MS-A0201
Differentiaali- ja integraalilaskenta 2 (TFM)
Luento 6: Ääriarvojen luokittelu

Harri Hakula

Matematiikan ja systeemianalyysin laitos[1]
Aalto-yliopisto

Kevät 2024

[1] Perustuu Antti Rasilan luentomonisteeseen vuodelta 2015 sekä Jarmo Malisen versioon vuodelta 2017.

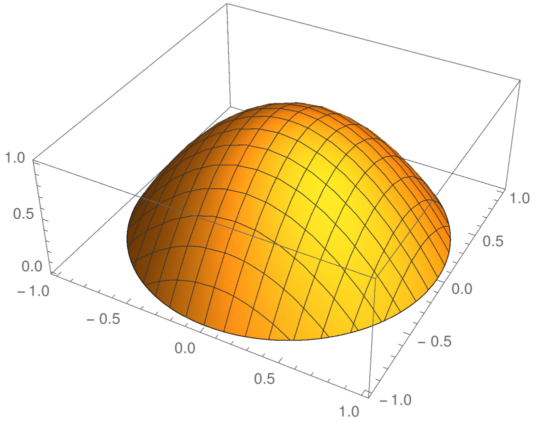
Kertausta: ääriarvot yhden muuttujan tapauksessa

- Funktiolla $f \colon I \subset \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ on lokaali (paikallinen) maksimi pisteessä $a \in I$, jos $f(x) \leq f(a)$ kaikilla x:n arvoilla jossakin a:n ympäristössä (eli riittävän lähellä pistettä a).
- Vastaavasti lokaali minimi tarkoittaa sitä, että $f(x) \geq f(a)$ jossakin a:n ympäristössä.
- Maksimi tai minimi on globaali, jos kyseinen epäyhtälö on voimassa kaikilla $x \in I$.
- Ääriarvoja voi esiintyä: (i) Funktion f kriittisissä pisteissä $f'(x) = 0$, (ii) pisteissä joissa f:n derivaatta ei ole määritelty, ja (iii) määrittelyjoukon I reunalla.
- Seuraavaksi yleistetään näitä ehtoja funktion $f \colon D \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ tapaukseen.

Ääriarvot ja usean muuttujan funktiot

- Funktiolla $f\colon D \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ on pisteessä $\mathbf{x}_0 \in D$ lokaali maksimi, jos $f(\mathbf{x}) \leq f(\mathbf{x}_0)$ jossakin pisteen $\mathbf{x}_0$ ympäristössä.
- Vastaavasti $f\colon D \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ on pisteessä $\mathbf{x}_0 \in D$ lokaali minimi, jos $f(\mathbf{x}) \geq f(\mathbf{x}_0)$ pisteen $\mathbf{x}_0$ ympäristössä.
- Ääriarvo on globaali eli absoluuttinen, jos kyseinen epäyhtälö on voimassa kaikilla $\mathbf{x} \in D$.
- Ääriarvoja voi esiintyä:
  1. Funktion f kriittissä pisteissä eli gradientin nollakohdissa $\nabla f(\mathbf{x}) = 0$,
  2. pisteissä joissa ∇f ei ole määritelty, sekä
  3. määrittelyjoukon D reunalla.
- Joukon D kriittistä pistettä $\mathbf{x}_0$, joka ei ole maksimi tai minimi, kutsutaan funktion $f\colon D \to \mathbb{R}$ satulapisteeksi.

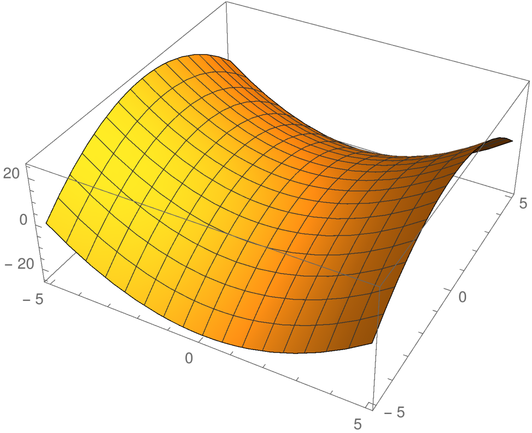
Esimerkki 1



Funktiolla $f(x, y) = 1 - x^2 - y^2$ on lokaali maksimi $f(0, 0) = 1$ pisteessä $(0, 0)$. Tämä piste on funktion f kriittinen piste, koska

$$\nabla f(0, 0) = -2x\mathbf{i} - 2y\mathbf{j}\Big|_{(0,0)} = \mathbf{0}.$$

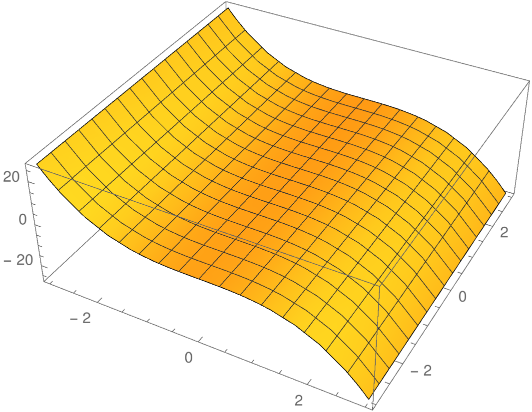
Esimerkki 2



Funktiolla $f(x, y) = y^2 - x^2$ on satulapiste $(0, 0)$. Tämä piste on funktion f kriittinen piste, koska

$$\nabla f(0,0) = -2x\mathbf{i} + 2y\mathbf{j}\Big|_{(0,0)} = \mathbf{0}.$$

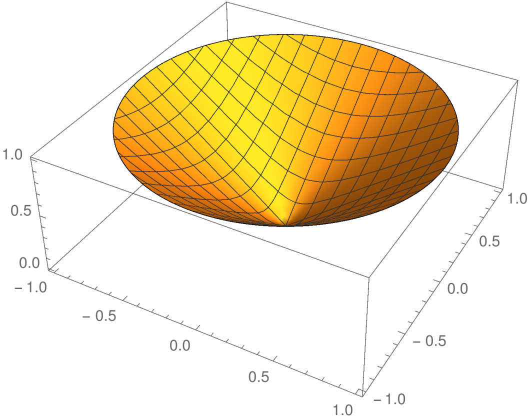
Esimerkki 3



Kaikki pisteet suoralla $x = 0$ ovat funktion $f(x, y) = -x^3$ satulapisteitä. Huomaa, että

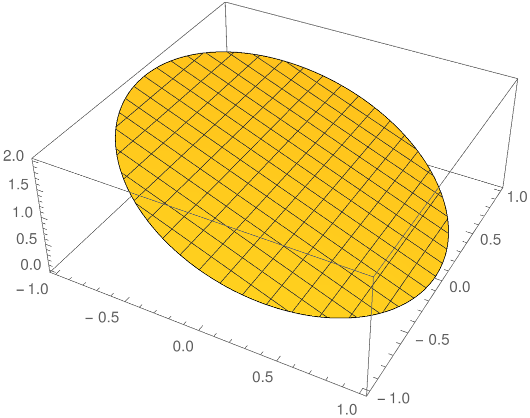
$$\nabla f(0, y) = -3x^2\mathbf{i}\Big|_{(0,y)} = \mathbf{0} \text{ kaikilla } y \in \mathbb{R}.$$

Esimerkki 4



Funktiolla $f(x,y) = \sqrt{x^2 + y^2}$ on lokaali minimi $f(0,0) = 0$ pisteessä $(0,0)$. Funktio f on jatkuva, mutta sen gradientti ∇f ei ole määritelty tässä pisteessä.

Esimerkki 5



Funktiolla $f(x, y) = 1 - x$ ei ole paikallisia ääriarvoja, jos sen määrittelyjoukko on koko taso $D = \mathbb{R}^2$. Jos määrittelyjoukoksi kuitenkin ajatellaan esimerkiksi kiekko $D = \{(x, y) : x^2 + y^2 \leq 1\}$, niin sen reunalla saadaan maksimi $f(-1, 0) = 2$ ja minimi $f(1, 0) = 0$.

Ääriarvojen luokittelu: johdanto

- Ääriarvojen luokittelu perustuu suureen $\Delta f = f(\mathbf{x}+\mathbf{h}) - f(\mathbf{x})$ tarkasteluun kriittisessä pisteessä $\mathbf{x} \in D$.
- Jos Δf saa vain positiivisia arvoja (kun $\|\mathbf{h}\|$ on pieni), on piste $\mathbf{x}$ minimi ja negatiivisessa tapauksessa maksimi. Jos Δf vaihtaa merkkiä, niin piste $\mathbf{x}$ ei ole minimi eikä maksimi.
- Tämä johtaa funktion f toisen derivaatan tarkasteluun kriittisessä pisteessä. Yhden muuttujan tapauksessa:
  1. Jos $f''(x) < 0$, funktiolla f lokaali maksimi pisteessä x.
  2. Jos $f''(x) > 0$, funktiolla f lokaali minimi pisteessä x.
  3. Jos $f''(x) = 0$, testi ei anna vastausta, ja kysymys täytyy ratkaista muulla tavoin.
- Seuraavaksi yritetään yleistää tätä ajatusta monen muuttujan funktiolle.

Hessen matriisi 1/2

- Olkoon $f\colon D \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ funktio, jolla on jatkuvat toisen kertaluvun osittaisderivaatat.
- Funktion f luonnollinen derivaattakäsite on gradientti, joka itsessään on vektoriarvoinen funktio $\nabla f\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$.
- Siten funktion f toinen derivaatta on matriisi, jota nimitetään Hessen matriisiksi

$$H_f(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} f(\mathbf{x}) & \frac{\partial^2}{\partial x_2 \partial x_1} f(\mathbf{x}) & \dots & \frac{\partial^2}{\partial x_n \partial x_1} f(\mathbf{x}) \\ \frac{\partial^2}{\partial x_1 \partial x_2} f(\mathbf{x}) & \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} f(\mathbf{x}) & \dots & \frac{\partial^2}{\partial x_n \partial x_2} f(\mathbf{x}) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial^2}{\partial x_1 \partial x_n} f(\mathbf{x}) & \frac{\partial^2}{\partial x_2 \partial x_n} f(\mathbf{x}) & \cdots & \frac{\partial^2}{\partial x_n^2} f(\mathbf{x}) \end{bmatrix}.$$

- Koska f on kaksi kertaa jatkuvasti derivoituva, derivoinnin järjestystä voidaan vaihtaa, ja kyseinen matriisi on symmetrinen.

Hessen matriisi 2/2

Miksi Hessen matriisi kiinnostaa meitä? Kun gradientin avulla voidaan kirjoittaa lineaarinen (ensimmäisen asteen) approksimaatio funktiolle $f : D \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, niin Hessen matriisilla saadaan kvadraattinen tarkennus:

$$f(\mathbf{x} + \mathbf{h}) \approx f(\mathbf{x}) + \mathbf{h} \cdot \nabla f(\mathbf{x}) + \frac{1}{2}\mathbf{h} H_f(\mathbf{x}) \mathbf{h}^T,$$

jossa (vaaka)vektori $\mathbf{h} = (h_1, h_2, \ldots, h_n)$ on pieni.

- Tämä kaava on itse asiassa ainoastaan uusi tapa kirjoittaa toisen kertaluvun Taylorin approksimaatio n muuttujan funktiolle.
- Termi muotoa $\mathbf{z}^T A \mathbf{z}$ on $n \times n$-neliömatriisille A n.k. neliömuoto, jossa $\mathbf{z}$ on n-pystyvektori. Kirjoita kaava auki tapauksessa $n = 2$!
- Pisteessä, jossa $\nabla f(\mathbf{x}) = 0$, on voimassa approksimaatio $f(\mathbf{x} + \mathbf{h}) - f(\mathbf{x}) \approx \frac{1}{2}\mathbf{h} H_f(\mathbf{x}) \mathbf{h}^T$. Tätä voidaan käyttää hyväksi mahdollisen ääriarvon luokittelussa pisteessä $\mathbf{x}$ ajattelemalla, että $\mathbf{h} \approx 0$.

Matriisin (ja neliömuodon) definiittisyys 1/2

Mitä tarkoittaa symmetrisen matriisin positiivisuus tai negatiivisuus?

- Symmetristä $n \times n$-matriisia A sanotaan positiividefiniitiksi jos sen kaikki ominaisarvot ovat positiivisia.
- Sanotaan, että matriisi A on negatiividefiniitti jos $-A$ on positiividefiniitti.
- Matriisin sanotaan olevan indefiniitti, jos sen kaikki ominaisarvot ovat nollasta poikkeavia ja sillä on vähintään yksi positiivinen sekä yksi negatiivinen ominaisarvo.

Positiivi/negatiividefiniiteillä matriiseilla on monia samoja ominaisuuksia kuin positiivisilla/negatiivisilla reaaliluvuilla.

Matriisin (ja neliömuodon) definiittisyys 2/2

Symmetrisen matriisin A definiittiys tai indefiniittiys periytyy sitä vastaavalle neliömuodolle.

- Jos A on positiividefiniitti, niin $\mathbf{x}^T A\mathbf{x} > 0$ kaikilla nollasta poikkeavilla pystyvektoreilla $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$.
- Jos A on negatiividefiniitti, niin $\mathbf{x}^T A\mathbf{x} < 0$ kaikilla nollasta poikkeavilla pystyvektoreilla $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$.
- Jos A on indefiniitti, niin $\mathbf{x}^T A\mathbf{x}$ saavuttaa sekä negatiivisia että positiivisia arvoja pystyvektorin $\mathbf{x}$ vaihdellessa.

Väite nähdään todeksi ortogonaalidiagonalisoimalla symmetrinen matriisi A muotoon $A = U^T \Lambda U$, jossa diagonaalimatriisi Λ sisältää A:n ominaisarvot.

Toisen derivaatan testi monen muuttajan tapauksessa

Lause

Olkoon $f : D \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ funktio, jolla on jatkuvat toiset osittaisderivaatat kriittisen pisteen $\mathbf{x} \in D$ ympäristössä. Tällöin:

a) Jos $H_f(\mathbf{x})$ on positiividefiniitti, niin f:llä on lokaali minimi pisteessä $\mathbf{x}$.

b) Jos $H_f(\mathbf{x})$ on negatiividefiniitti, niin f:llä on lokaali maksimi pisteessä $\mathbf{x}$.

c) Jos $H_f(\mathbf{x})$ on indefiniitti, niin f:llä on satulapiste pisteessä $\mathbf{x}$.

d) Muussa tapauksessa testi ei anna tietoa funktiosta f.

Seuraa approksimaatiosta $f(\mathbf{x} + \mathbf{h}) - f(\mathbf{x}) \approx \frac{1}{2}\mathbf{h}H_f(\mathbf{x})\mathbf{h}^T$ kun $\mathbf{h} \approx 0$. Väite tarvitsee nimittäin ainoastaan tarkastaa Hessen matriisin määräämälle neliömuodolle.

Esimerkki 6 1/2

- Etsitään ja luokitellaan funktion

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

  kriittiset pisteet.
- Yhtälöt kriittisille pisteille ovat

$$\begin{aligned} 0 &= f_1(x, y, z) = 2xy - 2, \\ 0 &= f_2(x, y, z) = x^2 + 2yz, \\ 0 &= f_3(x, y, z) = y^2 + 2z. \end{aligned}$$

- Nämä yhtälöt ratkaisemalla nähdään, että funktion f ainoa kriittinen piste on $P = (1, 1, -1/2)$.

Esimerkki 6 2/2

- Lasketaan Hessen matriisi $H_f(1,1,-1/2) = \begin{bmatrix} 2 & 2 & 0 \\ 2 & -1 & 2 \\ 0 & 2 & 2 \end{bmatrix}$.
- Lasketaan matriisin ominaisarvot vaikkapa MATLABilla

```
>> a = [2 2 0 ; 2 -1 2 ; 0 2 2]
a =
     2     2     0
     2    -1     2
     0     2     2
>> eig(a)
ans =
   -2.7016
    2.0000
    3.7016
```

- Niinpä funktiolla f on satulapiste pisteessä $P = (1,1,-1/2)$.

(Matriisin definiittisyys voidaan tarkistaa ilman ominaisarvojen määrittämistä myös n.k. Sylvesterin kriteerillä tutkimalla alimatriisien determinanttien etumerkkejä.)