ИССЛЕДОВАНИЕ НА ЭКСТРЕМУМ ФУНКЦИЙ МНОГИХ ПЕРЕМЕННЫХ

В начале рассмотрим случай поиска локального минимума функции *двух* переменных, поскольку уже для $n=2$ все существенные отличия от одномерной задачи можно легко продемонстрировать.

Пусть дана дважды непрерывно дифференцируемая в некоторой области $\Omega \subseteq E^2$ с ОНБ функция $f(x,y)$. Выясним, при каких условиях эта функция имеет в точке $\begin{Vmatrix} x^* \\ y^* \end{Vmatrix} \in \Omega$ локальный минимум. Дадим

Определение 1. Будем говорить, что функция $f(x,y)$ имеет в точке $\begin{Vmatrix} x^* \\ y^* \end{Vmatrix}$ *строгий локальный минимум*, если существует $\overset{\circ}{U}_\varepsilon$ - проколотая окрестность, такая, что для *любой* точки $\begin{Vmatrix} x \\ y \end{Vmatrix} \in \overset{\circ}{U}_\varepsilon$ выполнено неравенство

$$f(x,y) > f(x^*,y^*)\,. \qquad (1)$$

Понятно, что проверить выполнение условия определения 1 для *всех* точек окрестности $\overset{\circ}{U}_{\varepsilon}$ невозможно. Поэтому необходимо получить условия существования экстремума, проверка которых практически реализуема.

В некоторых случаях, удается преобразовать запись функции $f(x,y)$ к виду, в котором выполнение неравенства (1) очевидно или легко проверяется. Например, функцию $f(x,y)=x^4-x^2y+y^2$ можно записать так:

$$f(x,y)=x^4-x^2y+\frac{y^2}{4}+\frac{3y^2}{4}=\left(x^2-\frac{y}{2}\right)^2+\left(\frac{y\sqrt{3}}{2}\right)^2.$$

Откуда следует, что точка $\begin{Vmatrix} x^* \\ y^* \end{Vmatrix}=\begin{Vmatrix} 0 \\ 0 \end{Vmatrix}$ есть точка локального минимума. Впрочем, подобная ситуация есть исключение, а не правило.

Более удобным способом использования определения 1 является оценка знака разности $f(x,y)-f(x^*,y^*)$ для точек окрестности $\overset{\circ}{U}_\varepsilon$ при помощи *формулы Тейлора.*

Формулу Тейлора для функции $f(x,y)$ в точке $\begin{Vmatrix} x^* \\ y^* \end{Vmatrix}$, как известно, можно записать в виде

$$f(x,y) = f(x^*,y^*) + d\,f + \frac{1}{2}d^2 f + o(\rho^2)\,, \tag{2}$$

где $\rho = \sqrt{dx^2 + dy^2}$, $dx = x - x^*$ и $dy = y - y^*$, а дифференциалы $d\,f$ и $d^2 f$ соответственно равны

$$df = \frac{\partial f}{\partial x}dx + \frac{\partial f}{\partial y}dy\,, \qquad d^2 f = \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}dx^2 + 2\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}dxdy + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}dy^2.$$

В двух последних формулах частные производные вычислены в точке $\begin{Vmatrix} x^* \\ y^* \end{Vmatrix}$.

Из (2) получаем, что

$$f(x,y)-f(x^*,y^*)=d\,f+\frac{1}{2}d^2 f+o(\rho^2)\,, \tag{3}$$

Здесь отметим, что, согласно теореме Тейлора (об остаточном члене в форме Пеано) первое слагаемое в правой части (3) в силу дважды непрерывной дифференцируемости функции $f(x,y)$, имеет порядок малости $\rho=\sqrt{dx^2+dy^2}$. Второе же слагаемое в правой части имеет порядок малости $\rho^2=dx^2+dy^2$.

Это означает, что в достаточно малой окрестности точки $\begin{Vmatrix} x^* \\ y^* \end{Vmatrix}$ знак приращения $f(x,y)-f(x^*,y^*)$ определяется знаком величины $df=\frac{\partial f}{\partial x}dx+\frac{\partial f}{\partial y}dy$, который может быть *любым* в силу линейной зависимости df от dx и dy .

Иначе говоря, если grad $f(x,y) \neq o$ и для некоторого вектора $\begin{Vmatrix} dx \\ dy \end{Vmatrix}$ мы имеем $f(x,y) - f(x^*, y^*) > 0,$ то для вектора $\left(- \begin{Vmatrix} dx \\ dy \end{Vmatrix} \right)$ мы обязательно будем иметь, что $f(x,y) - f(x^*, y^*) < 0,$ так как производные $\frac{\partial f}{\partial x}$ и $\frac{\partial f}{\partial y}$ от значений dx и dy не зависят.

Значит, у непрерывно дифференцируемой функции $f(x,y)$ в точках, где grad $f(x,y) \neq o$, экстремума (т.е. минимума или максимума) быть не может. Заметим, что точки, в которых grad $f(x,y) \neq o$, принято называть *стационарными точками* для функции $f(x,y)$.

В итоге мы приходим к следующему *необходимому* условию существования экстремума:

> **Если функция $f(x,y)$ имеет экстремум в точке $\begin{Vmatrix} x^* \\ y^* \end{Vmatrix}$,**
>
> **то**
>
> **либо** grad $f(x^*, y^*) = o$,
>
> **либо** *градиент в этой точке не существует***.**

Это необходимое условие не является достаточным. Пример: $f(x,y) = xy$. Здесь в начале координат градиент есть нулевой вектор, а экстремума нет.

Пусть теперь мы рассматриваем только точки, в которых grad $f(x,y)=o$. В этом случае знак разности $f(x,y)-f(x^*,y^*)$ будет совпадать со знаком второго слагаемого в правой части (3), т.е.

$$d^2 f = \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}dx^2 + 2\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}dxdy + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}dy^2. \tag{4}$$

В формуле (4) значения производных вычислены в фиксированной точке $\begin{Vmatrix} x^* \\ y^* \end{Vmatrix}$ и не зависят от значений dx и dy. Для простоты записей будем обозначать эти значения так: $A=\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}$, $B=\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}$, $C=\frac{\partial^2 f}{\partial y^2}$. Напомним, что матрица $\begin{Vmatrix} A & B \\ B & C \end{Vmatrix}$ называется *матрицей Гессе*.

Тогда можно утверждать, что знак разности $f(x,y)-f(x^*,y^*)$ совпадает со знаком квадратичной формы

$$Adx^2 + 2Bdxdy + Cdy^2. \tag{5}$$

Если квадратичная форма $Adx^2 + 2Bdxdy + Cdy^2$. *положительно определенная*, то в точке $\begin{Vmatrix} x^* \\ y^* \end{Vmatrix}$ функция $f(x, y)$ будет иметь *строгий локальный минимум*, а, если эта форма *отрицательно определена*, то − *строгий локальный максимум*. Наконец, если форма не имеет знаковой определенности(как строгой, так и нестрогой), то экстремума гарантировано нет. Оставшиеся возможные случаи будут требовать дополнительного исследования.

Итак, мы пришли к достаточным условиям вида:

Если у дважды непрерывно дифференцируемой функции $f(x, y)$ в *стационарной* точке квадратичная форма (5) *положительно* определена, то $f(x, y)$ имеет в этой точке *строгий локальный минимум*.

Если у дважды непрерывно дифференцируемой функции $f(x, y)$ в *стационарной* точке квадратичная форма (5) *отрицательно определена*, то $f(x, y)$ имеет в этой точке *строгий локальный максимум*.

Если у дважды непрерывно дифференцируемой функции $f(x, y)$ в *стационарной* точке квадратичная форма (5) не имеет *знаковой определенности*, то $f(x, y)$ не имеет в этой точке *строгого локального экстремума*.

Заметим, что, например, *первое достаточное условие не является необходимым*. Пример: $f(x, y) = x^4 + y^4$. Здесь в начале координат есть строгий минимум, а строгой положительной определенности нет.

Напомним теперь, доказываемые в курсе линейной алгебры, методы исследования квадратичной формы (5) на наличие или отсутствия знаковой неопределенности.

1) *Метод Лагранжа*. Он сводится к построению диагонального (или канонического) базиса методом выделения полных квадратов, т.е. базиса, в котором коэффициент B у квадратичной формы (5) равен нулю.

2) *Критерий Сильвестра*. Этот критерий утверждает, что для положительной опреде ленности формы (5) необходимо и достаточно, чтобы одновременно выполнялись неравенства $A > 0$ и $\det \begin{Vmatrix} A & B \\ B & C \end{Vmatrix} > 0$.

   Для отрицательной определенности формы (5) необходимо и достаточно, чтобы одновременно выполнялись неравенства $A < 0$ и $\det \begin{Vmatrix} A & B \\ B & C \end{Vmatrix} > 0$.

3) *Диагонализация матрицы квадратичной формы в евклидовом пространстве*. Этот метод основан на теореме о том, что в базисе из собственных векторов самосопряженного преобразования, имеющего в ОНБ матрицу вида $\begin{Vmatrix} A & B \\ B & C \end{Vmatrix}$, матрица такого преобразования диагональная, причем на ее главной диагонали стоят собственные значения этого преобразования.

Пример 1. В E^2 исследовать на экстремум функцию $f(x,y) = x^3 + y^3 - 3xy$.

Решение: 1) Найдем вначале для бесконечно дифференцируемой функции $f(x,y)$ все ее стационарные точки, т.е. точки, подозрительные на экстремум. Эти точки находятся из *необходимого* условия

$$\operatorname{grad} f(x,y) = o \quad \text{или} \quad \begin{cases} \dfrac{\partial f}{\partial x} = 3x^2 - 3y = 0, \\ \dfrac{\partial f}{\partial y} = 3y^2 - 3x = 0 \end{cases} \quad \Rightarrow \quad \left[\begin{array}{l} \begin{Vmatrix} 1 \\ 1 \end{Vmatrix} \\ \\ \begin{Vmatrix} 0 \\ 0 \end{Vmatrix} \end{array} \right. .$$

2) Проверим теперь выполнение *достаточных* условий в стационарных точках. Строим матрицу Гессе $\begin{Vmatrix} \dfrac{\partial^2 f}{\partial x^2} & \dfrac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} \\ \dfrac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} & \dfrac{\partial^2 f}{\partial y^2} \end{Vmatrix} = \begin{Vmatrix} 6x & -3 \\ -3 & 6y \end{Vmatrix}$.

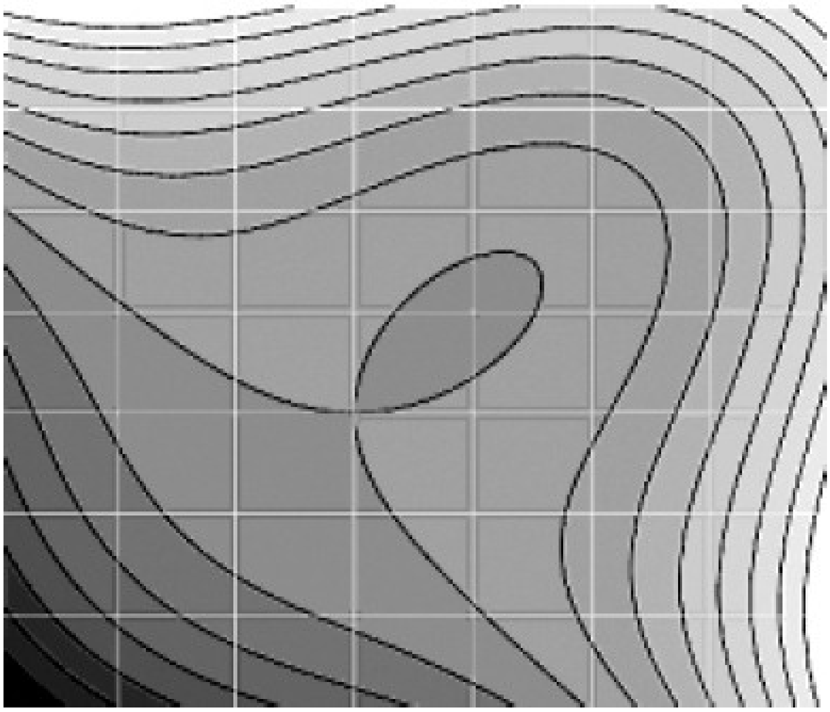
В первой стационарной точке матрица Гессе будет $\begin{Vmatrix} 6 & -3 \\ -3 & 6 \end{Vmatrix}$. Для нее выполняется критерий Сильвестра положительной определенности квадратичной формы (5). Значит в точке $\begin{Vmatrix} 1 \\ 1 \end{Vmatrix}$ у функции строгий локальный минимум.

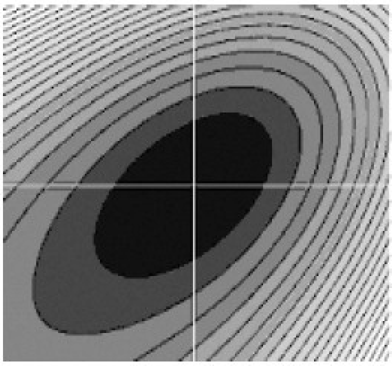
Во второй стационарной точке матрица Гессе равна $\begin{Vmatrix} 0 & -3 \\ -3 & 0 \end{Vmatrix}$. Для нее выполняется достаточное условие отсутствия знаковой определенности квадратичной формы (5).

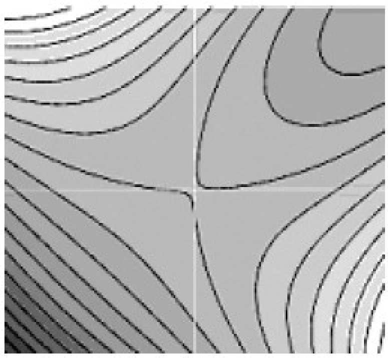
В точке $\begin{Vmatrix} 0 \\ 0 \end{Vmatrix}$ у функции экстремума нет, поскольку в малой окрестности начала координат $f(x, y) = -3dxdy + dx^3 + dy^3$

и при $dx = dy$ имеем $\Delta f = -3dx^2 + 2dx^3 < 0$,

а при $dx = -dy$ имеем $\Delta f = 3dx^2 - 2dx^3 > 0$.





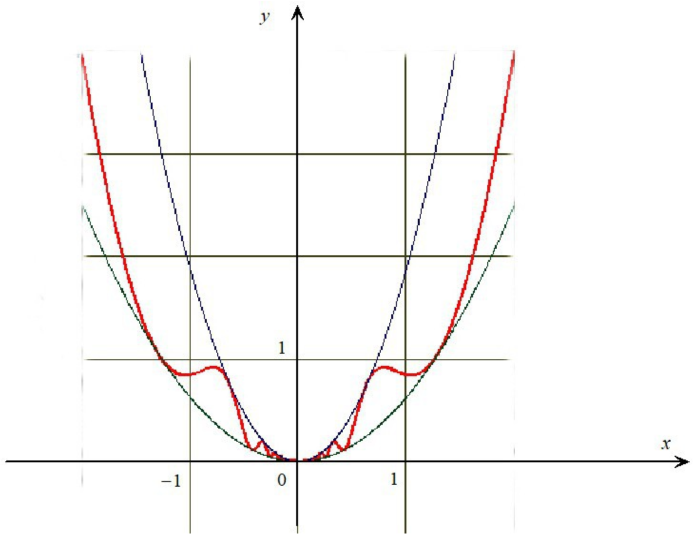


Пример 2. Пусть непрерывная функция $F(x)$ имеет в точке x^* локальный экстремум. Верно ли утверждение: в этом случае найдется такая окрестность точки x^*, для которой $F(x)$ монотонна как в правой, так и в левой полуокрестности этой точки? Ответ обосновать.

Решение: Нет, неверно. Пример: непрерывная функция

$$F(x) = \begin{cases} 0, & \text{если } x = 0, \\ x^2\left(2 + \cos\dfrac{1}{x}\right), & \text{если } x \neq 0 \end{cases}$$

имеет в точке $x^* = 0$ минимум, но не является монотонной в любой полуокрестности этой точки.



Общая схема поиска локального экстремума

Вполне очевидно, что метод поиска в E^n локальных экстремумов функции $F(\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_n)$, основанный на исследовании ее критических элементов (или же на решении уравнения $\operatorname{grad} F(x) = o$), практически пригоден лишь для крайне ограниченного числа случаев.

Реально реализуемой альтернативой является использование так называемых *итеративных численных методов*.

Эти методы могут быть представлены в виде следующей схемы поиска, например, максимума.

1º. Для некоторого начального элемента x^0 находятся

ненулевое *улучшающее направление максимизации* $w^0 \in E^n$ и

положительное число $\sigma_0 < +\infty$ – *величина шага* по данному направлению

– такие, что на элементе $x^1 = x^0 + \sigma_0 \cdot w^0$

верно неравенство $F(x^1) > F(x^0)$.

2º. Если задача в пункте 1º решена успешно, то элемент x^0 заменяется на x^1 и процедура пункта 1º повторяется для некоторого нового $w^1 \in E^n$.

Если же оказалось, что множество улучшающих направлений состоит только из нулевого элемента или же $\sigma_0 = 0$, то

либо элемент x^0 принимается за x^* – максимальный,

либо, при $\sigma_0 = +\infty$, констатируется факт отсутствия максимума у функции $F(x)$.

Таким образом, поиск экстремального элемента сводится к итерационной процедуре вида

$$x^{k+1} = x^k + \sigma_k \cdot w^k \qquad k = 0,1,2,\dots ,$$

условия сходимости которой к искомому экстремальному элементу x^* (то есть, $\rho(x^k, x^*) \to 0$ при $k \to \infty$) зависят, как от способа выбора w^k и σ_k, так и от свойств максимизируемой функции.

Примеры методов поиска локального гладкого экстремума

Предположим, что функция $F(x)$ непрерывно дифференцируема в E^n и выполнены следующие условия:

1°. Начальный элемент x^0 принадлежит окрестности максимального элемента x^*, в которой функция $F(x)$ *строго выпукла вверх*;

2°. Элемент *направления максимизации* w^k удовлетворяет ограничению $(\operatorname{grad} F(x^k), w^k) > 0$.

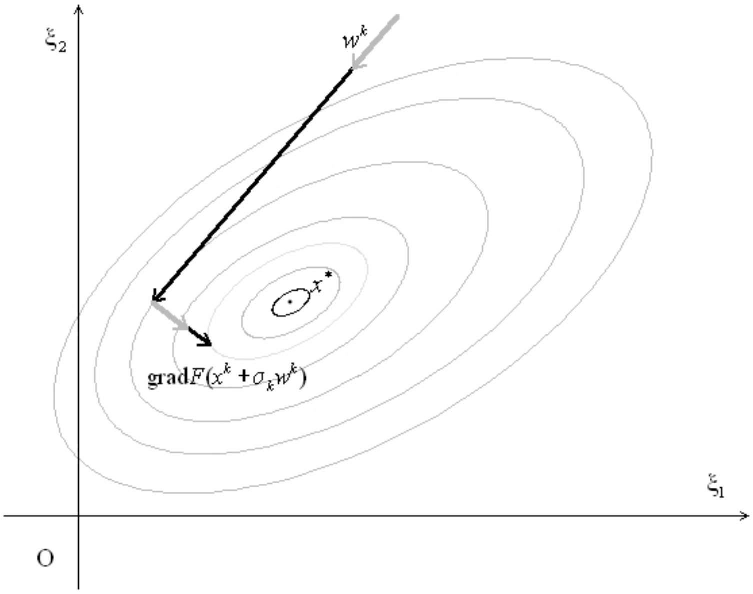
3°. Величина шага по выбранному направлению максимизации σ_k находится путем решения одномерной задачи

$$\sigma_k = \max_{\sigma \geq 0} F(x^k + \sigma \cdot w^k) .$$

Тогда последовательность элементов $\{x^k\}$ будет сходиться к x^*, если величина шага σ_k по направлению w^k находится из уравнения

$$(\operatorname{grad} F(x^k + \sigma_k w^k), w^k) = 0 .$$

Это правило выбора величины шага по направлению w^k гарантирует наибольшее увеличение значение функции по направлению w^k, что иллюстрирует следующий рисунок.



В случаях, когда оптимизируемая функция достаточно гладкая (например, имеет непрерывные частные производные первого и второго порядка), для выбора w_k можно использовать более эффективные схемы, такие как:

1) *метод наискорейшего подъема* (*линейной аппроксимации*), основанный на оценке скорости возрастания функции $F(x)$ на элементе x^k по направлению w^k, которая в силу неравенства Коши–Буняковского максимальна при $w^k = \operatorname{grad} F(x^k)$, поскольку $\forall w$ с $|w| = 1$

$$\left|\frac{\partial F}{\partial w}\right| = |(\operatorname{grad} F, w)| \le |\operatorname{grad} F|\,|w| = |\operatorname{grad} F|\,.$$

Этот метод, однако, оказывается малоэффективным в случаях "плохой обусловленности" целевой функции.

2) *метод квадратичной аппроксимации* (*метод Ньютона*), при котором улучшающее направление w_k удовлетворяет условию

$$\hat{\text{Hess}}\, F(x_k) w^k = -\operatorname{grad} F(x_k),$$

что в матричном и координатном представлениях есть система линейных уравнений

$$\left\| \hat{\text{Hess}}\, F(x_k) \right\| \left\| w^k \right\| = -\left\| \operatorname{grad} F(x_k) \right\|$$

$$\text{или} \quad \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial^2 F}{\partial \xi_i \partial \xi_j} \omega_j^k = -\frac{\partial F}{\partial \xi_i}, \; i = [1, n],$$

где $\left\| w^k \right\| = \left\| \begin{matrix} \omega_1^k \\ \omega_2^k \\ \dots \\ \omega_n^k \end{matrix} \right\|$ – координатное представление элемента w^k.

Убедимся, что для квадратичной формы $F(x)$ стационарный (то есть такой, что $\operatorname{grad} F(x) = o$) элемент находится по методу Ньютона за одну итерацию, причем с $\sigma = 1$.

Действительно, в этом случае стационарный элемент существует и единственный. Разложение $F(x)$ по формуле Тейлора в окрестности любого x_0 при произвольном элементе вариации $dx = w$ (то есть отклонении от x_0) записывается *без остаточного члена*

$$F(x_0 + w) = F(x_0) + \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial F}{\partial \xi_j} \omega_j + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{n} \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial^2 F}{\partial \xi_j \partial \xi_i} \omega_j \omega_i \,.$$

Тогда условие стационарности $F(x)$ будет иметь вид

$$\frac{\partial F}{\partial \omega_i} = \frac{\partial F}{\partial \xi_i} + \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial^2 F}{\partial \xi_j \partial \xi_i} \omega_j = 0 \quad ; \quad i = [1, n]\,,$$

что и доказывает проверяемое утверждение.

Тип стационарного элемента (максимум, минимум или "седло") в этом случае зависит от знаковой определенности $\left\| \widehat{\mathrm{Hess}}\, F(x) \right\|$.

В заключение приведем пример использования схемы *градиентного подъема* с непрерывным изменением направления (*метод Коши*).

Можно заметить, что поиск локального максимального элемента для непрерывно дифференцируемой функции $F(x)$ методом наискорейшего подъема сводится к решению следующей задачи Коши:

$$\frac{dx}{d\tau} = \operatorname{grad} F(x); \quad x(0) = x^0 .$$

Например, в E^2 для $F(\xi_1, \xi_2) = -2\xi_1^2 - \xi_2^2$ с $\| x^0 \| = \begin{Vmatrix} 1 \\ 1 \end{Vmatrix}$ имеем

$$\begin{cases} \dot{\xi}_1 = -4\xi_1, \\ \dot{\xi}_2 = -2\xi_2, \end{cases} \quad \text{что дает} \quad \begin{cases} \xi_1(\tau) = e^{-4\tau}, \\ \xi_2(\tau) = e^{-2\tau} \end{cases}$$

с фазовой траекторией, задаваемой в силу условий $\xi_1(0) = 1$; $\xi_2(0) = 1$ уравнением $\xi_1 - \xi_2^2 = 0$, которая при $\tau = 0$ выходит из начального элемента x_0 и при $\tau \to +\infty$ асимптотически стремится к максимальному элементу $\| x^* \| = \begin{Vmatrix} 0 \\ 0 \end{Vmatrix}$.