Les 3 Extrema van functies van meerdere variabelen

Bij gewone functies van één variabel hebben we in Wiskunde 1 de vraag behandeld hoe we minima en maxima van een functie kunnen vinden. Het belangrijkste criterium was dat een differentieerbare functie in een lokaal extremum (minimum of maximum) een horizontale raaklijn heeft, de afgeleide van de functie in een extremum is dus noodzakelijk nul. Punten met deze eigenschap hebben we *kritieke punten* genoemd, naast de speciale punten waar de functie niet differentieerbaar is en de randpunten van het interval waarop we de functie bekijken.

3.1 Classificatie van kritieke punten

Het kan zijn dat een functie in een punt een horizontale raaklijn heeft, zonder in dit punt een extremum te hebben. Dit is bijvoorbeeld het geval voor de functie $f(x) = x^3$ in het punt $x = 0$. Zo'n punt noemt men ook een *zadelpunt*. Het verschil tussen een zadelpunt en een echt extremum laat zich aan de hand van de tweede afgeleide $f''(x)$ beschrijven:

Bij een minimum in het punt x_0 is de functie links van x_0 (dus voor $x < x_0$) dalend en rechts van x_0 stijgend, dus is de eerste afgeleide $f'(x)$ links van x_0 negatief en rechts van x_0 positief. Dit betekent dat $f'(x)$ rond x_0 stijgend is en dus geldt $f''(x_0) > 0$. Net zo volgt uit $f'(x_0) = 0$ en $f''(x_0) < 0$, dat de functie $f(x)$ in het punt x_0 een maximum heeft.

Met onze kennis van Taylor reeksen kunnen we dit nu ook van een andere kant bekijken. We ontwikkelen $f(x)$ rond een kritiek punt x_0 met $f'(x_0) = 0$ in een Taylor reeks, dit geeft:

$$f(x_0 + h) = f(x_0) + \frac{1}{2} f''(x_0)\, h^2 + \dots$$

In een kleine omgeving van x_0 kunnen we de hogere termen h^n tegenover h^2 verwaarlozen, en om na te gaan of $f(x)$ in x_0 een lokaal extremum heeft, kunnen we in plaats van $f(x)$ de kwadratische functie

$$g(h) := f(x_0) + \frac{1}{2} f''(x_0)\, h^2$$

bekijken. Maar dit is juist de vergelijking van een parabool met toppunt $(0, f(x_0))$ en deze parabool is naar boven geopend als $f''(x_0) > 0$ en naar beneden geopend als $f''(x_0) < 0$. Voor $f''(x_0) > 0$ heeft $f(x)$ dus een minimum en voor $f''(x_0) < 0$ een maximum.

Als in een kritiek punt x_0 ook de tweede afgeleide $f''(x_0) = 0$ is, kunnen we nog steeds niet beslissen of de functie een minimum, maximum of een zadelpunt heeft. In dit geval moeten we de hogere afgeleiden bepalen tot dat we naar een n komen met $f^{(n)}(x_0) \neq 0$. Dan kunnen we weer de Taylor reeks van $f(x)$ in x_0 bepalen, deze is

$$f(x_0 + h) = f(x_0) + \frac{1}{n!} f^{(n)}(x_0)\, h^n + \dots$$

en in een kleine omgeving van x_0 kunnen we in plaats van $f(x)$ naar de functie

$$g(h) := f(x_0) + \frac{1}{n!} f^{(n)}(x_0)\, h^n$$

kijken. Nu zijn er drie mogelijke gevallen:

(1) Als n oneven is, heeft $f(x)$ in x_0 een zadelpunt, omdat $g(h)$ (tot op een verschuiving en een schaling na) een functie van de vorm h^3, h^5, enz. is.

(2) Als n even is en $f^{(n)}(x_0) > 0$, heeft $f(x)$ in x_0 een minimum, want in dit geval is $g(h)$ naar boven geopend (net zo als de functies $2x^4$ of πx^6).

(3) Als n even is en $f^{(n)}(x_0) < 0$, heeft $f(x)$ in x_0 een maximum, want in dit geval is $g(h)$ naar beneden geopend (net zo als $-3x^4$ of $-\sqrt{2}x^6$).

We krijgen dus de volgende classificatie voor kritieke punten van differentieerbare functies:

Stelling: Zij $f(x)$ een in het punt x_0 differentieerbare functie met $f'(x_0) = 0$ en zij $n \geq 2$ de kleinste n met $f^{(n)}(x_0) \neq 0$. Dan geldt:

(i) $f(x)$ heeft in x_0 een minimum als n even is en $f^{(n)}(x_0) > 0$;

(ii) $f(x)$ heeft in x_0 een maximum als n even is en $f^{(n)}(x_0) < 0$;

(iii) $f(x)$ heeft in x_0 een zadelpunt als n oneven is.

3.2 Kritieke punten van functies van meerdere variabelen

We kijken nu naar de vraag hoe we lokale extrema van functies van meerdere veranderlijken kunnen vinden. De ideeën die we hierbij hanteren zijn in principe hetzelfde als bij de gewone functies, we moeten alleen maar de afgeleide door de partiële afgeleiden vervangen.

We starten weer met de beschrijving van de consequenties van een extremum. Als een functie $f(\mathbf{x})$ in een punt $\mathbf{x}_0$ een lokaal extremum heeft, kunnen we naar de partiële afgeleiden in dit punt kijken. Maar bij de partiële afgeleide $\frac{\partial f}{\partial x_i}$ bekijken we de verandering van een functie $g(x_i)$ die we uit $f(\mathbf{x})$ krijgen, door de andere variabelen $x_1, \ldots, x_{i-1}, x_{i+1}, \ldots, x_n$ als constanten te beschouwen. Hieruit volgt dat de functie $f(\mathbf{x})$ alleen maar een extremum kan hebben, als de functie $g(x_i)$ van één variabel een extremum heeft, en dit betekent dat $\frac{\partial f}{\partial x_i}(\mathbf{x}_0) = 0$ moet zijn. Omdat dit argument voor iedere variabel x_i geldt, krijgen we als noodzakelijke voorwaarde voor een extremum in $\mathbf{x}_0$, dat de gradiënt in $\mathbf{x}_0$ nul moet zijn, dus:

Stelling: Als een functie $f(\mathbf{x})$ in een punt $\mathbf{x}_0$ een lokaal minimum of maximum heeft, dan geldt

$$\nabla f(\mathbf{x}_0) = 0.$$

Deze stelling kunnen we ook uit de interpretatie van de gradiënt afleiden, want de gradiënt $\nabla f(\mathbf{x}_0)$ wijst in de richting van de snelste toename van $f(\mathbf{x})$. Maar in een maximum mag de functie in geen enkele richting toenemen, dus moet de gradiënt nul zijn. Net zo wijst $-\nabla f(\mathbf{x}_0)$ in de richting van de snelste afname van de functie, en in een minimum mag de functie in geen richting afnemen, dus moet ook hier de gradiënt nul zijn.

We kunnen ook vanuit het perspectief van de Taylor reeks argumenteren. De lineaire benadering

$$f(\mathbf{x}_0 + \mathbf{h}) \approx T(\mathbf{x}_0 + \mathbf{h}) = f(\mathbf{x}_0) + \nabla f(\mathbf{x}_0) \cdot \mathbf{h}$$

geeft het raakvlak aan de grafiek van $f(\mathbf{x})$ in het punt $\mathbf{x}_0$ aan. Maar in een lokaal extremum moet het raakvlak horizontaal zijn, dus moet de lineaire benadering in een minimum of maximum een constante zijn, en dit betekent ook weer dat $\nabla f(\mathbf{x}_0) = 0$ moet zijn.

Net zo als bij gewone functies noemen we de punten $\mathbf{x}_0$ die aan de noodzakelijke voorwaarde $\nabla f(\mathbf{x}_0) = 0$ voldoen, de *kritieke punten* van $f(\mathbf{x})$.

Definitie: De punten $\mathbf{x}_0$ waar voor een differentieerbare functie $f(\mathbf{x})$ de gradiënt $\nabla f(\mathbf{x}_0) = 0$ is, heten *kritieke punten* van $f(\mathbf{x})$. De kritieke punten zijn juist de kandidaten voor lokale minima of maxima van $f(\mathbf{x})$.

Voorbeelden:

(1) Een open doos met rechthoekig grondvlak moet een bepaald volume V bevatten. Wat zijn de optimale afmetingen van de doos zo dat we zo weinig materiaal als mogelijk nodig hebben?

Als de zijden van het grondvlak afmetingen x en y hebben, moet de hoogte z van de doos $z = \frac{V}{xy}$ zijn. De oppervlakte van de doos is dus een functie $A(x, y)$ van de afmetingen van het grondvlak en er geldt

$$A(x, y) = xy + 2x\frac{V}{xy} + 2y\frac{V}{xy} = xy + 2\frac{V}{y} + 2\frac{V}{x}.$$

Voor de partiële afgeleiden geldt

$$\frac{\partial A}{\partial x} = y - \frac{2V}{x^2} \quad \text{en} \quad \frac{\partial A}{\partial y} = x - \frac{2V}{y^2}$$

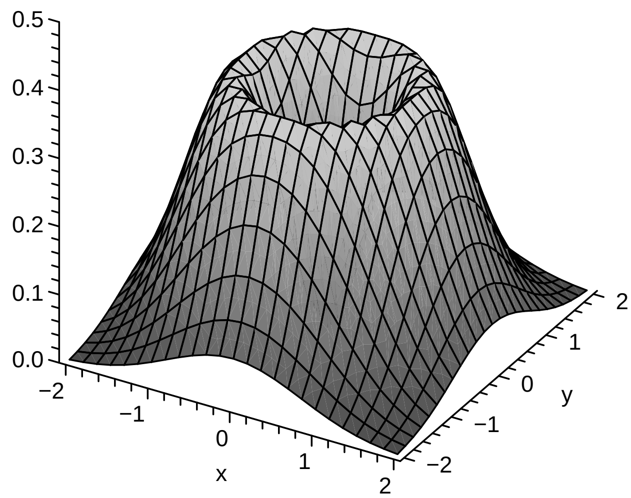
en uit $\frac{\partial A}{\partial x} = 0$ volgt $y = \frac{2V}{x^2}$. Dit ingevuld in $\frac{\partial A}{\partial y} = 0$ geeft $x = \frac{2V}{y^2} = \frac{x^4}{2V}$. Hieruit volgt $x = 0$ of $x^3 = 2V$, waarbij de eerste oplossing wegvalt, omdat in dit geval $y = \frac{2V}{x^2} = \infty$ zou moeten zijn.

Uit $y = \frac{2V}{x^2}$ volgt nu $y^3 = \frac{8V^3}{x^6} = \frac{8V^3}{4V^2} = 2V$, dus is $x = y = \sqrt[3]{2V}$ en we krijgen het niet erg verrassende resultaat dat het grondvlak een vierkant is.

Voor de hoogte z van de doos geldt dat $z = \frac{V}{xy} = \sqrt[3]{\frac{V^3}{4V^2}} = \sqrt[3]{\frac{V}{4}} = \frac{1}{2}\sqrt[3]{2V} = \frac{1}{2}x$, dus is de doos half zo hoog als lang en breed.

(2) We bepalen de kritieke punten van de functie

$$f(x, y) := (x^2 + y^2)\, e^{-x^2-y^2}$$



Figuur I.11: Grafiek van de functie $f(x, y) = (x^2 + y^2)e^{-x^2-y^2}$.

waarvan de grafiek (in de vorm van een vulkaan) in Figuur I.11 te zien is.

Voor de partiële afgeleiden geldt

$$\frac{\partial f}{\partial x} = 2x\, e^{-x^2-y^2} - 2x(x^2 + y^2)\, e^{-x^2-y^2} = 2x\, e^{-x^2-y^2}(1 - x^2 - y^2)$$
$$\frac{\partial f}{\partial y} = 2y\, e^{-x^2-y^2} - 2y(x^2 + y^2)\, e^{-x^2-y^2} = 2y\, e^{-x^2-y^2}(1 - x^2 - y^2)$$

en hieruit volgt dat $\nabla f(x, y) = 0$ voor $(x, y) = (0, 0)$ en voor (x, y) met $x^2 + y^2 = 1$, dus voor punten op een cirkel met straal 1 rond $(0, 0)$. Het eerste geval geeft het minimum in het centrum van de vulkaan, het tweede geval geeft de lokale maxima op de rand van de vulkaan.

Merk op dat we de extreme alleen maar met behulp van de grafiek van de functie als minima of maxima hebben geïdentificeerd. Hoe we dit zonder grafiek kunnen herkennen, gaan we straks behandelen.

(3) We bekijken de functie $f(x, y) := x^2y + xy^2$. Er geldt

$$\frac{\partial f}{\partial x} = 2xy + y^2 = y(2x + y) \quad \text{en} \quad \frac{\partial f}{\partial y} = x^2 + 2xy = x(x + 2y).$$

Uit $\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{\partial f}{\partial y} = 0$ volgt $x = y = 0$, want voor $x \neq 0$ volgt $y = -2x$ en $y = -\frac{1}{2}x$ en dit is onmogelijk. Dus is $(x, y) = (0, 0)$ het enige kritieke punt. Maar op de lijn $x = y$ is de functie $f(x, y)$ gelijk aan $2x^3$, en is dus < 0 voor $x < 0$ en > 0 voor $x > 0$, dus heeft de functie in $(0, 0)$ geen maximum of minimum.

OPDRACHT 12 *Vind de kritieke punten voor* $f(x,y) := x^3 + y^3 - 3x - 12y + 20$.

3.3 Criterium voor lokale extrema

Het voorbeeld (3) van de functie $f(x,y) = x^2y + xy^2$ laat zien dat (net als bij gewone functies van één variabel) een functie van meerdere veranderlijken in een kritiek punt niet noodzakelijk een maximum of minimum hoeft te hebben.

Definitie: Een kritiek punt $\mathbf{x}_0$ met $\nabla f(\mathbf{x}_0) = 0$ die geen extremum van de functie $f(\mathbf{x})$ is noemt men een *zadelpunt* van $f(\mathbf{x})$. In een zadelpunt vindt men in iedere (willekeurig kleine) omgeving van $\mathbf{x}_0$ punten $\mathbf{x}$ met $f(\mathbf{x}) > f(\mathbf{x}_0)$ en punten met $f(\mathbf{x}) < f(\mathbf{x}_0)$.

De vraag is nu, hoe we erover kunnen beslissen of een kritiek punt een minimum, maximum of een zadelpunt is. Hiervoor zullen we analoog met het geval van gewone functies de Taylor reeks in het kritieke punt $\mathbf{x}_0$ gebruiken, beter gezegd bekijken we de kwadratische benadering van $f(\mathbf{x})$ door de Taylor veelterm van graad 2.

We veronderstellen vanaf nu dat $\mathbf{x}_0$ een kritiek punt van de functie $f(\mathbf{x})$ is, dus dat $\nabla f(\mathbf{x}_0) = 0$ en we noteren met $H(\mathbf{x}_0)$ de Hesse matrix geëvalueerd in het punt $\mathbf{x}_0$. Dan is de kwadratische benadering van $f(\mathbf{x})$ in het punt $\mathbf{x}_0$ gegeven door

$$f(\mathbf{x}_0 + \mathbf{h}) \approx T(\mathbf{x}_0 + \mathbf{h}) = f(\mathbf{x}_0) + \frac{1}{2}\mathbf{h}^{tr} \cdot H(\mathbf{x}_0) \cdot \mathbf{h}.$$

Als we de functie $f(\mathbf{x})$ alleen maar in een kleine omgeving van $\mathbf{x}_0$ bekijken, kunnen we de hogere termen van de Taylor reeks verwaarlozen, het gedrag van de functie wordt dan door de kwadratische benadering weergegeven. We krijgen nu rechtstreeks het volgende criterium voor minima en maxima:

Criterium:

(1) De functie $T(\mathbf{x})$ en dus ook de functie $f(\mathbf{x})$ heeft een *minimum* in $\mathbf{x}_0$ als $T(\mathbf{x})$ vanuit $\mathbf{x}_0$ in alle richtingen $\mathbf{h}$ toeneemt, d.w.z. als $\mathbf{h}^{tr} \cdot H(\mathbf{x}_0) \cdot \mathbf{h} > 0$ voor alle richtingen $\mathbf{h} \neq 0$.

(2) De functie $T(\mathbf{x})$ en dus ook de functie $f(\mathbf{x})$ heeft een *maximum* in $\mathbf{x}_0$ als $T(\mathbf{x})$ vanuit $\mathbf{x}_0$ in alle richtingen $\mathbf{h}$ afneemt, d.w.z. als $\mathbf{h}^{tr} \cdot H(\mathbf{x}_0) \cdot \mathbf{h} < 0$ voor alle richtingen $\mathbf{h} \neq 0$.

(3) Als er een richting $\mathbf{h}_1$ bestaat met $\mathbf{h}_1^{tr} \cdot H(\mathbf{x}_0) \cdot \mathbf{h}_1 > 0$ en een andere richting $\mathbf{h}_2$ met $\mathbf{h}_2^{tr} \cdot H(\mathbf{x}_0) \cdot \mathbf{h}_2 < 0$, dan heeft $T(\mathbf{x})$ en dus ook $f(\mathbf{x})$ in het punt $\mathbf{x}_0$ een zadelpunt.

Om dit criterium toe te passen, moeten we dus voor de symmetrische matrix $H := H(\mathbf{x}_0)$ beslissen of de producten $\mathbf{h}^{tr} \cdot H \cdot \mathbf{h}$ altijd positief, altijd negatief of geen van de twee zijn. Dit is eigenlijk een vraagstelling uit de Lineaire Algebra, die in het verband met inproducten ter sprake komt.

Positief definiete matrices

Definitie: Zij A een symmetrische $n \times n$-matrix, d.w.z. $A_{ij} = A_{ji}$ voor alle i, j (kort: $A^{tr} = A$).

(i) A heet *positief definiet* als $\mathbf{v}^{tr} \cdot A \cdot \mathbf{v} > 0$ voor alle $\mathbf{v} \neq 0$.

(ii) A heet *positief semidefiniet* als $\mathbf{v}^{tr} \cdot A \cdot \mathbf{v} \geq 0$ voor alle $\mathbf{v}$.

(iii) A heet *negatief definiet* als $\mathbf{v}^{tr} \cdot A \cdot \mathbf{v} < 0$ voor alle $\mathbf{v} \neq 0$.

(iv) A heet *negatief semidefiniet* als $\mathbf{v}^{tr} \cdot A \cdot \mathbf{v} \leq 0$ voor alle $\mathbf{v}$.

(v) Als er vectoren $\mathbf{v}_1$ en $\mathbf{v}_2$ bestaan met $\mathbf{v}_1^{tr} \cdot A \cdot \mathbf{v}_1 > 0$ en $\mathbf{v}_2^{tr} \cdot A \cdot \mathbf{v}_2 < 0$, heet A *indefiniet*.

Het idee achter deze definitie is, dat men algemeen met behulp van een symmetrische matrix A een bilineaire afbeelding op paren van vectoren kan definiëren door $(v, w) \mapsto v^{tr} \cdot A \cdot w$. Deze afbeelding is lineair in beide argumenten en is symmetrisch, d.w.z. verruilen van de argumenten verandert de waarde niet. Als A positief definiet is, laat zich met $\|v\| := \sqrt{v^{tr} \cdot A \cdot v}$ een lengte voor de vectoren definiëren.

Merk op: Uit de definite en uit $\mathbf{v}^{tr} \cdot A \cdot \mathbf{v} > 0 \Leftrightarrow \mathbf{v}^{tr} \cdot (-A) \cdot \mathbf{v} < 0$ volgt rechtstreeks, dat een matrix A positief definiet is dan en slechts dan als de tegengestelde matrix $-A$ negatief definiet is. Evenzo volgt dat A negatief definiet is dan en slechts dan als $-A$ positief definiet is.

Voorbeelden:

(1) De matrix $A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ is positief definiet, want voor $\mathbf{v} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$ geldt $\mathbf{v}^{tr} \cdot A \cdot \mathbf{v} = x^2 + y^2 > 0$ voor $\mathbf{v} \neq 0$.

(2) Voor de matrix $A = \begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & b \end{pmatrix}$ en $\mathbf{v} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$ geldt $\mathbf{v}^{tr} \cdot A \cdot \mathbf{v} = ax^2 + by^2$. Voor $a, b > 0$ is A positief definiet, voor $a, b < 0$ is A negatief definiet. In het geval $a \cdot b < 0$ is A indefiniet, met $\mathbf{v}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ en $\mathbf{v}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ volgt bijvoorbeeld voor $a > 0$ en $b < 0$ dat $\mathbf{v}_1^{tr} \cdot A \cdot \mathbf{v}_1 = a > 0$ en $\mathbf{v}_2^{tr} \cdot A \cdot \mathbf{v}_2 = b < 0$.

(3) De matrix $A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$ is positief semidefiniet, want voor $\mathbf{v} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$ geldt $\mathbf{v}^{tr} \cdot A \cdot \mathbf{v} = x^2 + 2xy + y^2 = (x + y)^2 \geq 0$. De matrix is niet positief definiet, want voor $y = -x$ is $\mathbf{v}^{tr} \cdot A \cdot \mathbf{v} = 0$ zonder dat $\mathbf{v} = 0$ is.

(4) De matrix $A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ is indefiniet, want voor $\mathbf{v} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$ geldt $\mathbf{v}^{tr} \cdot A \cdot \mathbf{v} = 2xy$, voor $\mathbf{v}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ is dus $\mathbf{v}_1^{tr} \cdot A \cdot \mathbf{v}_1 = 2 > 0$ en voor $\mathbf{v}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$ is $\mathbf{v}_2^{tr} \cdot A \cdot \mathbf{v}_2 = -2 < 0$.

Algemeen Voorbeeld: We bekijken de $n \times n$-diagonaalmatrix

$$A := \begin{pmatrix} d_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & d_n \end{pmatrix} \quad \text{met } A_{ii} = d_i \text{ en } A_{ij} = 0 \text{ voor } i \neq j.$$

Er geldt:

(a) A is positief definiet als $d_i > 0$ voor alle i;

(b) A is positief semidefiniet als $d_i \geq 0$ voor alle i;

(c) A is negatief definiet als $d_i < 0$ voor alle i;

(d) A is negatief semidefiniet als $d_i \leq 0$ voor alle i;

(e) A is indefiniet als er i en j bestaan met $d_i > 0$ en $d_j < 0$.

In het bijzonder geldt voor een diagonaalmatrix A die positief (of negatief) semidefiniet maar niet positief (of negatief) definiet is, dat $\det(A) = 0$, omdat in dit geval minstens een $d_i = 0$ is en $\det(A) = d_1 \cdot d_2 \cdot \ldots \cdot d_n$ geldt.

Het algemene voorbeeld geeft het cruciale idee, hoe we kunnen testen of een matrix positief of negatief definiet is. De volgende stelling geeft hiervoor een criterium aan. Hierbij bedoelen met de *linksboven $k \times k$-deelmatrix* van een matrix A de deelmatrix van A waarvoor de indices slechts tussen 1 en k lopen (in plaats van tussen 1 en n):

$$\left(\begin{array}{ccc|cc} A_{11} & \ldots & A_{1k} & \ldots & A_{1n} \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ A_{k1} & \ldots & A_{kk} & \ldots & A_{kn} \\ \hline \vdots & & \vdots & & \vdots \\ A_{n1} & \ldots & A_{nk} & \ldots & A_{nn} \end{array}\right).$$

Stelling: Zij A een symmetrische $n \times n$-matrix, dan geldt:

(i) A is positief definiet dan en slechts dan als alle linksboven $k \times k$-deelmatrices van A positieve determinant hebben.

(ii) A is negatief definiet dan en slechts dan als de linksboven $k \times k$-deelmatrices van A alternerend negatieve en positieve determinant hebben, dus als de 1×1-deelmatrix negatieve determinant heeft, de 2×2-deelmatrix positieve determinant, de 3×3-deelmatrix negatieve determinant enz.

Equivalent (en eenvoudiger) geldt: A is negatief definiet dan en slechts dan als de matrix $-A$ positief definiet is, dus als alle linksboven $k \times k$-deelmatrices van $-A$ positieve determinant hebben.

(iii) Als $\det(A) \neq 0$ is, is A indefiniet dan en slechts dan als nog A nog $-A$ positief definiet zijn.

We zien rechtstreeks in dat deze stelling voor diagonaalmatrices geldt. De grap is nu, dat we door een basistransformatie iedere symmetrische matrix op diagonaalvorm kunnen brengen, en een basistransformatie bewaart de eigenschap van een matrix positief of negatief definiet te zijn.

De attente lezer is natuurlijk gewaar geworden dat de stelling in het geval $\det(A) = 0$ geen uitspraak erover maakt of de matrix positief of negatief semidefiniet is of indefiniet. Hiervoor zou men de matrix A inderdaad door een basistransformatie op diagonaalvorm moeten brengen, dan laat het zich weer makkelijk aan de diagonaalelementen aflezen.

We gaan dit probleem hier echter niet verdiepen, omdat het geval dat de Hesse matrix determinant 0 heeft in de praktijk nauwelijks een rol speelt. Om in zo'n geval te beslissen of een kritiek punt een minimum, maximum of zadelpunt is, zou men net zo als in het geval $f''(x_0) = 0$ voor gewone functies naar hogere partiële afgeleiden dan de tweede moeten kijken.

Voorbeeld: Een 2×2-matrix $A = \begin{pmatrix} a & b \\ b & c \end{pmatrix}$ is positief definiet als $a > 0$ en $\det(A) = ac - b^2 > 0$. De matrix A is negatief definiet als $a < 0$ en $\det(A) = ac - b^2 > 0$. Als $\det(A) < 0$, is A indefiniet.

Toepassing op functies van twee variabelen

Als we de uitspraak van het vorige voorbeeld voor de Hesse matrix

$$H := H(x_0, y_0) = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(x_0, y_0) & \frac{\partial^2 f}{\partial x\, \partial y}(x_0, y_0) \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x\, \partial y}(x_0, y_0) & \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}(x_0, y_0) \end{pmatrix}$$

van een functie van twee veranderlijken herformuleren, krijgen we een handige stelling over de kritieke punten van een functie van twee veranderlijken.

Stelling: Zij $f(x, y)$ een functie van twee variabelen en zij (x_0, y_0) een kritiek punt, d.w.z. een punt met $\nabla f(x_0, y_0) = (0, 0)$. Verder zij $H = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{12} & H_{22} \end{pmatrix}$ de Hesse matrix van $f(x, y)$ in (x_0, y_0), d.w.z.

$$H_{11} = \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(x_0, y_0), \quad H_{12} = \frac{\partial^2 f}{\partial x\, \partial y}(x_0, y_0), \quad H_{22} = \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}(x_0, y_0).$$

(i) $f(x, y)$ heeft in het punt (x_0, y_0) een *lokaal minimum* als

$$H_{11} > 0 \text{ en } H_{11}H_{22} - H_{12}^2 > 0, \text{ dus als}$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(x_0, y_0) > 0 \quad \text{en} \quad \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(x_0, y_0) \cdot \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}(x_0, y_0) - (\frac{\partial^2 f}{\partial x\, \partial y}(x_0, y_0))^2 > 0.$$

(ii) $f(x,y)$ heeft in het punt (x_0, y_0) een *lokaal maximum* als

$$H_{11} < 0 \text{ en } H_{11}H_{22} - H_{12}^2 > 0, \text{ dus als}$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(x_0,y_0) < 0 \quad \text{en} \quad \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(x_0,y_0) \cdot \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}(x_0,y_0) - (\frac{\partial^2 f}{\partial x\,\partial y}(x_0,y_0))^2 > 0.$$

(iii) $f(x,y)$ heeft in het punt (x_0, y_0) een *zadelpunt* als

$$H_{11}H_{22} - H_{12}^2 < 0, \text{ dus als}$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(x_0,y_0) \cdot \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}(x_0,y_0) - (\frac{\partial^2 f}{\partial x\,\partial y}(x_0,y_0))^2 < 0.$$

Zo als eerder opgemerkt is deze stelling niet van toepassing als $\det(H) = 0$. In dit geval is de Hesse matrix positief of negatief semidefiniet en is er een vector $\mathbf{h} \neq 0$ met $\mathbf{h}^{tr} \cdot H \cdot \mathbf{h} = 0$. Deze situatie is analoog met het geval $f''(x_0) = 0$ voor gewone functies, waar pas de hogere termen van de Taylor reeks aangeven of het punt een extremum of een zadelpunt is. Dit geldt ook voor de functies van meerdere variabelen, men moet de hogere termen van de Taylor reeks raadplegen om te beslissen hoe zich de functie in een richting $\mathbf{h}$ met $\mathbf{h}^{tr} \cdot H \cdot \mathbf{h} = 0$ gedraagt. In de praktijk speelt dit probleem echter een minder belangrijke rol, dus zullen we genoegen nemen met het geval $\det(H) \neq 0$.

Voorbeeld 1: We bekijken de functie

$$f(x,y) := x^3 + 6xy^2 - 2y^3 - 12x.$$

Er geldt

$$\frac{\partial f}{\partial x} = 3x^2 + 6y^2 - 12 \quad \text{en} \quad \frac{\partial f}{\partial y} = 12xy - 6y^2 = 6y(2x - y).$$

Uit $\frac{\partial f}{\partial y} = 0$ volgt $y = 0$ of $y = 2x$. In het eerste geval volgt uit $\frac{\partial f}{\partial x} = 0$ dat $3x^2 = 12$, dus $x = \pm 2$. In het geval $y = 2x$ moet gelden dat $3x^2 + 24x^2 = 12$, dus $x^2 = \frac{12}{27} = \frac{4}{9}$, dus $x = \pm\frac{2}{3}$. Er zijn dus vier kritieke punten:

$$(2,0), \quad (-2,0), \quad (\frac{2}{3}, \frac{4}{3}), \quad (-\frac{2}{3}, -\frac{4}{3}).$$

Voor de analyse van de kritieke punten hebben we de tweede partiële afgeleiden nodig, er geldt

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = 6x, \quad \frac{\partial^2 f}{\partial x\,\partial y} = 12y, \quad \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} = 12x - 12y.$$

De Hesse matrix is dus

$$H = \begin{pmatrix} 6x & 12y \\ 12y & 12x - 12y \end{pmatrix}$$

en $\det(H) = 6x(12x - 12y) - (12y)^2 = 72x^2 - 72xy - 144y^2$. Voor de kritieke punten geeft dit de volgende tabel:

kritiek punt	H_{11}	$\det(H)$	type
$(2, 0)$	12	288	minimum
$(-2, 0)$	-12	288	maximum
$(\frac{2}{3}, \frac{4}{3})$	4	-288	zadelpunt
$(-\frac{2}{3}, -\frac{4}{3})$	-4	-288	zadelpunt

Voorbeeld 2: We onderzoeken de kritieke punten van de functie

$$f(x, y) := (x^2 - y^2)\, e^{\frac{-x^2-y^2}{2}}.$$

Er geldt

$$\frac{\partial f}{\partial x} = (2x - x(x^2 - y^2))\, e^{\frac{-x^2-y^2}{2}} \quad \text{en} \quad \frac{\partial f}{\partial y} = (-2y - y(x^2 - y^2))\, e^{\frac{-x^2-y^2}{2}}.$$

De exponentiële functie wordt nooit 0, dus vinden we de kritieke punten als oplossingen van de vergelijkingen

$$x(2 - (x^2 - y^2)) = 0 \quad \text{en} \quad y(-2 - (x^2 - y^2)) = 0.$$

Omdat $x^2 - y^2$ niet tegelijkertijd de waarden 2 en -2 kan hebben, moet $x = 0$ of $y = 0$ zijn, dit geeft de kritieke punten $(0, 0)$, $(\pm\sqrt{2}, 0)$ en $(0, \pm\sqrt{2})$.

Voor de tweede partiële afgeleiden, dus de elementen H_{ij} van de Hesse matrix, krijgen we:

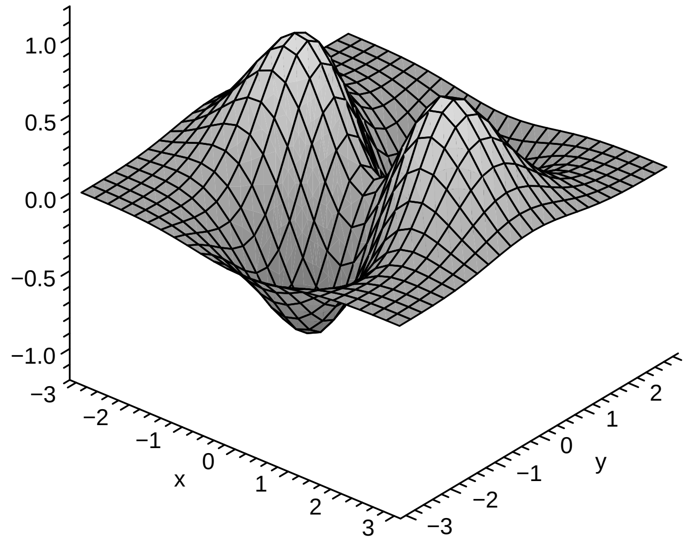
$$\begin{aligned} H_{11} &= \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = (2 - 5x^2 + x^2(x^2 - y^2) + y^2)\, e^{\frac{-x^2-y^2}{2}} \\ H_{12} = H_{21} &= \frac{\partial^2 f}{\partial x\, \partial y} = xy(x^2 - y^2)\, e^{\frac{-x^2-y^2}{2}} \\ H_{22} &= \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} = (5y^2 - 2 + y^2(x^2 - y^2) - x^2)\, e^{\frac{-x^2-y^2}{2}}. \end{aligned}$$

Hiermee vinden we de volgende tabel voor de kritieke punten:

kritiek punt	H_{11}	H_{12}	H_{22}	$\det(H) = H_{11}H_{22} - H_{12}^2$	type
$(0, 0)$	2	0	-2	-4	zadelpunt
$(\sqrt{2}, 0)$	$-4e^{-1}$	0	$-4e^{-1}$	$16e^{-2}$	maximum
$(-\sqrt{2}, 0)$	$-4e^{-1}$	0	$-4e^{-1}$	$16e^{-2}$	maximum
$(0, \sqrt{2})$	$4e^{-1}$	0	$4e^{-1}$	$16e^{-2}$	minimum
$(0, -\sqrt{2})$	$4e^{-1}$	0	$4e^{-1}$	$16e^{-2}$	minimum

In de grafiek van de functie in Figuur I.12 kunnen we controleren dat onze analyse van de kritieke punten inderdaad klopt.

OPDRACHT 13 *Bepaal de kritieke punten van de functie* $f(x, y) := 4x^3 - 3x^2y + y^3 - 9y$ *en ga na of de punten minima, maxima of zadelpunten zijn.*



Figuur I.12: Grafiek van de functie $f(x,y) = (x^2 - y^2)e^{\frac{-x^2-y^2}{2}}$.

Functies van meer dan twee variabelen

Als we bij een functie $f(\mathbf{x})$ van meer dan twee variabelen willen testen of een kritiek punt een minimum, maximum of een zadelpunt is, is het meestal het eenvoudigste het criterium van de linksboven deelmatrices op het concrete voorbeeld toe te passen. Algemene formules zijn al voor 3 variabelen behoorlijk afschrikkend, we beperken ons daarom tot de algemene stelling en een voorbeeld.

Stelling: Zij $f(\mathbf{x})$ een functie van n variabelen, zij $\mathbf{x}_0$ een kritiek punt van $f(\mathbf{x})$, d.w.z. $\nabla f(\mathbf{x}_0) = 0$ en zij $H := H(\mathbf{x}_0)$ de Hesse matrix van $f(\mathbf{x})$ in het punt $\mathbf{x}_0$, d.w.z. $H_{ij} = \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \, \partial x_j}(\mathbf{x}_0)$. Dan geldt:

(i) $f(\mathbf{x})$ heeft in het punt $\mathbf{x}_0$ een lokaal minimum als H positief definiet is;

(ii) $f(\mathbf{x})$ heeft in het punt $\mathbf{x}_0$ een lokaal maximum als H negatief definiet is;

(iii) $f(\mathbf{x})$ heeft in het punt $\mathbf{x}_0$ een zadelpunt als H indefiniet is.

Voorbeeld: Zij de functie $f(x,y,z)$ gegeven door

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

Om de kritieke punten te vinden moeten we de eerste partiële afgeleiden bepalen. Er geldt

$$\frac{\partial f}{\partial x} = 2xy - 2, \quad \frac{\partial f}{\partial y} = x^2 + 2yz, \quad \frac{\partial f}{\partial z} = y^2 + 2z.$$

Uit $\frac{\partial f}{\partial z} = 0$ volgt $z = -\frac{y^2}{2}$. Dit ingevuld in $\frac{\partial f}{\partial y} = 0$ geeft $x^2 = y^3$ en hiermee volgt uit $\frac{\partial f}{\partial x} = 0$ dat $y^{\frac{5}{2}} = 1$. Dit geeft $y = 1$, $x = 1$ en $z = -\frac{1}{2}$, het enige kritieke punt is dus $\mathbf{x}_0 = (1, 1, -\frac{1}{2})$.

Om na te gaan of dit een minimum, maximum of een zadelpunt is, moeten we nu de tweede partiële afgeleiden bepalen. We krijgen

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = 2y, \quad \frac{\partial^2 f}{\partial x\, \partial y} = 2x, \quad \frac{\partial^2 f}{\partial x\, \partial z} = 0, \quad \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} = 2z, \quad \frac{\partial^2 f}{\partial y\, \partial z} = 2y, \quad \frac{\partial^2 f}{\partial z^2} = 2$$

dit geeft in het punt $\mathbf{x}_0 = (1, 1, -\frac{1}{2})$ de Hesse matrix

$$H(\mathbf{x}_0) = \begin{pmatrix} 2 & 2 & 0 \\ 2 & -1 & 2 \\ 0 & 2 & 2 \end{pmatrix}$$

Voor de linksboven deelmatrices van $H(\mathbf{x}_0)$ geldt

$$\det(\begin{pmatrix} 2 \end{pmatrix}) = 2 > 0, \quad \det(\begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 2 & -1 \end{pmatrix}) = -6 < 0, \quad \det(H) = -20.$$

De matrix is dus indefiniet en het kritieke punt $\mathbf{x}_0$ is een zadelpunt.

Toepassing: Regressielijn

Als belangrijke toepassing voor extrema van functies van meerdere veranderlijken bekijken we het bepalen van de regressielijn

$$L(x) := ax + b$$

door een verzameling $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \ldots, (x_n, y_n)$ van punten. Het idee is hierbij, dat er een lineaire samenhang $y = Ax + B$ tussen de x- en y-coördinaten van de punten verondersteld wordt, maar dat de parameters A en B onbekend zijn. Hiervoor wordt er uit een steekproef van punten een schatting a voor A en b voor B gemaakt door een lijn zo door de punten te leggen, dat de som van de kwadratische afwijkingen $(y_i - (ax_i + b))^2$ tussen de *gemeten* y-waarden y_i en de *berekende* waarden $\hat{y}_i := ax_i + b$ minimaal wordt. We kijken dus naar de functie

$$f(a, b) := \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2 = \sum_{i=1}^{n} (y_i - ax_i - b)^2$$

en moeten a en b zo bepalen dat $f(a, b)$ minimaal wordt.

Voor de partiële afgeleiden geldt

$$\frac{\partial f}{\partial a} = -2 \sum_{i=1}^{n} x_i (y_i - ax_i - b) \quad \text{en} \quad \frac{\partial f}{\partial b} = -2 \sum_{i=1}^{n} (y_i - ax_i - b)$$

en uit $\nabla f = 0$ volgt dat de gezochte parameters a en b oplossingen zijn van het lineaire stelsel vergelijkingen

$$\begin{pmatrix} \sum_{i=1}^n x_i^2 & \sum_{i=1}^n x_i \\ \sum_{i=1}^n x_i & n \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^n x_i y_i \\ \sum_{i=1}^n y_i \end{pmatrix}.$$

Uit de tweede vergelijking volgt in het bijzonder dat de regressielijn $ax+b$ door het zwaartepunt $(\overline{x}, \overline{y})$ met $\overline{x} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n x_i$ en $\overline{y} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n y_i$ loopt, met deze notatie luidt de tweede vergelijking namelijk $n\overline{x}a + nb = n\overline{y}$, dus geldt

$$b = \overline{y} - a\overline{x}.$$

Ook de eerste vergelijking kunnen we met een geschikte notatie voor gemiddelden iets eenvoudiger schrijven, met $\overline{x^2} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n x_i^2$ en $\overline{xy} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n x_i y_i$ krijgen we de vergelijking $\overline{x^2}a + \overline{x}b = \overline{xy}$. Als we in deze vergelijking b door $\overline{y} - a\overline{x}$ vervangen, krijgen we $\overline{x^2}a + \overline{x}(\overline{y} - a\overline{x}) = \overline{xy}$ en opgelost naar a geeft dit de bekende vergelijking

$$a = \frac{\overline{xy} - \overline{x}\,\overline{y}}{\overline{x^2} - \overline{x}^2}$$

voor de richtingscoëfficiënt van de regressielijn.

We moeten nu nog nagaan dat we inderdaad een minimum van de functie hebben gevonden. Hiervoor bepalen we de tweede partiële afgeleiden, er geldt

$$\frac{\partial^2 f}{\partial a^2} = 2\sum_{i=1}^n x_i^2, \quad \frac{\partial^2 f}{\partial a\,\partial b} = 2\sum_{i=1}^n x_i, \quad \frac{\partial^2 f}{\partial b^2} = 2n,$$

we krijgen dus de Hesse matrix

$$H = 2\begin{pmatrix} \sum_{i=1}^n x_i^2 & \sum_{i=1}^n x_i \\ \sum_{i=1}^n x_i & n \end{pmatrix}.$$

Het is duidelijk dat $H_{11} = 2\sum_{i=1}^n x_i^2 > 0$, omdat dit een som van kwadraten is. Met de notatie $\overline{x} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n x_i$ krijgen we verder

$$\begin{aligned} n(\sum_{i=1}^n (x_i - \overline{x})^2) &= n\sum_{i=1}^n x_i^2 - n\sum_{i=1}^n 2x_i\overline{x} + n\cdot n\overline{x} = n\sum_{i=1}^n x_i^2 - n^2\overline{x} \\ &= n\sum_{i=1}^n x_i^2 - (\sum_{i=1}^n x_i)^2 = \det(\frac{1}{2}H). \end{aligned}$$

Aan de linkerkant staat een som van kwadraten, dus is $\det(\frac{1}{2}H) > 0$ en dus ook $\det(H) > 0$. De Hesse matrix is dus altijd positief definiet, in het bijzonder ook in het kritieke punt (a, b) en dus hebben we een minimum gevonden.

3.4 Extrema onder randvoorwaarden

Vaak zijn problemen waarbij we minima of maxima van functies moeten bepalen zo geformuleerd, dat de oplossingen aan zekere randvoorwaarden moeten voldoen. In principe hebben we zo iets al gezien. In het voorbeeld van de open doos hadden we gezegd, dat de doos een bepaald volume V moet hebben. In principe moeten we dus voor een doos met de afmetingen x, y en z de oppervlakte $f(x, y, z) = xy + 2xz + 2yz$ onder de randvoorwaarde minimaliseren dat $xyz = V$ geldt. Deze randvoorwaarde hadden we gebruikt om de variabel z te verwijderen, door z door $\frac{V}{xy}$ te vervangen.

Meestal is het helaas zo, dat we een randvoorwaarde niet zo makkelijk naar één van de variabelen kunnen oplossen, of dat de functie die we dan krijgen erg ingewikkeld wordt. We zullen daarom nu naar een methode kijken, hoe we bij gegeven randvoorwaarden een minimum of maximum van een functie kunnen bepalen.

Het probleem voor functies van twee variabelen luidt als volgt: Voor een functie $f(x, y)$ is een extremum (maximum of minimum) gezocht onder de randvoorwaarde dat $g(x, y) = 0$.

> Een typische randvoorwaarde is, dat we een extremum op de rand van een begrensd oppervlak zo als een cirkelschijf willen bepalen. Als we bijvoorbeeld alleen maar de punten op een cirkel van straal 3 rond het punt $(1, 1)$ willen bekijken, hebben we de punten nodig waarvoor geldt dat $(x - 1)^2 + (y - 1)^2 = 3^2$, de randvoorwaarde is dan
>
> $$g(x, y) = (x - 1)^2 + (y - 1)^2 - 3^2 = 0.$$

We gaan nu na dat in een extremum (x_0, y_0) noodzakelijk geldt dat de gradiënten van $f(x, y)$ en $g(x, y)$ in dit punt parallel zijn, dus dat $\nabla f(x_0, y_0) = \lambda \nabla g(x_0, y_0)$ voor een zekere λ.

De punten (x, y) met $g(x, y) = 0$ vormen een niveaukromme van $g(x, y)$, dus staat ∇g in punten die aan de randvoorwaarde voldoen steeds loodrecht op de raaklijn aan $g(x, y)$. Stel nu dat in een punt (x_0, y_0) de gradiënt ∇f niet loodrecht op de raaklijn aan $g(x, y)$ staat, dan is de projectie $\nabla f_{||}$ van ∇f op de raaklijn aan $g(x, y)$ niet 0. Aan de ene kant kunnen we nu op de niveaukromme $g(x, y) = 0$ in de richting van $\nabla f_{||}$ lopen, omdat dit de richting van de raaklijn aan $g(x, y)$ is. Aan de andere kant neemt $f(x, y)$ in de richting van $\nabla f_{||}$ toe, omdat $\nabla f_{||}$ (als projectie van ∇f) niet loodrecht of ∇f staat. Als we vanuit het punt (x_0, y_0) in de richting van $\nabla f_{||}$ lopen, neemt $f(x, y)$ dus toe, als we in de tegengestelde richting $-\nabla f_{||}$ lopen, neemt $f(x, y)$ af, dus is (x_0, y_0) nog een maximum nog een minimum.

We kunnen hetzelfde argument met behulp van Taylor reeksen ook iets algemener formuleren, namelijk zo, dat het ook voor een functie $f(\mathbf{x})$ van n variabelen geldt. In dit geval is de randvoorwaarde gegeven door $g(\mathbf{x}) = 0$, waarbij ook $g(\mathbf{x})$ een functie van n variabelen is.

Omdat $g(\mathbf{x}) = 0$ een niveauoppervlak is, staat de gradiënt $\nabla g(\mathbf{x}_0)$ loodrecht op het raakvlak aan $g(\mathbf{x})$ in het punt $\mathbf{x}_0$. De richtingen $\mathbf{h}$ met $\nabla g(\mathbf{x}_0) \cdot h = 0$ zijn dus juist de richtingen in die we vanuit $\mathbf{x}_0$ mogen lopen, om verder aan de randvoorwaarde $g(\mathbf{x}) = 0$ te voldoen. Dit volgt ook uit de Taylor reeks voor $g(\mathbf{x})$: Voor kleine $\mathbf{h}$ geldt $g(\mathbf{x}_0 + \mathbf{h}) = g(\mathbf{x}_0) + \nabla g(\mathbf{x}_0) \cdot \mathbf{h}$ en als ook $\mathbf{x}_0 + \mathbf{h}$ aan de randvoorwaarde voldoet is $g(\mathbf{x}_0 + \mathbf{h}) = g(\mathbf{x}_0)$, dus moet $\nabla g(\mathbf{x}_0) \cdot \mathbf{h} = 0$ gelden.

Nu bekijken we de Taylor reeks van $f(\mathbf{x})$ in het punt $\mathbf{x}_0$. De lineaire benadering is

$$f(\mathbf{x}_0 + \mathbf{h}) \approx f(\mathbf{x}_0) + \nabla f(\mathbf{x}_0) \cdot \mathbf{h}$$

en in een extremum onder de randvoorwaarde $g(\mathbf{x}) = 0$ moet gelden, dat $\nabla f(\mathbf{x}_0) \cdot \mathbf{h} = 0$ voor alle richtingen $\mathbf{h}$ in die we onder de randvoorwaarde $g(\mathbf{x}) = 0$ mogen lopen. Maar we hebben net gezegd dat de mogelijke richtingen $\mathbf{h}$ juist de richtingen zijn die loodrecht op $\nabla g(\mathbf{x}_0)$ staan, dus moet in een extremum gelden dat

$$\nabla f(\mathbf{x}_0) \cdot \mathbf{h} = 0 \text{ voor alle } \mathbf{h} \text{ met } \nabla g(\mathbf{x}_0) \cdot \mathbf{h} = 0.$$

Dit betekent dat $\nabla f(\mathbf{x}_0)$ loodrecht op alle $\mathbf{h}$ staat, die zelf loodrecht op $\nabla g(\mathbf{x}_0)$ staan, dus moet $\nabla f(\mathbf{x}_0)$ loodrecht op het raakvlak aan $g(\mathbf{x})$ in het punt $\mathbf{x}_0$ staan. Maar de enige vectoren die loodrecht op dit raakvlak staan, zijn de (positieve en negatieve) veelvouden van $\nabla g(\mathbf{x}_0)$ en hieruit volgt dat

$$\nabla f(\mathbf{x}_0) = \lambda \nabla g(\mathbf{x}_0).$$

We hebben dus de volgende stelling ingezien:

Stelling: In een lokaal extremum $\mathbf{x}_0$ onder de randvoorwaarde $g(\mathbf{x}) = 0$ geldt dat $\nabla f(\mathbf{x}_0)$ en $\nabla g(\mathbf{x}_0)$ lineair afhankelijk zijn, dus dat

$$\nabla f(x_0, y_0) = \lambda \nabla g(x_0, y_0).$$

3.5 De methode van Lagrange multiplicatoren

Deze stelling hierboven geeft aanleiding tot de volgende methode: De functie

$$L(\mathbf{x}, \lambda) := f(\mathbf{x}) + \lambda g(\mathbf{x})$$

van de $n+1$ variabelen $x_1, \ldots, x_n$ en λ heet de *Lagrange functie* van $f(\mathbf{x})$ onder de randvoorwaarde $g(\mathbf{x}) = 0$. De variabel λ heet hierbij de *Lagrange multiplicator*. Voor de Lagrange functie geldt:

Stelling: Als $f(\mathbf{x})$ in het punt $\mathbf{x}_0$ een extremum onder de randvoorwaarde $g(\mathbf{x}) = 0$ heeft, dan is $\mathbf{x}_0$ een kritiek punt van de Lagrange functie $L(\mathbf{x}, \lambda) = f(\mathbf{x}) + \lambda g(\mathbf{x})$.

Stel namelijk dat $\mathbf{x}_0$ een kritiek punt van $L(\mathbf{x}, \lambda)$ is. Uit $\frac{\partial L}{\partial x_i} = 0$ voor $1 \leq i \leq n$ volgt dat $\frac{\partial f}{\partial x_i} + \lambda \frac{\partial g}{\partial x_i} = 0$ voor alle i en dus $\nabla f(\mathbf{x}_0) = -\lambda \nabla g(\mathbf{x}_0)$. (Merk op dat we tegenover de stelling van boven λ door $-\lambda$ hebben vervangen.)

Omdat $\frac{\partial L}{\partial \lambda} = g(\mathbf{x})$, volgt uit $\frac{\partial L}{\partial \lambda} = 0$ dat het punt $\mathbf{x}_0$ inderdaad aan de randvoorwaarde voldoet.

Voorbeeld 1: We bepalen de extrema van de functie

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

op de rand van de cirkel met straal 1 rond $(0, 0)$. De punten op de cirkel kunnen we beschrijven door de randvoorwaarde $x^2 + y^2 = 1$, dus is de functie $g(x, y)$ gegeven door $g(x, y) := x^2 + y^2 - 1$. De Lagrange functie is dus

$$L(x, y, \lambda) = x^2 + 2y^2 + \lambda(x^2 + y^2 - 1).$$

Er geldt

$$\frac{\partial L}{\partial x} = 2x + 2\lambda x, \quad \frac{\partial L}{\partial y} = 4y + 2\lambda y, \quad \frac{\partial L}{\partial \lambda} = x^2 + y^2 - 1.$$

Uit $\frac{\partial L}{\partial x} = 0$ volgt $2x(1+\lambda) = 0$, dus $x = 0$ of $\lambda = -1$. Uit $\frac{\partial L}{\partial y} = 0$ volgt $2y(2+\lambda) = 0$, dus $y = 0$ of $\lambda = -2$. Omdat λ niet tegelijkertijd -1 en -2 kan zijn, is noodzakelijk $x = 0$ of $y = 0$.

We krijgen dus de kritieke punten $(1, 0)$, $(-1, 0)$, $(0, 1)$ en $(0, -1)$ van de Lagrange functie.

Het is natuurlijk in dit voorbeeld niet moeilijk om in te zien dat onder de randvoorwaarde $x^2 + y^2 = 1$ geldt, dat $f(x, y) = (x^2 + y^2) + y^2 = 1 + y^2$, dus vinden we minima in $(\pm 1, 0)$ en maxima in $(0, \pm 1)$.

Voorbeeld 2: We bepalen de minima en maxima van de functie

$$f(x, y) := xy$$

op de cirkel met $x^2 + y^2 = 1$. De Lagrange functie is

$$L(x, y, \lambda) = xy + \lambda(x^2 + y^2 - 1)$$

en voor de partiële afgeleiden krijgen we

$$\frac{\partial L}{\partial x} = y + 2\lambda x, \quad \frac{\partial L}{\partial y} = x + 2\lambda y, \quad \frac{\partial L}{\partial \lambda} = x^2 + y^2 - 1.$$

Voor $x = 0$ volgt rechtstreeks $y = 0$ en andersom, dus moet volgens de randvoorwaarde noodzakelijk gelden dat $x \neq 0$ en $y \neq 0$. Uit de eerste twee vergelijkingen volgt dat $\frac{x}{y} = \frac{y}{x} = -2\lambda$, dit geeft $x^2 = y^2$ en hieruit volgt met de derde vergelijking dat $2x^2 = 1$, dus $x = \pm\frac{1}{\sqrt{2}}$ en evenzo $y = \pm\frac{1}{\sqrt{2}}$.

Men gaat na dat de vier punten $(\pm\frac{1}{\sqrt{2}}, \pm\frac{1}{\sqrt{2}})$ inderdaad voldoen aan $\nabla L = 0$, dus kritieke punten van de Lagrange functie zijn, en er geldt $f(\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}) = f(-\frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}}) = \frac{1}{2}$ en $f(\frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}}) = f(-\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}) = -\frac{1}{2}$, dus zijn de eerste twee punten maxima en de laatste twee punten minima van de functie.

Voorbeeld 3: We willen het punt (x, y, z) op het oppervlak gegeven door de vergelijking $z = x^2 + y^2$ bepalen, dat het dichtst bij het punt $P := (1, 1, \frac{1}{2})$ ligt. De functie $f(x, y, z)$ die we moeten bekijken is in dit geval de afstand van (x, y, z) van het punt P. Maar omdat wortels vaak onhandig zijn kijken we liever naar het kwadraat van de afstand, dus naar de functie

$$f(x, y, z) := (x-1)^2 + (y-1)^2 + (z - \frac{1}{2})^2 = x^2 - 2x + y^2 - 2y + z^2 - z + \frac{9}{4}.$$

De randvoorwaarde is in dit geval gegeven door $g(x, y, z) = 0$ met $g(x, y, z) = x^2 + y^2 - z$ en we krijgen de Lagrange functie

$$L(x, y, z, \lambda) = x^2 - 2x + y^2 - 2y + z^2 - z + \frac{9}{4} + \lambda(x^2 + y^2 - z).$$

Voor de partiële afgeleiden geldt

$$\frac{\partial L}{\partial x} = 2x - 2 + 2\lambda x,\ \frac{\partial L}{\partial y} = 2y - 2 + 2\lambda y,\ \frac{\partial L}{\partial z} = 2z - 1 - \lambda,\ \frac{\partial L}{\partial \lambda} = x^2 + y^2 - z$$

en op 0 zetten van de partiële afgeleiden naar x, y en z geeft

$$x = \frac{1}{1+\lambda}, \quad y = \frac{1}{1+\lambda}, \quad z = \frac{1+\lambda}{2}.$$

Dit ingevuld in $x^2+y^2 = z$ geeft $\frac{2}{(1+\lambda)^2} = \frac{1+\lambda}{2}$ en dus $(1+\lambda)^3 = 4$ of $\lambda = \sqrt[3]{4}-1$. Hieruit krijgen we voor x, y en z:

$$x = \frac{1}{\sqrt[3]{4}}, \quad y = \frac{1}{\sqrt[3]{4}}, \quad z = \frac{\sqrt[3]{4}}{2} = \frac{1}{\sqrt[3]{2}}.$$

Het gezochte punt op het oppervlak $z = x^2 + y^2$ met de kleinste afstand van P is dus $(\frac{1}{\sqrt[3]{4}}, \frac{1}{\sqrt[3]{4}}, \frac{1}{\sqrt[3]{2}})$.

Natuurlijk hadden we de vergelijking $x^2 + y^2 - z = 0$ ook naar z kunnen oplossen en $x^2 + y^2$ in plaats van z in de functie $f(x, y, z)$ invullen. Op deze manier krijgen we de nieuwe functie

$$h(x, y) = x^2-2x+y^2-2y+(x^2+y^2)^2-(x^2+y^2)+\frac{9}{4} = x^4+2x^2y^2+y^4-2x-2y+\frac{9}{4}$$

waarvan we het minimum zonder randvoorwaarden mogen bepalen. Er geldt

$$\frac{\partial h}{\partial x} = 4x^3+4xy^2-2 = 4x(x^2+y^2)-2 \quad \text{en} \quad \frac{\partial h}{\partial y} = 4y^3+4x^2y-2 = 4y(x^2+y^2)-2$$

en uit $\frac{\partial h}{\partial x} = 0$ volgt $x^2 + y^2 = \frac{1}{2x}$. Dit ingevuld in $\frac{\partial h}{\partial y} = 0$ geeft $\frac{4y}{2x} = 2$, dus moet $x = y$ gelden. Als we dit weer in $\frac{\partial h}{\partial x} = 0$ invullen, krijgen we $8x^3 = 2$ en dus $x = y = \frac{1}{\sqrt[3]{4}}$. Uit $z = x^2 + y^2$ volgt nu weer dat $z = \frac{1}{\sqrt[3]{2}}$.

Gelukkig geven beide methodes dezelfde oplossing. In het algemeen is het echter niet mogelijk, een variabel (zo als hier z) te elimineren, maar zelfs als dit lukt zijn de vergelijkingen $\nabla f = 0$ vaak moeilijk op te lossen. Zo als in dit voorbeeld geeft de methode met Lagrange multiplicatoren meestal eenvoudigere vergelijkingen, maar het zijn er natuurlijk meer vergelijkingen en meer onbekenden. Alles heeft zijn prijs!

OPDRACHT 14 *Bepaal het maximum van de functie $f(x, y, z) := x + z$ onder de randvoorwaarde $x^2 + y^2 + z^2 = 1$.*

Meerdere randvoorwaarden

Tot nu toe zijn we er altijd van uitgegaan dat de randvoorwaarde door één functie $g(\mathbf{x}) = 0$ gegeven is. Maar soms moet men ook naar meerdere randvoorwaarden kijken, bijvoorbeeld als het maximum van een functie op een kromme gezocht is, die gegeven is als doorsnede van twee oppervlakken in de ruimte.

In feite verandert bij meerdere randvoorwaarden niet zo erg veel: Als r randvoorwaarden gegeven zijn door $g_k(\mathbf{x}) = 0$ voor $1 \leq k \leq r$ moet in een extremum $\mathbf{x}_0$ gelden dat de gradiënt $\nabla f(\mathbf{x}_0)$ een lineaire combinatie van de gradiënten $\nabla g_k(\mathbf{x}_0)$ van de randvoorwaarden is. Er moeten dus coëfficiënten $\lambda_1, \ldots, \lambda_r$ bestaan met

$$\nabla f(\mathbf{x}_0) = -\lambda_1 \nabla g_1(\mathbf{x}_0) - \ldots - \lambda_r \nabla g_r(\mathbf{x}_0).$$

Ook dit is niet erg moeilijk in te zien: De toegelaten richtingen $\mathbf{h}$ in de we onder de randvoorwaarden vanuit een punt $\mathbf{x}_0$ mogen lopen, liggen in de doorsnede van de raakvlakken een de $g_k(\mathbf{x})$ in het punt $\mathbf{x}_0$. Maar de vectoren die loodrecht op deze doorsnede van raakvlakken staan, zijn juist de lineaire combinaties van de gradiënten $\nabla g_k(\mathbf{x}_0)$.

Men definieert nu de Lagrange functie

$$L(\mathbf{x}, \lambda_1, \ldots, \lambda_r) := f(\mathbf{x}) + \lambda_1 g_1(\mathbf{x}) + \ldots + \lambda_r g_r(\mathbf{x})$$

met Lagrange multiplicatoren $\lambda_1, \ldots, \lambda_r$ en vindt de extrema van $f(\mathbf{x})$ onder de randvoorwaarden $g_k(\mathbf{x})$ met behulp van de volgende stelling:

Stelling: Als $f(\mathbf{x})$ in het punt $\mathbf{x}_0$ een extremum onder de randvoorwaarden $g_1(\mathbf{x}) = 0, \ldots, g_r(\mathbf{x}) = 0$ heeft, dan is $\mathbf{x}_0$ een kritiek punt van de Lagrange functie $L(\mathbf{x}, \lambda_1, \ldots, \lambda_r) = f(\mathbf{x}) + \lambda_1 g_1(\mathbf{x}) + \ldots + \lambda_r g_r(\mathbf{x})$.

Voorbeeld: We bepalen de extrema van de functie $f(x, y, z) := 5x + y - 3z$ op de doorsnede van het vlak met de vergelijking $x + y + z = 0$ en de kogel van straal 1 rond $(0, 0, 0)$, dus onder de randvoorwaarden $g_1(x, y, z) := x + y + z = 0$ en $g_2(x, y, z) := x^2 + y^2 + z^2 - 1 = 0$. De Lagrange functie is

$$L(x, y, z, \lambda_1, \lambda_2) := 5x + y - 3z + \lambda_1(x + y + z) + \lambda_2(x^2 + y^2 + z^2 - 1)$$

en we krijgen de partiële afgeleiden

$$\frac{\partial L}{\partial x} = 5 + \lambda_1 + 2\lambda_2 x, \quad \frac{\partial L}{\partial y} = 1 + \lambda_1 + 2\lambda_2 y, \quad \frac{\partial L}{\partial z} = -3 + \lambda_1 + 2\lambda_2 z$$

$$\frac{\partial L}{\partial \lambda_1} = x + y + z, \quad \frac{\partial L}{\partial \lambda_2} = x^2 + y^2 + z^2 - 1.$$

Optellen van de drie eerste vergelijkingen geeft in verband met de vierde, dat $3 + 3\lambda_1 = 0$, dus $\lambda_1 = -1$. Hieruit volgt met de tweede dat $y = 0$ en dus $z = -x$. De laatste vergelijking geeft nu $2x^2 = 1$, dus $x = \pm\frac{1}{\sqrt{2}}$ en we krijgen als kritieke punten

$$\mathbf{x}_1 = (\frac{1}{\sqrt{2}}, 0, -\frac{1}{\sqrt{2}}) \quad \text{en} \quad \mathbf{x}_2 = (-\frac{1}{\sqrt{2}}, 0, \frac{1}{\sqrt{2}}).$$

Men gaat na dat $f(\mathbf{x}_1) = 4\sqrt{2}$ en $f(\mathbf{x}_2) = -4\sqrt{2}$, het eerste punt is dus een maximum, het tweede een minimum.

De kritieke punten van de Lagrange functie geven net als de kritieke punten van functies zonder randvoorwaarden alleen maar kandidaten voor minima of maxima. Om erover te beslissen of een punt inderdaad een minimum of maximum is, moet men op een iets slimmere manier dan zonder randvoorwaarden naar de tweede partiële afgeleiden kijken.

Maar bij dit soort vraagstukken is het bepalen van de kritieke punten meestal het grotere probleem, vaak volgt uit de samenhang dat een kritiek punt alleen maar een minimum of maximum kan zijn. We zullen deze vraag dus buiten beschouwing laten.

Toepassing: Entropie

Voor een discrete kansverdeling met kansen $p_1, \ldots, p_n$ voor n mogelijke uitkomsten definieert men de *entropie* H door

$$H := -\sum_{i=1}^{n} p_i \ {}^2\!\log(p_i),$$

waarbij we met ${}^2\!\log(x)$ de logaritme met basis 2 noteren (dus ${}^2\!\log(2^x) = x$). De entropie is een maat voor de onzekerheid die we over de uitkomsten volgens de gegeven kansverdeling hebben. Bijvoorbeeld zijn we bij een experiment met 2 mogelijke uitkomsten met $p_1 = 0.9$ en $p_2 = 0.1$ veel minder onzeker over de uitkomst dan bij een experiment met $p_1 = p_2 = 0.5$.

We zullen nu aantonen, dat de uniforme verdeling met $p_i = \frac{1}{n}$ voor alle kansverdelingen voor n uitkomsten de hoogste entropie heeft. De randvoorwaarde die we hanteren is natuurlijk $p_1 + \ldots + p_n = 1$, omdat we het over kansverdelingen hebben. Als Lagrange functie krijgen we

$$L(p_1, \ldots, p_n, \lambda) = -\sum_{i=1}^{n} p_i \ {}^2\!\log(p_i) + \lambda(\sum_{i=1}^{n} p_i).$$

Merk op dat ${}^2\!\log(x) = \frac{\log(x)}{\log(2)}$, dus is ${}^2\!\log'(x) = \frac{1}{\log(2)x}$. Er geldt

$$\frac{\partial L}{\partial p_i} = {}^2\!\log(p_i) + p_i \frac{1}{\log(2)p_i} + \lambda = {}^2\!\log(p_i) + \frac{1}{\log(2)} + \lambda$$

en uit $\frac{\partial L}{\partial p_i} = 0$ volgt dus ${}^2\!\log(p_i) = -\frac{1}{\log(2)} - \lambda$. In het bijzonder moeten dus alle p_i gelijk zijn en uit de randvoorwaarde volgt dan natuurlijk $p_i = \frac{1}{n}$.

Voor de entropie van de uniforme verdeling geldt dan $H = -\ {}^2\!\log(\frac{1}{n}) = {}^2\!\log(n)$, dus heeft een verdeling met 2^m mogelijke uitkomsten de entropie m. Algemeen geeft de entropie H aan hoeveel bits gemiddeld nodig zijn om de uitkomsten van een experiment te coderen.

Belangrijke begrippen in deze les

- kritieke punten
- lokale maxima/minima

- positief/negatief definiet
- extrema onder randvoorwaarden
- Lagrange functie, Lagrange multiplicatoren

Opgaven

21. De uitwerking van een hoeveelheid van x μg (microgram) van een medicijn is op een tijdstip t na de inneming gegeven door

$$f(x,t) = x^2(a-x)t^2e^{-t},$$

waarbij a de maximaal mogelijke hoeveelheid van de medicijn is. Wat is de maximale uitwerking van de medicijn die bereikt kan worden, en voor welke hoeveelheid wordt deze op welk tijdstip bereikt?

22. Vind de kritieke punten, lokale maxima, minima en zadelpunten van de volgende functies:

    (i) $f(x,y) := x^3 + 6xy^2 - 2y^3 - 12x$;
    (ii) $f(x,y) := xy\, e^{-(x^2+y^2)}$;
    (iii) $f(x,y) := \frac{x}{1+x^2+y^2}$;
    (iv) $f(x,y,z) := x^2y + y^2z + z^2 - 2x$.

23. Vind de kritieke punten van de volgende functies en beslis waar minima, maxima of zadelpunten liggen:

    (i) $f(x,y) := x^2 - y^2 + xy$;
    (ii) $f(x,y) := x^2 + y^2 + 3xy$;
    (iii) $f(x,y) := e^{1+x^2-y^2}$;
    (iv) $f(x,y) := x^2 - 3xy + 5x - 2y + 6y^2 + 8$;
    (v) $f(x,y) := \sin(x^2 + y^2)$;
    (vi) $f(x,y) := \cos(x^2 + y^2)$;
    (vii) $f(x,y) := y + x\sin(y)$;
    (viii) $f(x,y) := e^x \cos(y)$.

24. Vind de kritieke punten van de volgende functies en beslis waar minima, maxima of zadelpunten liggen:

    (i) $f(x,y) := xy + \frac{1}{x} + \frac{1}{y}$;
    (ii) $f(x,y) := \log(2 + \sin(xy))$;
    (iii) $f(x,y) := x\sin(y)$;
    (iv) $f(x,y) := (x+y)(xy+1)$.

25. Zij $f(x,y) := x^2 + y^2 + kxy$ waarbij k een constante is. Bepaal de kritieke punten van $f(x,y)$. Voor welke waarden van k heeft $f(x,y)$ een extremum, voor welke een zadelpunt?

26. Zij $f(x,y) := \frac{1}{xy}$. Vind het punt op de grafiek van $f(x,y)$ dat het dicht bij de oorsprong $(0,0,0)$ in $\mathbb{R}^3$ ligt, d.w.z. vind het punt $(x, y, \frac{1}{xy})$ met de kleinste afstand van $(0,0,0)$.

27. Vind de extrema van de volgende functies onder de aangegeven randvoorwaarden:

    (i) $f(x,y,z) := x - y + z$ onder de randvoorwaarde $x^2 + y^2 + z^2 = 2$;

    (ii) $f(x,y) := x - y$ onder de randvoorwaarde $x^2 - y^2 = 2$;

    (iii) $f(x,y) := x$ onder de randvoorwaarde $x^2 + 2y^2 = 3$;

    (iv) $f(x,y) := 3x + 2y$ onder de randvoorwaarde $2x^2 + 3y^2 = 3$;

    (v) $f(x,y,z) := x + y + z$ onder de randvoorwaarden $x^2 - y^2 = 1$ en $2x + z = 1$.

28. De temperatuur $T = T(x,y,z)$ op het oppervlak van een kogel van straal 1 rond de oorsprong $(0,0,0)$ is gegeven door $T(x,y,z) = xz + yz$. Vind de *hot spots* op de kogel, dus de punten met maxima van de temperatuur.

29. Een open doos moet volume V hebben. De onderkant van de doos moet stabiel zijn en de voorkant van de doos moet er mooi uitzien, daarom is het materiaal voor deze twee zijden van de doos vijf keer zo duur als het materiaal voor de andere drie zijden. Wat zijn de afmetingen van de goedkoopste doos met deze eigenschappen?

30. Bepaal het punt op de kromme gegeven door $17x^2+12xy+8y^2 = 100$ die het dichtst bij de oorsprong $(0,0)$ ligt. (De kromme is in feite een ellips die schuin in het vlak ligt.)

31. Bepaal (bij benadering) het punt op de grafiek van $y = \log(x)$ die het dichtst bij het punt $(1,1)$ ligt.

    (Je moet hierbij uiteindelijk een nulpunt van een gewone functie van x bepalen, die alleen maar numeriek maar niet analytisch te vinden is.)

32. Bepaal het maximum van de functie $f(x_1,\ldots,x_n) = x_1 \cdot \ldots \cdot x_n$ onder de randvoorwaarde $x_1 + \ldots + x_n = a$ voor een zekere $a > 0$. Veronderstel hierbij dat $x_i \geq 0$ voor alle i.

    Concludeer uit het resultaat dat het meetkundig gemiddelde $\sqrt[n]{x_1 \cdot \ldots \cdot x_n}$ uit positieve getallen x_i steeds kleiner of gelijk aan het rekenkundig gemiddelde $\frac{1}{n}(x_1 + \ldots + x_n)$ is.