$$ax^2+2bxy+cy^2\text{可以写作}$$

$$\begin{bmatrix} x & y \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a & b \\ b & c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = 1$$

二次型**矩阵**表示：

$$\left.\begin{aligned} \begin{bmatrix} x & y \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a & b \\ b & c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} &= 1 \\ \mathbf{v} &= \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} \\ A &= \begin{bmatrix} a & b \\ b & c \end{bmatrix} \end{aligned}\right\} \Longrightarrow \mathbf{V}^{\mathsf{T}}A\mathbf{V}$$

n 个变量的二次齐次函数矩阵表示：

$$f(x_1,x_2,\cdots,x_n)=a_{11}x_1^2+a_{22}x_2^2+\cdots+a_{nn}x_n^2+2a_{12}x_1x_2+2a_{13}x_1x_3+\cdots+2a_{n-1,n}x_{n-1}x_n$$

$$x^TAx$$

$$[x_1,x_2,\cdots,x_n]\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1} & a_{n2}\cdots & & a_{nn} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \cdots \\ x_n \end{bmatrix}$$

8.3、二次型应用

在机器学习中，我们可以根据数据分布进行模型选择：

- 如果数据分布是一次型的，那我们就可以选择 Logistic Regression、SVM 等分界面为一次型的模型；
- 如果数据分布是二次型的，我们可以选择 naive bayes；

- 如果数据分布既不是一次型也不是二次型，那我们可以选择基于决策树的模型，例如 GBDT、随机森林等，或者 DNN（深度神经网络），这些模型都高度非线性，表达能力极强理论上可以拟合任意曲线。

8.4、Hessian矩阵与二次型

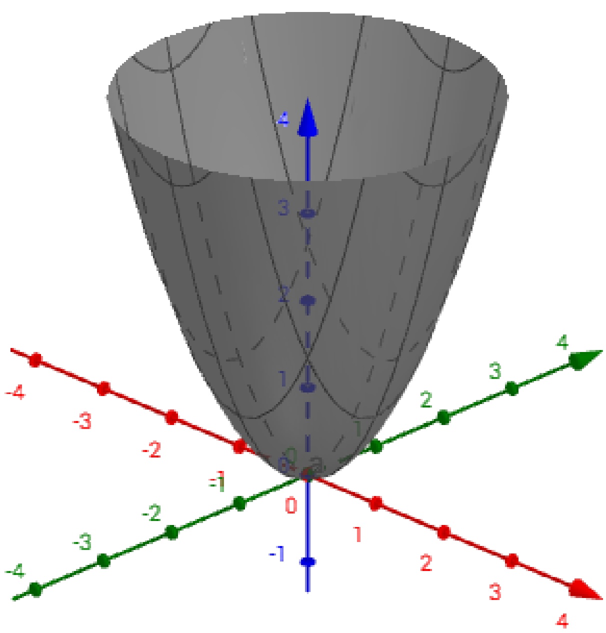
$$A=\begin{bmatrix}\frac{\partial^2 f}{\partial^2 x_1}, & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2}, & \cdots, & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_1}, & \frac{\partial^2 f}{\partial^2 x_2}, & \cdots, & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_n} \\ \cdots, & \cdots, & \cdots, & \cdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1}, & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_2}, & \cdots, & \frac{\partial^2 f}{\partial^2 x_n}\end{bmatrix}$$

将Hessian矩阵 A 转换为二次型：

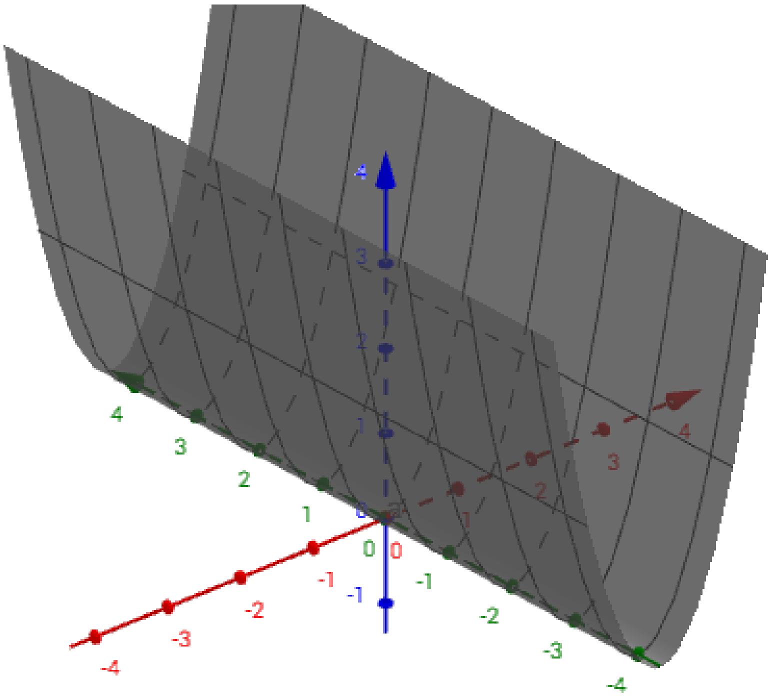
$f(x)=\vec{x}^T A\vec{x}$，其中 $\vec{x}$ 表示非零任意向量

- $f(x)>0, \quad \vec{x}\neq 0, \quad x\in R$，则 $f(x)$ 为正定二次型，A为正定矩阵
- $f(x)\geq 0, \quad \vec{x}\neq 0, \quad x\in R$，则 $f(x)$ 为半正定二次型，A为半正定矩阵
- $f(x)<0, \quad \vec{x}\neq 0, \quad x\in R$，则 $f(x)$ 为负定二次型，A为负定矩阵
- $f(x)\leq 0, \quad \vec{x}\neq 0, \quad x\in R$，则 $f(x)$ 为半负定二次型，A为半负定矩阵
- 以上皆不是，就叫做不定

正定效果图，如下所示：



半正定效果图，如下：



不定效果图，如下：