

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

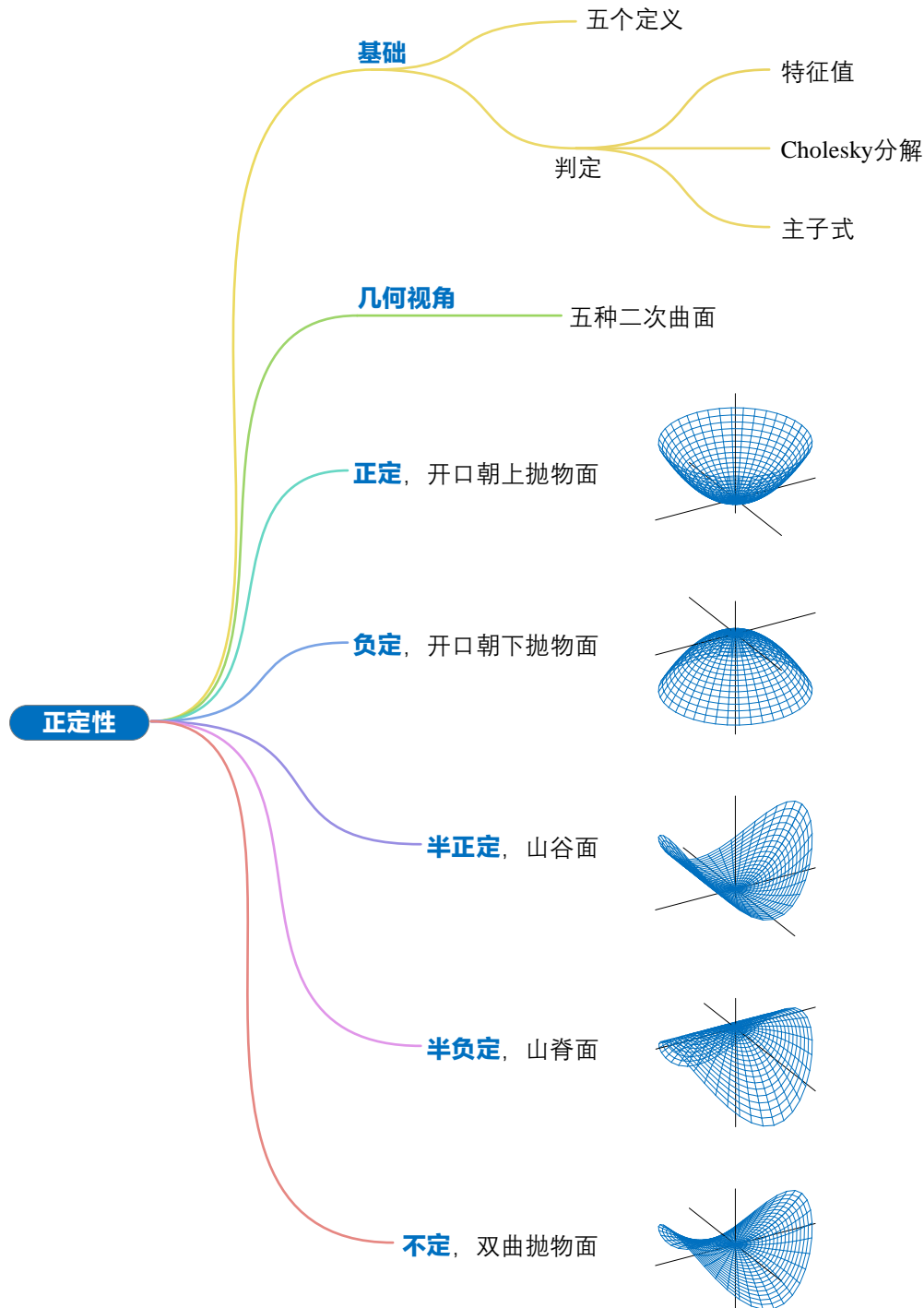
本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。

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



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

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

$$\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} > 0 \quad (1)$$

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

当 $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$ 时，

$$\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} \geq 0 \quad (2)$$

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

当 $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$ 时，

$$\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} < 0 \quad (3)$$

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

当 $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$ 时，

$$\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} \leq 0 \quad (4)$$

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

矩阵 \mathbf{A} 不属于以上任何一种情况， \mathbf{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 A 为正定矩阵，对 A 进行 Cholesky 分解，得到：

$$A = R^T R \quad (5)$$

利用 (5)，将 $x^T A x$ 写成如下形式：

$$x^T A x = x^T R^T R x = (R x)^T R x = \|R x\|^2 \quad (6)$$

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

特征值分解

对称矩阵 A 进行特征值分解得到：

$$A = V \Lambda V^T \quad (7)$$

将 (7) 代入 $x^T A x$ ，得到：

$$\begin{aligned} x^T A x &= x^T V \Lambda V^T x \\ &= \begin{pmatrix} V^T x \\ z \end{pmatrix}^T \Lambda \begin{pmatrix} V^T x \\ z \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (8)$$

令：

$$z = V^T x \quad (9)$$

(8) 可以写成：

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

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

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

格拉姆矩阵

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

将 $\mathbf{x}^T G \mathbf{x}$ 写成如下形式：

$$\mathbf{x}^T G \mathbf{x} = \mathbf{x}^T X^T X \mathbf{x} = \|X\mathbf{x}\|^2 \geq 0 \quad (11)$$

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

$$A = \begin{bmatrix} a & b \\ b & c \end{bmatrix} \quad (12)$$

构造如下二元函数 $y = f(x_1, x_2)$ ：

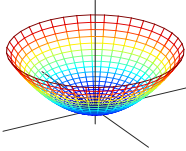
$$y = f(x_1, x_2) = \mathbf{x}^T A \mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a & b \\ b & c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = ax_1^2 + 2bx_1x_2 + cx_2^2 \quad (13)$$

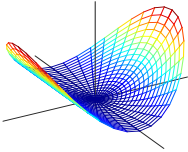
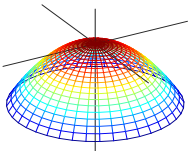
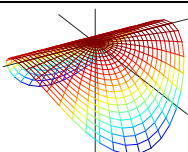
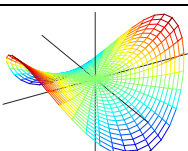
在三维正交空间中，当矩阵 $A_{2 \times 2}$ 正定性不同时， $y = f(x_1, x_2)$ 对应曲面展现出不同的形状：

- ◀ 当 $A_{2 \times 2}$ 为正定矩阵时， $y = f(x_1, x_2)$ 为开口向上抛物面；
- ◀ 当 $A_{2 \times 2}$ 为半正定矩阵时， $y = f(x_1, x_2)$ 为山谷面；
- ◀ 当 $A_{2 \times 2}$ 为负定矩阵时， $y = f(x_1, x_2)$ 为开口向下抛物面；
- ◀ 当 $A_{2 \times 2}$ 为半负定矩阵时， $y = f(x_1, x_2)$ 为山脊面；
- ◀ 当 $A_{2 \times 2}$ 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 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

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

$A_{D \times D}$ 为半正定矩阵, 秩为 r $\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} \geq 0, \mathbf{x} \neq \mathbf{0}$	r 个正特征值, $D-r$ 个特征值为 0	
$A_{D \times D}$ 为负定矩阵 $\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} < 0$	D 个特征值均为负值	
$A_{D \times D}$ 为半负定矩阵, 秩为 r $\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} \leq 0$	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：

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (14)$$

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

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

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

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：

$$\mathbf{v}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{v}_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (16)$$

计算矩阵 A 的秩， $\text{rank}(A) = 2$ 。

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。

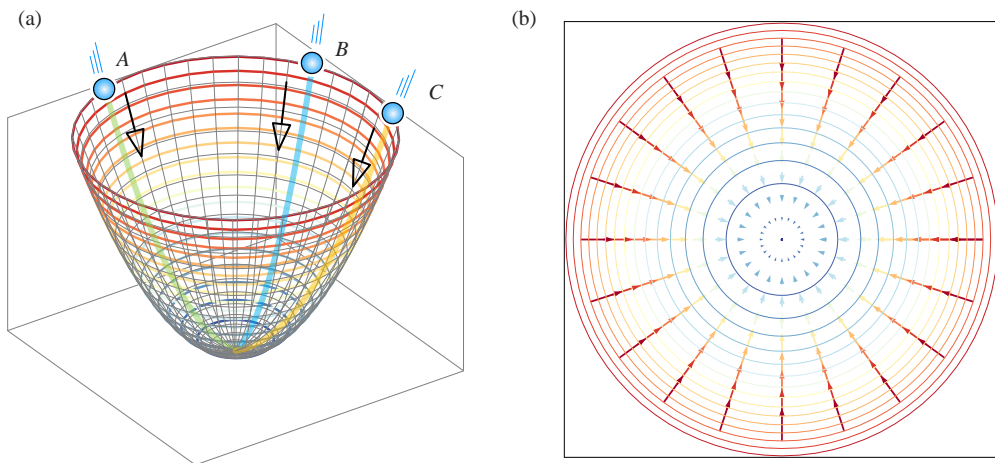


图 1. 正定矩阵曲面和梯度下降，正圆抛物面，箭头指向下山方向

(15) 的梯度向量为：

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} 2x_1 \\ 2x_2 \end{bmatrix} \quad (17)$$

而 (15) 的梯度下降向量就是上式中梯度向量反向：

$$-\nabla f(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} -2x_1 \\ -2x_2 \end{bmatrix} \quad (18)$$

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 $\mathbf{0}$ 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 \mathbf{A} 具体值如下：

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix} \quad (19)$$

同样，构造二元函数 $y = f(x_1, x_2)$ ，具体如下：

$$y = f(x_1, x_2) = \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = x_1^2 + 2x_2^2 \quad (20)$$

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。

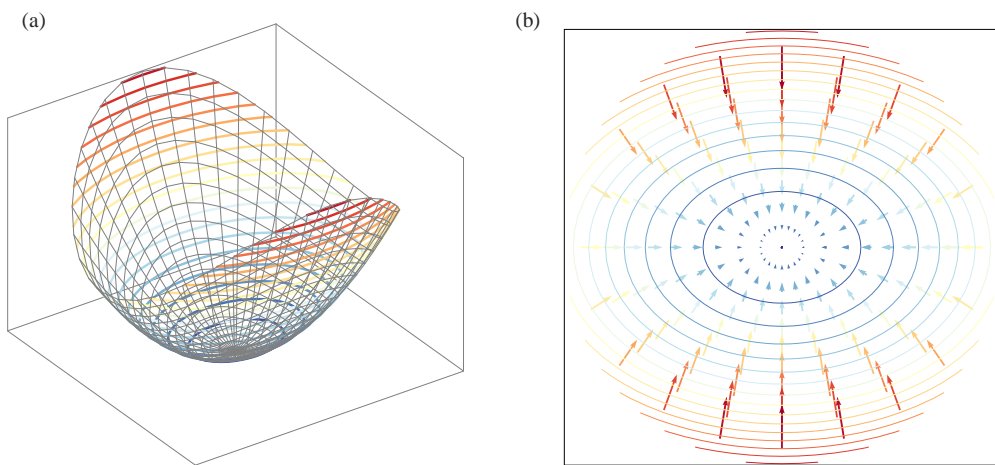


图 2. 正定矩阵曲面和梯度下降，正椭圆抛物面，箭头指向下山方向

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

$$\mathbf{v}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{v}_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (21)$$

(15) 的梯度向量为：

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f}{\partial x_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2x_1 \\ 4x_2 \end{bmatrix} \quad (22)$$

梯度向量为 $\mathbf{0}$ 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。 A 矩阵具体如下：

$$A = \begin{bmatrix} 1.5 & 0.5 \\ 0.5 & 1.5 \end{bmatrix} \quad (23)$$

构造函数 $y = f(x_1, x_2)$ ：

$$y = f(x_1, x_2) = \mathbf{x}^T A \mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1.5 & 0.5 \\ 0.5 & 1.5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = 1.5x_1^2 + x_1x_2 + 1.5x_2^2 \quad (24)$$

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 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：

$$\mathbf{v}_1 = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{v}_2 = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix} \quad (25)$$

(24) 梯度向量为：

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f}{\partial x_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3x_1 + x_2 \\ x_1 + 3x_2 \end{bmatrix} \quad (26)$$

$y = f(x_1, x_2)$ 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 $\sqrt{2}/1$ 。

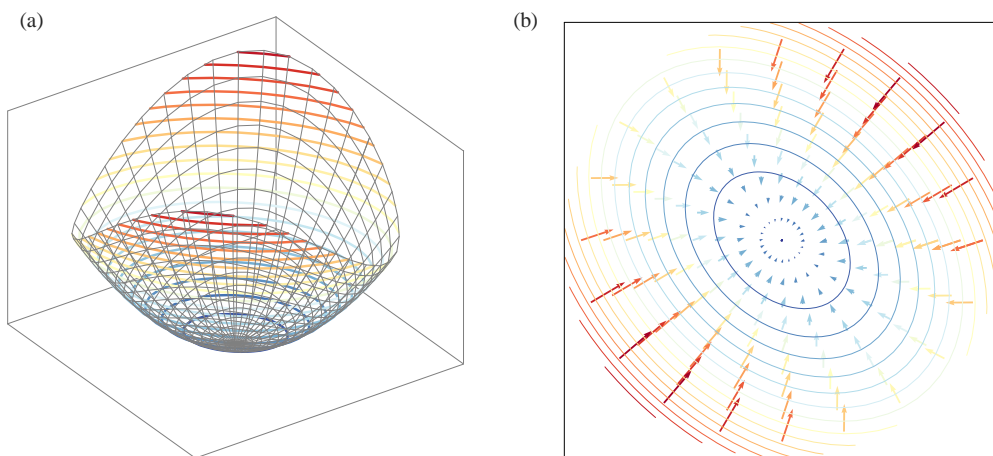
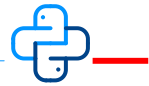


图 3. 正定矩阵曲面和梯度下降，开口向上旋转椭圆抛物面，箭头指向下山方向



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 A 取值如下：

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (27)$$

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

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

$x_1 = 0$ 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：

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f}{\partial x_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2x_1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (29)$$

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 $\mathbf{0}$ ，它们都是函数 $y = f(x_1, x_2)$ 极小值。

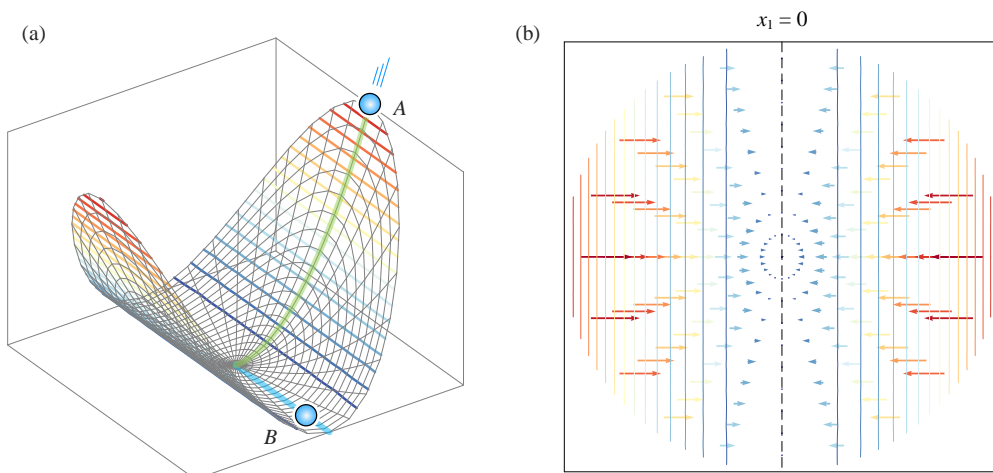


图 4. 半正定矩阵对应曲面，箭头指向下山方向

旋转山谷面

下式中矩阵 A 也是半正定矩阵：

$$A = \begin{bmatrix} 0.5 & -0.5 \\ -0.5 & 0.5 \end{bmatrix} \quad (30)$$

构造函数 $y = f(x_1, x_2)$ ：

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

(31) 配方得到：

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

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 A 特征值为 $\lambda_1 = 0$ 和 $\lambda_2 = 1$ ，对应特征向量如下：

$$\mathbf{v}_1 = \begin{bmatrix} -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{v}_2 = \begin{bmatrix} -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix} \quad (33)$$

图 5 展示 (31) 对应的旋转山谷面。同样，小球沿图 5 中 \mathbf{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：

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f}{\partial x_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 - x_2 \\ -x_1 + x_2 \end{bmatrix} \quad (34)$$

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。

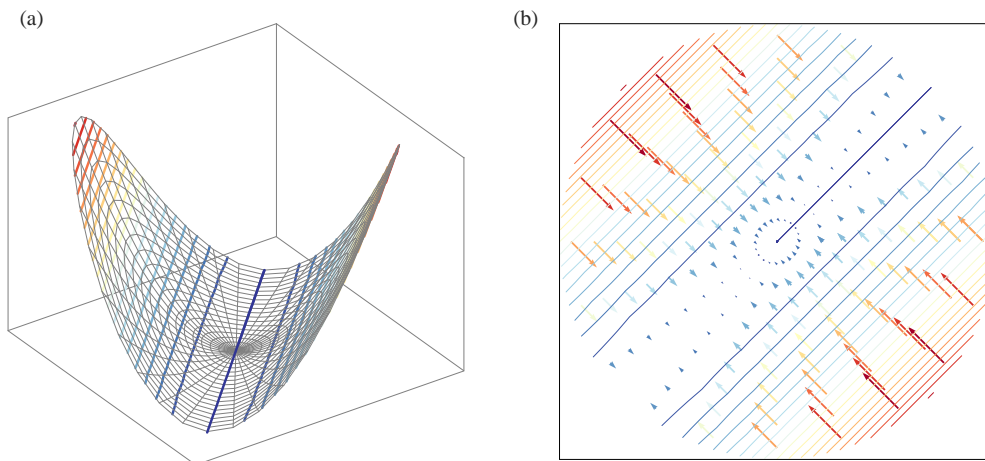


图 5. 旋转山谷面，箭头指向下山方向

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 $-I$ 。 $-I$ 的特征值都为 -1 。

下面也用 2×2 矩阵讨论负定。如下 A 为负定矩阵：

$$A = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -2 \end{bmatrix} \quad (35)$$

构造如下二元函数 $y = f(x_1, x_2)$ ：

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

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 A 特征值分别为 $\lambda_1 = -2$ 和 $\lambda_2 = -1$ ，对应特征向量分别为：

$$\mathbf{v}_1 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{v}_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (37)$$

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：

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f}{\partial x_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2x_1 \\ -4x_2 \end{bmatrix} \quad (38)$$

如图 6 所示，梯度下降向量指向均背离最大值点。

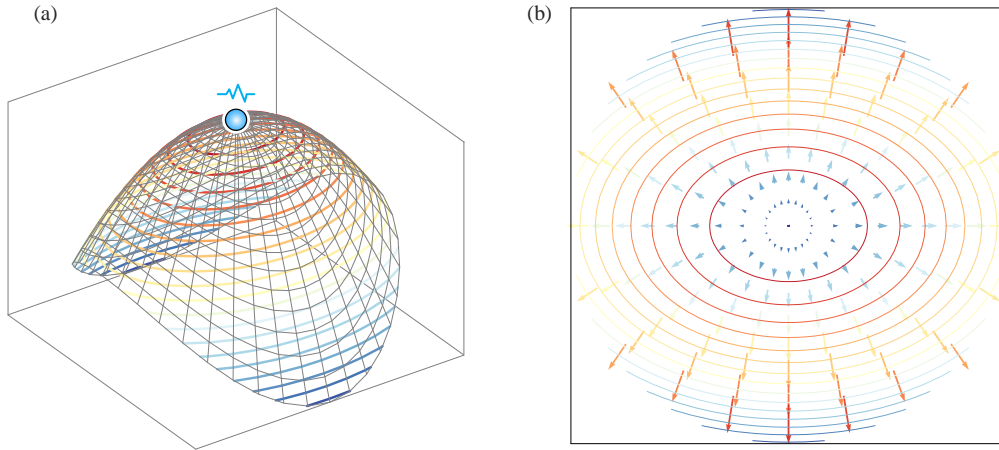


图 6. 负定矩阵对应曲面，箭头指向下山方向

21.6 山脊面：半负定

下面看一个半负定矩阵例子，矩阵 A 取值如下：

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (39)$$

构造 $y = f(x_1, x_2)$ ：

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

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

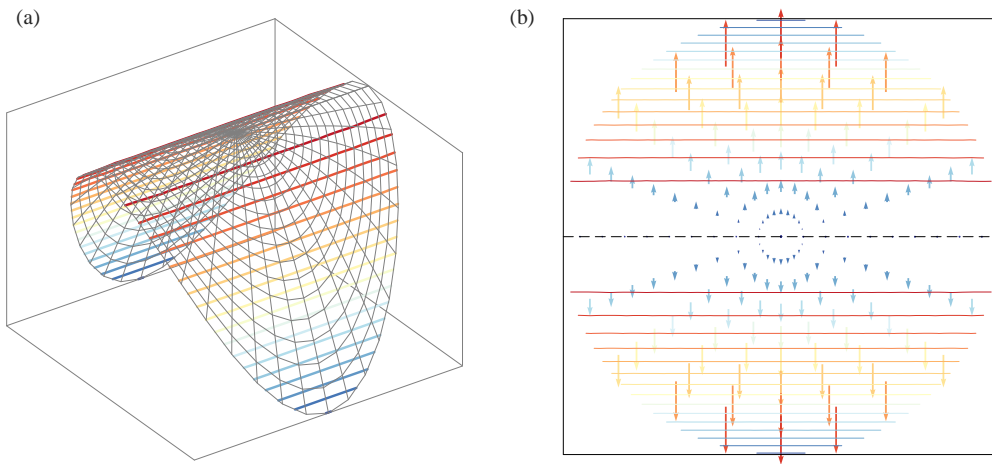


图 7. 半负定矩阵对应山脊面，箭头指向下山方向

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：

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f}{\partial x_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ -2x_2 \end{bmatrix} \quad (41)$$

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， \mathbf{A} 为：

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (42)$$

构造函数 $y = f(x_1, x_2)$ ：

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

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

$$\mathbf{v}_1 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{v}_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (44)$$

图 8 展示 $y = f(x_1, x_2)$ 对应曲面。

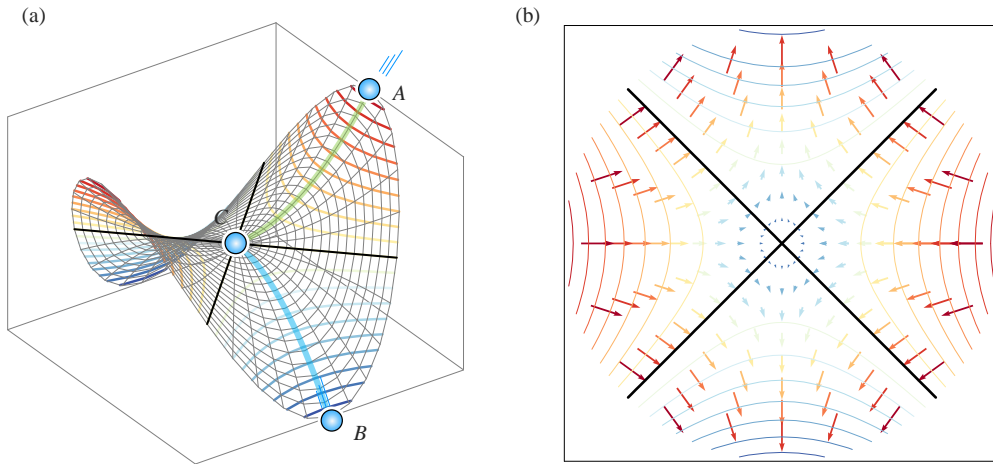


图 8. 不定矩阵对应曲面，马鞍面，箭头指向下山方向

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：

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

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之为**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 A 如下：

$$A = \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix} \quad (46)$$

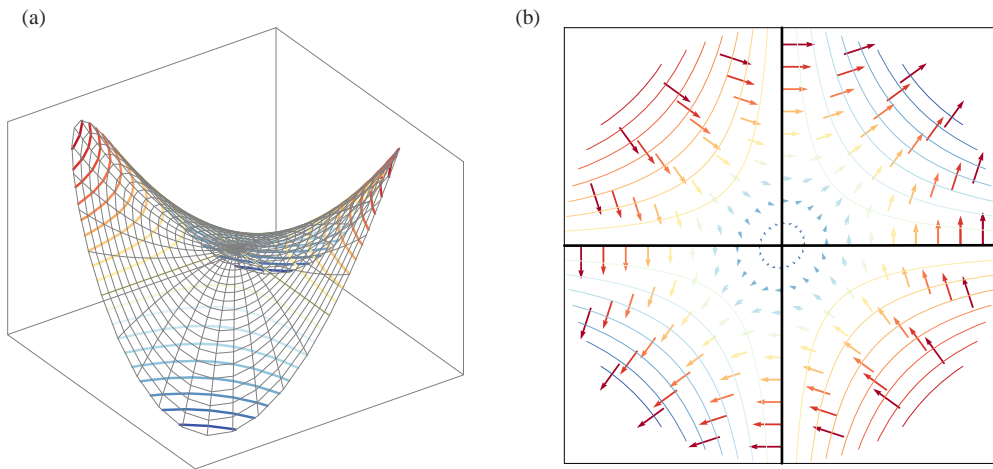


图 9. 不定矩阵对应曲面，旋转马鞍面，箭头指向下山方向

构造如下二元函数 $y = f(x_1, x_2)$:

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

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：

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f}{\partial x_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2x_2 \\ -2x_1 \end{bmatrix} \quad (48)$$

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 $f_{x_1}(x_1, x_2) = 0$ 和 $f_{x_2}(x_1, x_2) = 0$ 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。

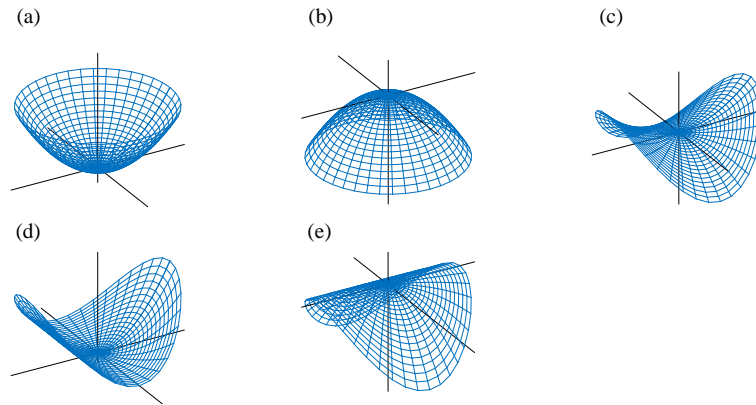


图 10. 二元函数驻点的三种情况

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，

$$A = f_{x_1 x_1}, \quad B = f_{x_1 x_2}, \quad C = f_{x_2 x_2} \quad (49)$$

$f(a, b)$ 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：

$$H = \frac{\partial^2 (\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x})}{\partial \mathbf{x} \partial \mathbf{x}^T} = 2\mathbf{A} = 2 \begin{bmatrix} a & b \\ b & c \end{bmatrix} \quad (50)$$

注意上式中 \mathbf{A} 为对称矩阵。

\mathbf{A} 的行列式值为：

$$|\mathbf{A}| = ac - b^2 \quad (51)$$

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， A 的形状为 2×2 。 A 为正定或负定时， A 的两个特征值同号，因此 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 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 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—— A 正定的充分必要条件为 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 \times 。也就是说，图中 \times 对应的位置为梯度向量为 $\mathbf{0}$ 。

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。

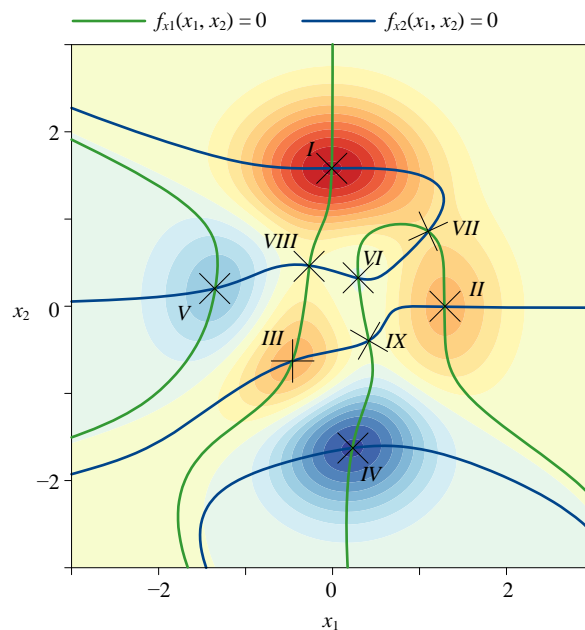


图 11. $f_{x1}(x_1, x_2) = 0$ 和 $f_{x2}(x_1, x_2) = 0$ 同时投影在 $f(x_1, x_2)$ 曲面填充等高线，来自本系列丛书《数学要素》

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。

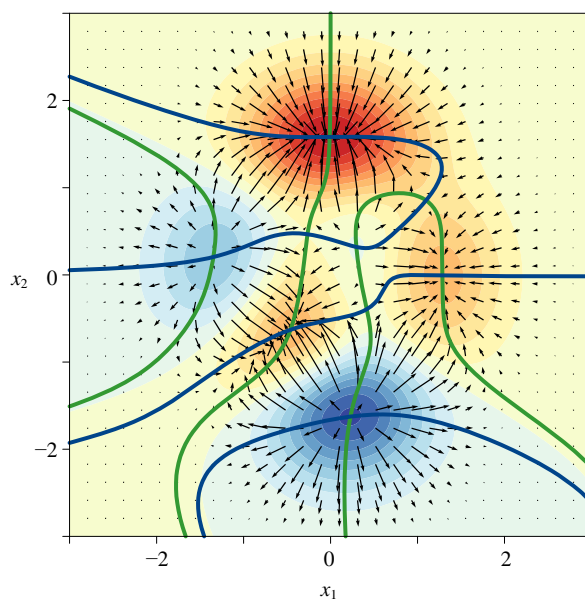
图 12. $f(x_1, x_2)$ 梯度向量图，箭头指向上山方向，即梯度向量方向

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。

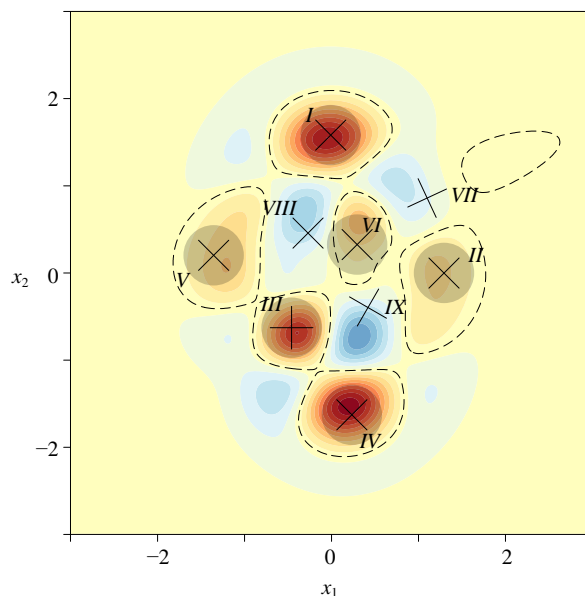


图 13. 黑塞矩阵行列式值

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 $f_{x_1x_1}$ 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。

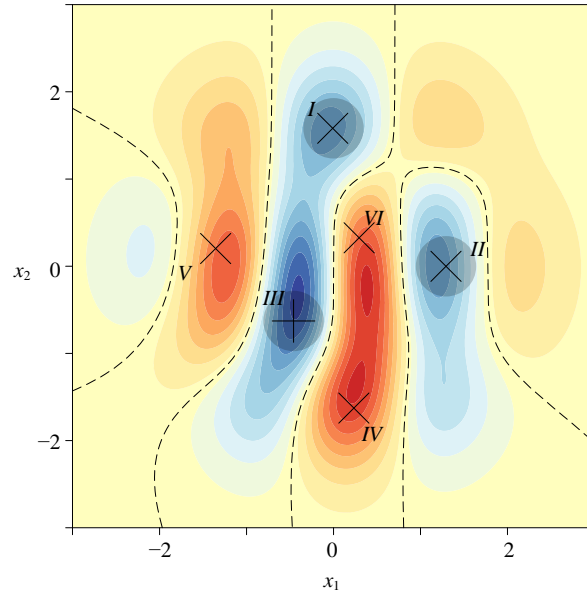


图 14. 一阶主子式正负

更一般情况

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

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}) &\approx f(\mathbf{x}_p) + \nabla f(\mathbf{x}_p)^\top (\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) + \frac{1}{2} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_p)^\top \nabla^2 f(\mathbf{x}_p) (\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) \\ &= f(\mathbf{x}_p) + \nabla f(\mathbf{x}_p)^\top \Delta \mathbf{x} + \frac{1}{2} \Delta \mathbf{x}^\top \nabla^2 f(\mathbf{x}_p) \Delta \mathbf{x} \\ &= f(\mathbf{x}_p) + \nabla f(\mathbf{x}_p)^\top \Delta \mathbf{x} + \frac{1}{2} \Delta \mathbf{x}^\top \mathbf{H} \Delta \mathbf{x} \end{aligned} \quad (52)$$

其中 \mathbf{x}_p 为展开点。

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

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

$$f(\mathbf{x}_p) + \underbrace{\nabla f(\mathbf{x}_p)^\top \Delta \mathbf{x}}_{\rightarrow 0} + \underbrace{\frac{1}{2} \Delta \mathbf{x}^\top \mathbf{H} \Delta \mathbf{x}}_{+} > f(\mathbf{x}_p) \quad (53)$$

这种情况称 \mathbf{x}_p 局部正定，对应 \mathbf{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 \geq 。

同理，如果在 \mathbf{x}_p 点处黑塞矩阵 \mathbf{H} 为负定， $\frac{1}{2} \Delta \mathbf{x}^\top \mathbf{H} \Delta \mathbf{x}$ 为负，因此：

$$f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}_p) + \underbrace{\nabla f(\mathbf{x}_p)^T \Delta \mathbf{x}}_{\rightarrow 0} + \underbrace{\frac{1}{2} \Delta \mathbf{x}^T \mathbf{H} \Delta \mathbf{x}}_{\rightarrow -} < f(\mathbf{x}_p) \quad (54)$$

我们称 \mathbf{x}_p 局部负定，对应 \mathbf{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。

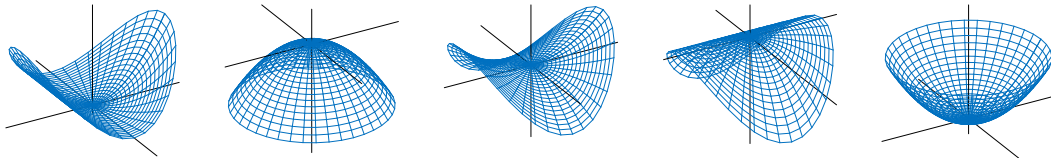


图 15. 总结本章重要内容的五幅图