Định nghĩa 1. Một ánh xạ $f: D \subset \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ gắn mỗi vector $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n) \in D$ một số thực

$$y = f(\boldsymbol{x}) = f(x_1, x_2, \dots, x_n) \in \mathbb{R},$$

được gọi là một **hàm số thực** (real-value function) với n **biến thực** (real variable) trên **miền xác định** (domain) D.

- Nếu $n = 1$, f được gọi là hàm số (một biến) (real function).
- Nếu $n = 2$, f được gọi là hàm số hai biến (function of two variables).
- Nếu n là "nhiều", f được gọi là hàm số nhiều biến (function of several variables).

Ví dụ 2. $f: \mathbb{R}^2 \longrightarrow \mathbb{R}$ xác định bởi

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

là một hàm số hai biến. Ta có $f(0, y) = -2y^2, f(x, 0) = x^3, f(1, 1) = 0$.

Định nghĩa 3. Cho $f: \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ có đạo hàm liên tục tới cấp 2 và $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$, **vector gradient** (gradient vector) và **ma trận Hess** (Hessian matrix) của f tại $\boldsymbol{x}$, kí hiệu lần lượt là $\nabla f(\boldsymbol{x})$ và $\nabla^2 f(\boldsymbol{x})$,[i] được xác định bởi

$$\nabla f(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1}(\boldsymbol{x}) \\ \frac{\partial f}{\partial x_2}(\boldsymbol{x}) \\ \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial x_n}(\boldsymbol{x}) \end{bmatrix} \text{ và } \nabla^2 f(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_1}(\boldsymbol{x}) & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_1}(\boldsymbol{x}) & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1}(\boldsymbol{x}) \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2}(\boldsymbol{x}) & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_2}(\boldsymbol{x}) & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_2}(\boldsymbol{x}) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n}(\boldsymbol{x}) & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_n}(\boldsymbol{x}) & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_n}(\boldsymbol{x}) \end{bmatrix}.$$

Mệnh đề 4. $\nabla^2 f(\boldsymbol{x})$ là ma trận đối xứng (khi f có đạo hàm liên tục tới cấp 2).

Ví dụ 5 (tiếp Ví dụ 2). Với $f(x, y) = x^3 + x^2y^3 - 2y^2$ thì

$$\nabla f(x, y) = \begin{bmatrix} 3x^2 + 2xy^3 \\ 3x^2y^2 - 4y \end{bmatrix} \text{ và } \nabla^2 f(x, y) = \begin{bmatrix} 6x + 2y^3 & 6xy^2 \\ 6xy^2 & 6x^2y - 4 \end{bmatrix}.$$

Tại $(1, 1)$ ta có

$$\nabla f(1, 1) = \begin{bmatrix} 5 \\ -1 \end{bmatrix} \text{ và } \nabla^2 f(1, 1) = \begin{bmatrix} 8 & 6 \\ 6 & 2 \end{bmatrix}.$$

Định nghĩa 6. Cho $\boldsymbol{a} = (a_1, a_2, \dots, a_n) \in \mathbb{R}^n$, hàm số $f: \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ được xác định bởi

$$f(\boldsymbol{x}) = f(x_1, x_2, \dots, x_n) = \boldsymbol{a}^T \boldsymbol{x} = [a_1 \quad a_2 \quad \dots \quad a_n] \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \sum_{i=1}^{n} a_i x_i,$$

được gọi là một **dạng tuyến tính** (linear form) với $\boldsymbol{a}$ là vector xác định dạng.

Hơn nữa, cho $b \in \mathbb{R}$, hàm số $f: \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ được xác định bởi

$$f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{a}^T \boldsymbol{x} + b = b + \sum_{i=1}^{n} a_i x_i,$$

được gọi là một **hàm affine** (affine function).

Mệnh đề 7. Nếu $f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{a}^T\boldsymbol{x} + b$ là một hàm affine thì

$$\nabla f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{a} \text{ và } \nabla^2 f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0} \in \mathbb{R}^{n\times n}.$$

Ví dụ 8. Cho $f: \mathbb{R}^3 \longrightarrow \mathbb{R}$ với

$$f(x_1, x_2, x_3) = 3x_3 - x_1$$

thì f là dạng tuyến tính với vector xác định dạng $\boldsymbol{a} = (-1, 0, 3) \in \mathbb{R}^3$. Cụ thể

$$f(x_1, x_2, x_3) = 3x_3 - x_1 = -x_1 + 0x_2 + 3x_3 = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \boldsymbol{a}^T\boldsymbol{x}.$$

Dễ thấy

$$\nabla f(x_1, x_2, x_3) = \begin{bmatrix} -1 \\ 0 \\ 3 \end{bmatrix} = \boldsymbol{a} \text{ và } \nabla^2 f(x_1, x_2, x_3) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} = \boldsymbol{0}.$$

Định nghĩa 9. Cho $f: \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ có đạo hàm và $\boldsymbol{z} = (z_1, z_2, \dots, z_n) \in \mathbb{R}^n$, **xấp xỉ Taylor bậc nhất** (first-order Taylor approximation) của f tại $\boldsymbol{z}$ là hàm affine $\hat{f}: \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ được xác định bởi

$$\hat{f}(\boldsymbol{x}) = f(\boldsymbol{z}) + \nabla f(\boldsymbol{z})^T(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{z}) = \nabla f(\boldsymbol{z})^T\boldsymbol{x} + (f(\boldsymbol{z}) - \nabla f(\boldsymbol{z})^T\boldsymbol{z}).$$

Ví dụ 10 (tiếp Ví dụ 5). Với $f(x, y) = x^3 + x^2y^3 - 2y^2$ và $\boldsymbol{z} = (1, 1)$, ta có $f(\boldsymbol{z}) = 0, \nabla f(\boldsymbol{z}) = \begin{bmatrix} 5 \\ -1 \end{bmatrix}$. Xấp xỉ Taylor bậc nhất của f tại $\boldsymbol{z}$ là hàm affine

$$\hat{f}(\boldsymbol{x}) = \hat{f}(x, y) = \nabla f(\boldsymbol{z})^T\boldsymbol{x} + (f(\boldsymbol{z}) - \nabla f(\boldsymbol{z})^T\boldsymbol{z}) = \begin{bmatrix} 5 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} + \left(0 - \begin{bmatrix} 5 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}\right) = 5x - y - 4.$$

Dùng $\hat{f}$ ta có giá trị xấp xỉ cho f tại $(0.9, 1.1)$ là

$$\hat{f}(0.9, 1.1) = 5 \times 0.9 - 1.1 - 4 = -0.6 \approx f(0.9, 1.1) = -0.61289.$$

Định nghĩa 11. Cho $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ là ma trận đối xứng ($A^T = A$), hàm số $f: \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ được xác định bởi

$$f(\boldsymbol{x}) = f(x_1, x_2, \dots, x_n) = \boldsymbol{x}^T A\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & \dots & x_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_ix_j,$$

được gọi là một **dạng toàn phương** (quadratic form) với A là ma trận xác định dạng.

Mệnh đề 12. Nếu $f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x}^T A\boldsymbol{x}$ là dạng toàn phương thì

$$\nabla f(\boldsymbol{x}) = 2A\boldsymbol{x} \text{ và } \nabla^2 f(\boldsymbol{x}) = 2A.$$

Ví dụ 13. Cho $f: \mathbb{R}^3 \longrightarrow \mathbb{R}$ với

$$f(x_1, x_2, x_3) = x_1^2 - x_3^2 + 2x_1x_3 + 4x_2x_3$$

thì f là dạng toàn phương với ma trận xác định dạng $A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 2 \\ 1 & 2 & -1 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{3\times 3}$. Cụ thể

$$f(x_1, x_2, x_3) = x_1^2 - x_3^2 + 2x_1x_3 + 4x_2x_3 = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & x_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 2 \\ 1 & 2 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \boldsymbol{x}^T A \boldsymbol{x}.$$

Dễ thấy

$$\nabla f(x_1, x_2, x_3) = \begin{bmatrix} 2x_1 + 2x_3 \\ 4x_3 \\ 2x_1 + 4x_2 - 2x_3 \end{bmatrix} = 2 \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 2 \\ 1 & 2 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = 2A\boldsymbol{x},$$

$$\nabla^2 f(x_1, x_2, x_3) = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 4 \\ 2 & 4 & -2 \end{bmatrix} = 2A.$$

Định nghĩa 14. Cho $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ là ma trận đối xứng ($A^T = A$), ta nói

- A **xác định dương** (positive definite), kí hiệu $A > 0$, nếu $\boldsymbol{x}^T A \boldsymbol{x} > 0$ với mọi $\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}$,
- A **nửa xác định dương** (positive semi-definite), kí hiệu $A \geq 0$, nếu $\boldsymbol{x}^T A \boldsymbol{x} \geq 0$ với mọi $\boldsymbol{x}$,
- A **xác định âm** (negative definite), kí hiệu $A < 0$, nếu $\boldsymbol{x}^T A \boldsymbol{x} < 0$ với mọi $\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}$,
- A **nửa xác định âm** (negative semi-definite), kí hiệu $A \leq 0$, nếu $\boldsymbol{x}^T A \boldsymbol{x} \leq 0$ với mọi $\boldsymbol{x}$,
- A **không xác định** (indefinite) nếu có $\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2$ sao cho $\boldsymbol{x}_1^T A \boldsymbol{x}_1 > 0, \boldsymbol{x}_1^T A \boldsymbol{x}_1 < 0$.

Mệnh đề 15. Cho $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ là ma trận đối xứng ($A^T = A$),

- $A > 0$ khi và chỉ khi tất cả các trị riêng của A đều dương,
- $A \geq 0$ khi và chỉ khi tất cả các trị riêng của A đều không âm,
- $A < 0$ khi và chỉ khi tất cả các trị riêng của A đều âm,
- $A \leq 0$ khi và chỉ khi tất cả các trị riêng của A đều không dương,
- A không xác định khi và chỉ khi A có trị riêng dương và có trị riêng âm.

Ví dụ 16. Cho ma trận đối xứng

$$A = \begin{bmatrix} 3 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 2 \\ 1 & 2 & 0 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{3\times 3}.$$

Dạng toàn phương xác định bởi A là

$$f(\boldsymbol{x}) = f(x_1, x_2, x_3) = \boldsymbol{x}^T A \boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & x_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 2 \\ 1 & 2 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = 3x_1^2 + 2x_1x_2 + 2x_1x_3 + 4x_2x_3.$$

Vì $f(0, 1, 1) = 4 > 0$ và $f(0, 1, -1) = -4 < 0$ nên A không xác định.

Cách khác, ta có các trị riêng của A là $1, 4, -2$ nên A không xác định do có trị riêng dương (1) và có trị riêng âm (-2).

---

[i] Kí hiệu ∇, nabla, đọc là “del”.