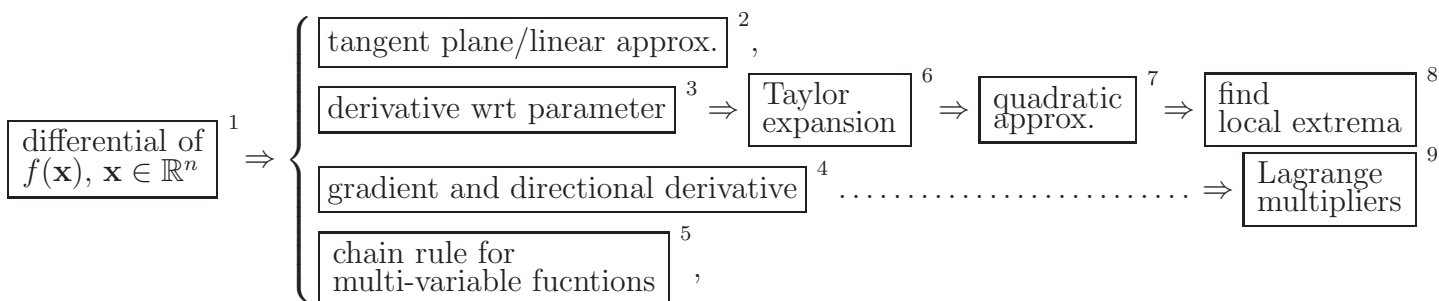


Partial Derivatives (偏導數)



- Basics: 之前學過的,

Let $\vec{u} = (u_1, u_2, u_3) \in \mathbb{R}^3$ and $\vec{v} = (v_1, v_2, v_3) \in \mathbb{R}^3$.

Inner product(內積) $\vec{u} \cdot \vec{v} := u_1v_1 + u_2v_2 + u_3v_3$, 讀作 “u dot v”;

Cross product(外積) $\vec{u} \times \vec{v} := \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ u_1 & u_2 & u_3 \\ v_1 & v_2 & v_3 \end{vmatrix}$, 讀作 “u cross v”, 其中 $\hat{i} = (1, 0, 0)$ e_1 , $\hat{j} = (0, 1, 0)$, 也記作 e_2 , $\hat{k} = (0, 0, 1)$ e_3 .

很明顯地, $(\vec{u} \times \vec{v}) \perp \vec{u}$ and \vec{v} .

若 (x_0, y_0, z_0) 是平面 \mathcal{H} 上的一點, \vec{n} 是平面 \mathcal{H} 的 normal(法向量), 則平面 \mathcal{H} 的方程式為

$\mathcal{H} : \vec{n} \cdot (x - x_0, y - y_0, z - z_0) = 0$, 意思就是: 該平面上的向量必然和該平面的 normal 垂直。

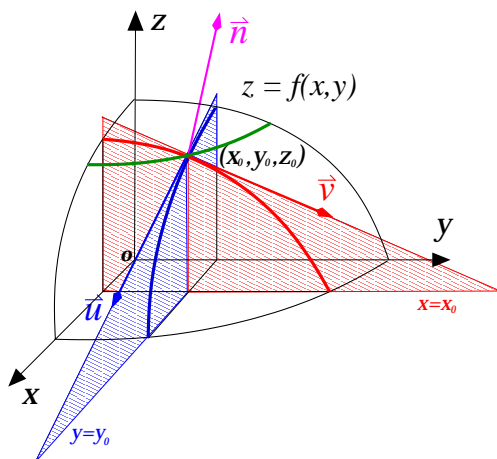


Figure 1: 沿座標平面方向的變化方式

- 假設 (x_0, y_0, z_0) 是曲面 $S : z = f(x, y)$ 上的一個點, 即 $f(x_0, y_0) = z_0$.

當以 $y = y_0$ 代入 $z = f(x, y)$, 即 $y = y_0$ 藍色平面與 $z = f(x, y)$ 曲面相交於藍色曲線, 在藍色平面上, 可以求 函數

$f(x, y)$ 在 y 固定成 y_0 時, y_0 附近的變化率: $\frac{\partial f}{\partial x}(x_0, y_0) = f_x(x_0, y_0) = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{f(x_0 + \Delta x, y_0) - f(x_0, y_0)}{\Delta x}$

\implies 切向量 $\vec{u} = (1, 0, f_x(x_0, y_0))$.

當以 $x = x_0$ 代入 $z = f(x, y)$, 即 $x = x_0$ 紅色平面與 $z = f(x, y)$ 曲面相交於紅色曲線, 在紅色平面上, 可以求 函數

$f(x, y)$ 在 x 固定成 x_0 時, x_0 附近的變化率: $\frac{\partial f}{\partial y}(x_0, y_0) = f_y(x_0, y_0) = \lim_{\Delta y \rightarrow 0} \frac{f(x_0, y_0 + \Delta y) - f(x_0, y_0)}{\Delta y}$

\implies 切向量 $\vec{v} = (0, 1, f_y(x_0, y_0))$. 所以 垂直於曲面的 normal \vec{n} 和

$$\vec{u} \times \vec{v} = \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ 1 & 0 & f_x(x_0, y_0) \\ 0 & 1 & f_y(x_0, y_0) \end{vmatrix} = -(f_x(x_0, y_0), f_y(x_0, y_0), -1) \quad \text{平行。}$$

因此，很容易就得到 S 在 (x_0, y_0, z_0) 處的切平面 \mathcal{H} 的方程式：

$$\begin{aligned} \mathcal{H}: & (\vec{u} \times \vec{v}) \cdot (x - x_0, y - y_0, z - z_0) = 0 \\ \iff & f_x(x_0, y_0)(x - x_0) + f_y(x_0, y_0)(y - y_0) - 1(z - z_0) = 0 \\ \iff & z - f(x_0, y_0) = f_x(x_0, y_0)(x - x_0) + f_y(x_0, y_0)(y - y_0) \end{aligned}$$

還記得所謂的 *linearization (linear approximation)* 嗎？同樣地，我們也要用此說明 $f(x, y)$ 的 differential 怎麼得到的。由 S 在 (x_0, y_0, z_0) 處的切平面 \mathcal{H} 的方程式

$$\mathcal{H}: z = f(x_0, y_0) + f_x(x_0, y_0)(x - x_0) + f_y(x_0, y_0)(y - y_0)$$

得知 $f(x, y)$ 在 (x_0, y_0) 處的 linearization 為

$$f(x, y) \approx f(x_0, y_0) + f_x(x_0, y_0)(x - x_0) + f_y(x_0, y_0)(y - y_0),$$

$$\text{即 } f(x, y) - f(x_0, y_0) \approx f_x(x_0, y_0)(x - x_0) + f_y(x_0, y_0)(y - y_0),$$

$$\text{即 } \begin{array}{ccccc} \Delta f & \approx & f_x(x_0, y_0) & \Delta x & + f_y(x_0, y_0) \Delta y, \end{array}$$

$$\implies \begin{array}{ccccc} \downarrow & & \downarrow & & \downarrow \\ df & = & f_x(x_0, y_0) & dx & + f_y(x_0, y_0) dy \end{array}$$

df —— 函數值的 **微變化量**，和以前一樣，叫做 (*total differential*).

- 多變量函數 $f(x, y, \dots)$ 的 differential df 是 f 在沒有特定變化方式時的微變化量（所有變量皆可稍微變動）。其 partial derivative 考慮的則是只有某特定變數在變（其他不動）時的變化率，是具有相對概念的。所以 df 有意義， $\frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial y}, \dots$ 等 partial derivatives 有意義，但是 ∂f 沒有意義。且當 $\begin{cases} x = x(u, v) \\ y = y(u, v) \end{cases}$ ， $f = f(x(u, v), y(u, v))$ 在只有 u 變化時的變化率（“ df 除以 du ”）現在就要寫成 $\frac{\cancel{df}}{\cancel{du}} = \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\cancel{dx}}{\cancel{du}} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{\cancel{dy}}{\cancel{du}}$ ，因為 f, x, y 的變量不光是 u 。同樣地， f 在只有 v 變化時的變化率為 $\frac{\partial f}{\partial v} = \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial v} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial v}$ ，這就是所謂的 *chain rule*。

- 若將 $S: z = f(x, y)$ 裡面的 x, y 參數化，i.e. 沿某曲線行進，得到的是 S 上面的曲線。則根據上面得到的 df ，我們可以求出 f 在該曲線上的**變化率** df/dt ：

$$\frac{df}{dt} = f_x \frac{dx}{dt} + f_y \frac{dy}{dt} = (f_x, f_y) \cdot (\dot{x}, \dot{y}) = \nabla f \cdot (\dot{x}, \dot{y}),$$

因此得知，如果希望函數的變化率高， (\dot{x}, \dot{y}) 就必須朝 ∇f 的方向走 才會使得 $|\frac{df}{dt}|$ 裡的 inner product 最大。這個方向 $\nabla f \stackrel{\text{def}}{=} (f_x, f_y)$ 就叫做 *gradient* (梯度)。把上面 $\frac{d}{dt}[f(x(t), y(t))]$ 式子中的切向量 (\dot{x}, \dot{y}) 換成單位向量 \mathbf{u} ，就是 *directional derivative* $\mathbf{D}_{\mathbf{u}}f = \nabla f \cdot \mathbf{u}$ 。

- 假設點 (x_0, y_0, z_0) 在曲面 $S: z = f(x, y) \in \mathbb{R}^3$ 上（即 $f(x_0, y_0) = z_0$ ），用 $z = z_0$ 砍 S ，就得到 *level curve* $C: f(x, y) = z_0$ ，將此曲線 C 參數化後對參數 t 求導： $\frac{d}{dt}f(x(t), y(t)) = (\frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial y}) \cdot (\dot{x}, \dot{y}) = \frac{d}{dt}z_0 = 0$ ，意即 $(\frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial y}) \perp (\dot{x}, \dot{y})$ ，意即：在曲線 C 上每一點的 $\nabla f = (\frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial y})$ 皆垂直於曲線 $C: f(x, y) = z_0$ 。

同一個曲面 S ，用另一個方式來看，曲面 S 可被視為 $w = g(x, y, z) := f(x, y) - z \in \mathbb{R}^4$ 用 $w = 0$ 砍後所得到的 *level surface*。將 S 上通過 (a, b, c) 的任一曲線參數化後對參數 t 求導 $\frac{d}{dt}g(x(t), y(t), z(t)) = (\frac{\partial g}{\partial x}, \frac{\partial g}{\partial y}, \frac{\partial g}{\partial z}) \cdot (\dot{x}, \dot{y}, \dot{z}) = (\frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial y}, -1) \cdot (\dot{x}, \dot{y}, \dot{z}) = \frac{d}{dt}c = 0$ ，意即 $(\frac{\partial g}{\partial x}, \frac{\partial g}{\partial y}, \frac{\partial g}{\partial z}) \perp (\dot{x}, \dot{y}, \dot{z})$ ，意即：在曲面 S 上每一點的 $\nabla g = (\frac{\partial g}{\partial x}, \frac{\partial g}{\partial y}, \frac{\partial g}{\partial z}) = \nabla(f(x, y) - z) = (\frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial y}, -1) = (\nabla f, -1)$ 垂直於曲面 S 。（用前面的 Figure 1 來看， $\vec{n} \parallel (\vec{u} \times \vec{v}) = -\nabla(f(x, y) - z)$ 本來就是垂直於曲面的）

所以，三維向量 $(\nabla f(x_0, y_0), -1) = (\frac{\partial f}{\partial x}(x_0, y_0), \frac{\partial f}{\partial y}(x_0, y_0), -1)$ 垂直曲面 $S: f(x, y) = z$ 於 (x_0, y_0, z_0) 處，

投影到 xy 平面 \Downarrow

二維向量 $\nabla f(x_0, y_0) = (\frac{\partial f}{\partial x}(x_0, y_0), \frac{\partial f}{\partial y}(x_0, y_0))$ 垂直曲線 $C: f(x, y) = z_0$ 於 (x_0, y_0) 處。

一般來說, 如果 $\mathbf{r} = (x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$, $f(\mathbf{r}) \in \mathbb{R}$ 的 gradient $\nabla f(\mathbf{r}) = (\frac{\partial f}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n}) \in \mathbb{R}^n$, 並且

$$\text{函數值的微變化量 } df = \nabla f \cdot d\mathbf{r}$$

若 t 是 \mathbf{r} 的變量, $\xrightarrow{\text{除以 } dt}$ 則變化率 $\left\{ \begin{array}{l} \frac{df}{dt} = \nabla f \cdot \frac{d\mathbf{r}}{dt}, \quad \text{if } \mathbf{r} = \mathbf{r}(t), \\ \frac{\partial f}{\partial t} = \nabla f \cdot \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial t}, \quad \text{if } \mathbf{r} = \mathbf{r}(t, u, v, \dots). \end{array} \right\}$, 即一般的 chain rule。

$\frac{d\clubsuit}{d\clubsuit}$; $\frac{\partial\clubsuit}{\partial\clubsuit}$ 兩個看似不同的符號 只是用來區分 單變量/多變量 函數的導數罷了, 本質上還是 differential 和 differential 間的比值。

- 令 $\begin{cases} x(t) = a + ht, \\ y(t) = b + kt, \end{cases}$ 為 (a, b) 和 $(a + h, b + k)$ 連線的參數式, 則 $g(t) := f(x(t), y(t))$ 僅有一個變量 t , 我們就可

以求 $g(t)$ 在 $t = 0$ 處的 Taylor expansion:

$$\begin{aligned} g(t) &= g(0) + g'(0)(t - 0) + \frac{g''(0)}{2!}(t - 0)^2 + \frac{g'''(0)}{3!}(t - 0)^3 + \dots \\ g(1) &= g(0) + g'(0) + \frac{g''(0)}{2!} + \frac{g'''(0)}{3!} + \dots \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} g(0) &= f(x(0), y(0)) = f(a, b) \\ g(1) &= f(x(1), y(1)) = f(a + h, b + k) \end{aligned}$$

$$g'(t) = \frac{d}{dt}(f) = \frac{dx}{dt} \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{dy}{dt} \frac{\partial f}{\partial y} = h \frac{\partial f}{\partial x} + k \frac{\partial f}{\partial y} = (h \frac{\partial}{\partial x} + k \frac{\partial}{\partial y})f, \quad (h \frac{\partial}{\partial x} + k \frac{\partial}{\partial y} \text{ 算子對 } f \text{ 作用 } 1 \text{ 次})$$

$$\begin{aligned} g''(t) &= \frac{d}{dt}(\frac{df}{dt}) = (h \frac{\partial}{\partial x} + k \frac{\partial}{\partial y})(\frac{df}{dt}) = (h \frac{\partial}{\partial x} + k \frac{\partial}{\partial y})(h \frac{\partial}{\partial x} + k \frac{\partial}{\partial y})f \\ &= (h \frac{\partial}{\partial x} + k \frac{\partial}{\partial y})^2 f, \quad (h \frac{\partial}{\partial x} + k \frac{\partial}{\partial y} \text{ 算子對 } f \text{ 作用 } 2 \text{ 次}) \end{aligned}$$

$$\text{(即 } h^2 \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} f + hk \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial y} f + hk \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial}{\partial x} f + k^2 \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} f)$$

⋮

$$g^{(i)}(t) = (h \frac{\partial}{\partial x} + k \frac{\partial}{\partial y})^i f, \quad (h \frac{\partial}{\partial x} + k \frac{\partial}{\partial y} \text{ 算子對 } f \text{ 作用 } i \text{ 次})$$

$$\begin{aligned} f(a + h, b + k) &= f(a, b) + \frac{(h \frac{\partial}{\partial x} + k \frac{\partial}{\partial y})^1 f|_{(a,b)}}{1!} + \frac{(h \frac{\partial}{\partial x} + k \frac{\partial}{\partial y})^2 f|_{(a,b)}}{2!} + \dots + \frac{(h \frac{\partial}{\partial x} + k \frac{\partial}{\partial y})^n f|_{(a,b)}}{n!} + \dots \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(h \frac{\partial}{\partial x} + k \frac{\partial}{\partial y})^n f|_{(a,b)}}{n!} \end{aligned}$$

$$\text{Let } \begin{cases} x = a + h, \\ y = b + k, \end{cases} \implies f(x, y) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\left((x - a) \frac{\partial}{\partial x} + (y - b) \frac{\partial}{\partial y} \right)^n f|_{(a,b)}}{n!}.$$

$$\left(\begin{array}{l} \text{In general, for } \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \text{ Taylor expansion of } f(\mathbf{x}) \text{ about } \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n \text{ is} \\ f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{y}) + ((\mathbf{x} - \mathbf{y}) \cdot \nabla) f|_{\mathbf{y}} + ((\mathbf{x} - \mathbf{y}) \cdot \nabla)^2 f|_{\mathbf{y}}/2! + \dots \\ = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{((\mathbf{x} - \mathbf{y}) \cdot \nabla)^n f|_{\mathbf{y}}}{n!}, \\ \text{where } \nabla := (\frac{\partial}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial}{\partial x_n}). \end{array} \right)$$

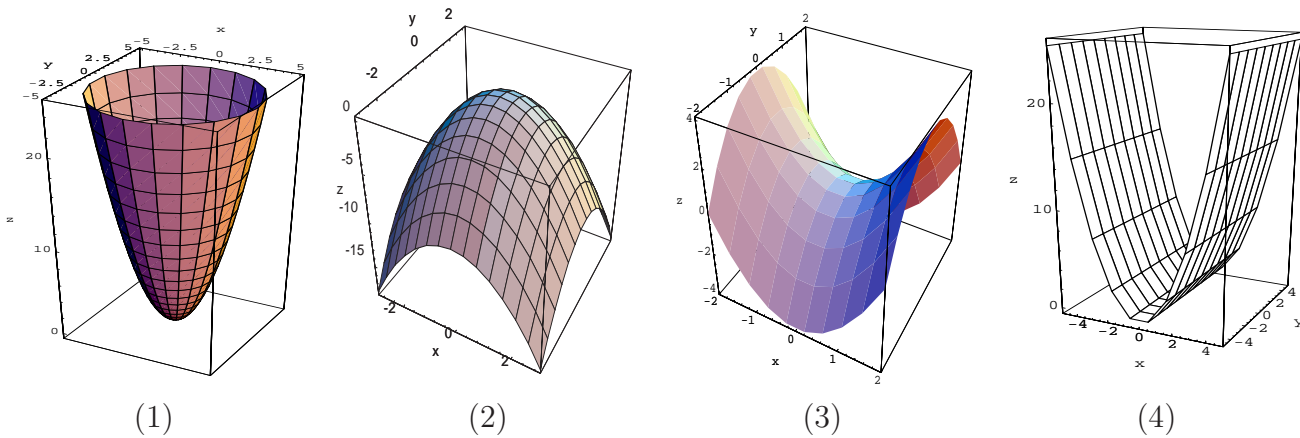


Figure 1: critical point 附近 二次近似的 可能情況

• 用 二次曲面 來近似 $z = f(x, y)$

假設 $f(x, y)$ 是 至少二階可微, 有了 $f(x, y)$ 在 (a, b) 處的 Taylor expansion,

$$f(x, y) = \underbrace{f(a, b) + \begin{pmatrix} f_x(a, b)(x - a) \\ + f_y(a, b)(y - b) \end{pmatrix}}_{\text{linear approximation } \ell(x, y)} + \underbrace{\frac{1}{2} \begin{pmatrix} f_{xx}(a, b)(x - a)^2 \\ + f_{xy}(a, b)(x - a)(y - b) \\ + f_{yx}(a, b)(x - a)(y - b) \\ + f_{yy}(a, b)(y - b)^2 \end{pmatrix}}_{\text{quadratic approximation } q(x, y)} + \underbrace{\boxed{\text{次數大於等於 3 的項}}}_{\mathcal{O}(3)}$$

$$= q(x, y) + \mathcal{O}(3)$$

$q(x, y)$ 稱為 $f(x, y)$ 在 (a, b) 附近的 quadratic approximation (二次函數近似)。

令 $A := f_{xx}(a, b)$, $B := f_{xy}(a, b)$, $C := f_{yy}(a, b)$ 節省符號, 因為 有無常數項、一次項、乘 $\frac{1}{2}$ 皆不影響形狀, 所以看 $\tilde{q}(x, y)$ 的形狀 就等於是在看 $q(x, y)$ 形狀: 在不失一般性的情況下, 假設 (a, b) 即 $(0, 0)$ 以節省符號。於是 二次齊次式 $\tilde{q}(x, y) = Ax^2 + 2Bxy + Cy^2$, 根據配方法 (completing the square) 就可以寫成

$$z = \tilde{q}(x, y) = Ax^2 + 2Bxy + Cy^2 = A \left((x + \frac{B}{A}y)^2 - (\frac{B^2 - AC}{A}) (\frac{y}{A})^2 \right)$$

$$B^2 - AC < 0, \text{ 即 } \begin{vmatrix} f_{xx} & f_{xy} \\ f_{xy} & f_{yy} \end{vmatrix}_{(a,b)} > 0, \Rightarrow z = A((x + *y)^2 + \oplus y^2), \text{ --- paraboloid: } \begin{cases} A > 0 \text{ 開口向上}^{(1)}, \\ A < 0 \text{ 開口向下}^{(2)}, \end{cases}$$

$$> 0, < 0, \Rightarrow z = A((x + *y)^2 + \ominus y^2), \text{ --- saddle}^{(3)},$$

$$= 0, = 0, \Rightarrow z = A(x + *y)^2, \text{ --- parabolic cylinder}^{(4)},$$

這些是 \tilde{q} 即 q 的形狀, 也就是 f 在 (a, b) 點附近的形狀。(複習 “3D.pdf”)

一個光滑函數 $f(x, y)$ 的極值 應該是會發生在 “任何方向導數均為 0” 的地方 (*critical point*)、就說是在 (a, b) 處吧, 意即 $\mathbf{D}_u f(a, b) = \nabla f(a, b) \cdot \mathbf{u} = 0 \forall \mathbf{u} \in \mathbb{R}^2, \Rightarrow \nabla f(a, b) = (f_x(a, b), f_y(a, b)) = (0, 0)$, 於是, 如果 $\nabla f(a, b) = (0, 0)$, $f(x, y)$ 的極值 可由以上 (1)(2)(3)(4) 點得知:

- (1): local minimum 發生在 (a, b) 處 (即最低點),
- (2): local maximum 發生在 (a, b) 處 (即最高點),
- (3): no extremum 發生在 (a, b) 處 (即鞍點),
- (4): inconclusive (溝底/頂).

當 (x, y) 很靠近 f 的 critical point (a, b) 時, 在 case(1)(2)(3) 的情況下, $z = f(x, y) = q(x, y) + \mathcal{O}(3)$ 和 $z = q(x, y)$ 形狀差不多, 但 case(4) 時 $z = q(x, y)$ 為 parabolic cylinder, $f(x, y) = q(x, y) + \mathcal{O}(3)$ 有可能受到高次項 $\mathcal{O}(3)$ 的影響 而使得 cylinder 兩端稍稍向上或向下彎。故在 case(4) 下 若想得知 $z = f(x, y)$ 的形狀, 就必須另外從 $\mathcal{O}(3)$ 的部分得到更多的訊息。

• Lagrange method

我們知道 ∇f 提供的是 $z = f(x, y)$ 變化 (增大/減小) 最快的方向。如果對其中的 (x, y) 有所限制, 並想知道 $f(x, y)$ 的極值, 則我們希望找出 這些限制條件的 增大/減小方向 在何處會和 ∇f 的方向一致, 那麼 $f(x, y)$ 的極值就可以從這些地方求值、比較後而得到。

以虛擬的曲線參數式來解釋:

- 假設曲線 $\mathcal{C} : g(x, y) = 0$ 的參數式為 $\mathcal{C} : (x(t), y(t))$, 則 $f(x, y)|_{\mathcal{C}} = f(x(t), y(t))$ 的極值, 一定發生在 $\frac{df}{dt} = \nabla f \cdot (\dot{x}, \dot{y}) = 0$ 的地方, 即 $\nabla f \perp (\dot{x}, \dot{y})$, 即 $\nabla f \parallel \nabla g$, 即 $\nabla f = \lambda \nabla g$ for some constant λ .

Find local extrema of $z = f(x, y)$ under the constraint $g(x, y) = 0$: a local extremum occurs at

$$\text{which } \begin{cases} \nabla f = \lambda \nabla g \\ g = 0 \end{cases} \text{ for some } \lambda \in \mathbb{R}.$$

- 曲面 $g(x, y, z) = 0$ 交出 曲線 \mathcal{C} 。假設曲線 \mathcal{C} 的參數式為 $\mathcal{C} : (x(t), y(t), z(t))$, 則曲線 \mathcal{C} 的切向量 $(\dot{x}, \dot{y}, \dot{z})$

$$\nabla f \cdot (\dot{x}, \dot{y}, \dot{z}) = 0 \text{ 的地方, 即 } \nabla f \cdot (\nabla g \times \nabla h) = \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ g_x & g_y & g_z \\ h_x & h_y & h_z \end{vmatrix} = 0, \text{ 即 } \nabla f, \nabla g, \nabla h \text{ 線性相關, } \nabla f \text{ 可以寫成 } \nabla g \text{ 和 } \nabla h$$

的線性組合, 即 $\nabla f = \lambda \nabla g + \mu \nabla h$ for some $\lambda, \mu \in \mathbb{R}$.

Find local extrema of $w = f(x, y, z)$ under constraints $\begin{cases} g(x, y, z) = 0 \\ h(x, y, z) = 0 \end{cases}$: a local extremum occurs at which

$$\begin{cases} \nabla f = \lambda \nabla g + \mu \nabla h \\ g = 0 \\ h = 0 \end{cases} \text{ for some } \lambda, \mu \in \mathbb{R}.$$

In general, a local extremum of $f(\mathbf{x}), \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ under constraints $\begin{cases} g_1(\mathbf{x}) = 0 \\ \vdots \\ g_{n-1}(\mathbf{x}) = 0 \end{cases}$ occurs at which

$$\begin{cases} \nabla f(\mathbf{x}) = \lambda_1 \nabla g_1(\mathbf{x}) + \cdots + \lambda_{n-1} \nabla g_{n-1}(\mathbf{x}) & \text{for some } \lambda_1, \cdots, \lambda_{n-1} \in \mathbb{R}. \\ g_1(\mathbf{x}) = 0 \\ \vdots \\ g_{n-1}(\mathbf{x}) = 0 \end{cases} \quad (\nabla f \text{ is a linear combination of } \nabla g_1, \cdots, \nabla g_{n-1})$$