НАО «Восточно-Казахстанский технический университет имени Д. Серикбаева»

Дисциплина «Методы оптимизации»

ЛЕКЦИЯ 11

Дифференцирование функций многих переменных

Образовательная программа 6B06103 Математическое и компьютерное моделирование

Объём: 2 академических часа. **Место в рабочей программе:** лекция 11.

Цель: научиться вычислять и интерпретировать частные производные, градиент и матрицу Гессе; строить линейную и квадратичную модели изменения функции; проверять производные вычислительным экспериментом.

План занятия: частные производные; дифференцируемость и полный дифференциал; градиент; производная по направлению; правило цепочки; матрица Гессе; формула Тейлора; аналитическая и численная проверка; самостоятельная работа.

Результаты обучения: студент различает частную производную и полный дифференциал, нормирует направление, вычисляет градиент и Гессиан, оценивает изменение функции и объясняет ограничения разностных формул.

В лекции 10 геометрия целевой функции исследовалась по поверхностям и линиям уровня. Производные позволяют описать ту же геометрию количественно: определить скорость изменения функции и её кривизну. Условия минимума и построение методов спуска будут подробно рассмотрены в следующей теме; здесь формируется необходимый аппарат [1–2].

1 Частные производные первого порядка

Пусть функция $f(x_1, \dots, x_n)$ определена в открытой окрестности точки $\mathbf{x}$. Для изучения влияния одной переменной остальные временно фиксируют. Частная производная по x_i определяется пределом

$$\frac{\partial f}{\partial x_i}(\mathbf{x}) = \lim_{h \to 0} \left(\frac{f(\mathbf{x} + h\mathbf{e}_i) - f(\mathbf{x})}{h} \right),$$

где $\mathbf{e}_i$ — вектор с единицей на месте i и нулями на остальных местах. В дальнейшем запись f_{x_i} обозначает ту же производную. При взятии производной заданные параметры считаются постоянными.

Правило вычисления. Дифференцирование по x_1 выполняется как для функции одной переменной: все $x_2, \dots, x_n$ считаются константами. При переходе к другой переменной роль постоянных меняется.

Рассмотрим знакомую по лекции 10 функцию

$$f(x_1, x_2) = 2(x_1 - 1)^2 + 2(x_1 - 1)(x_2 + 1) + 2(x_2 + 1)^2 + 3.$$

Обозначив $u = x_1 - 1$ и $v = x_2 + 1$, получаем

$$f_{x_1} = 4u + 2v, \qquad f_{x_2} = 2u + 4v.$$

В первом выражении член $2v^2$ исчезает, поскольку v не зависит от x_1. Перекрёстный член $2uv$ даёт $2v$. Во втором выражении аналогично получается $2u$. В точке $\mathbf{x}^0 = (2;0)$ имеем $u = v = 1$, поэтому обе частные производные равны 6.

Геометрически частная производная — наклон касательной к координатному сечению поверхности. Для данного примера

$$f(2+h,0) = 9 + 6h + 2h^2, \qquad f(2,h) = 9 + 6h + 2h^2.$$

Оба сечения в точке $h = 0$ имеют наклон 6, но это не означает, что функция одинаково изменяется во всех направлениях.

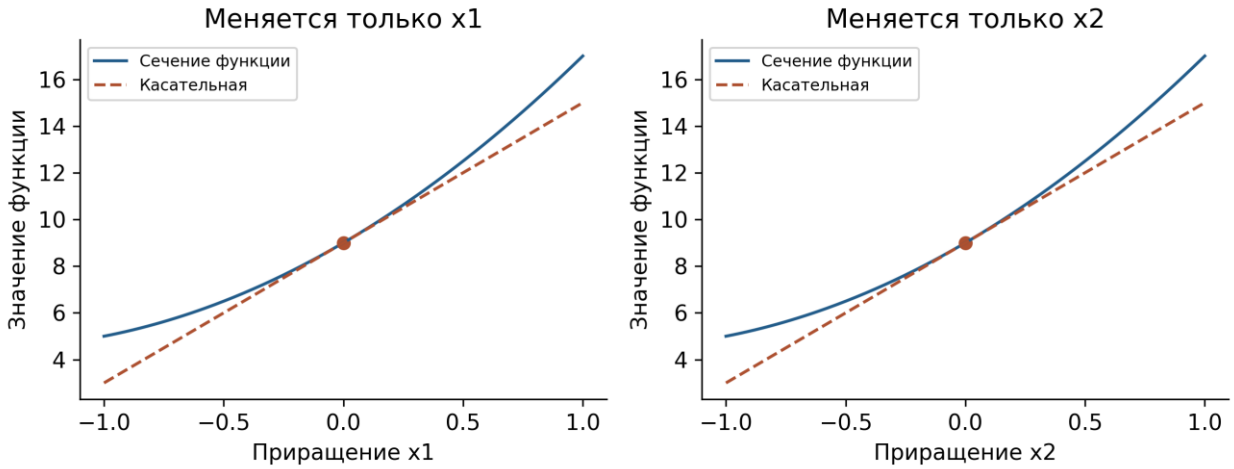


Рисунок 1 — Координатные сечения и касательные в исходной точке

Пример с произведением и экспонентой. Пусть

$$F(x_1, x_2) = e^{x_1} + x_1 x_2 + x_2^2.$$

Тогда $F_{x_1} = e^{x_1} + x_2$, а $F_{x_2} = x_1 + 2x_2$. В точке $(0;1)$ значения равны 2 и 2. Нельзя при дифференцировании $x_1 x_2$ по x_1 одновременно дифференцировать x_2: при вычислении частной производной это независимая фиксированная переменная.

2 Дифференцируемость и полный дифференциал

Существование частных производных в одной точке описывает изменение функции вдоль координатных осей. Для приближения изменения при произвольном малом векторе $\mathbf{h}$ требуется более сильное свойство — дифференцируемость.

Функция дифференцируема в точке $\mathbf{x}$, если её приращение представимо в виде

$$f(\mathbf{x}+\mathbf{h}) - f(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{n} f_{x_i}(\mathbf{x}) h_i + r(\mathbf{h}),$$

$$\frac{r(\mathbf{h})}{\| \mathbf{h} \|_2} \to 0 \quad \text{при } \mathbf{h} \to \mathbf{0}.$$

Последнее условие записывают как $r(\mathbf{h}) = o(\| \mathbf{h} \|_2)$. Оно означает, что остаток мал по сравнению с длиной приращения при приближении к точке любым способом, а не только по одной выбранной прямой.

Линейная часть называется **полным дифференциалом**:

$$df(\mathbf{x})[\mathbf{h}] = \sum_{i=1}^{n} f_{x_i}(\mathbf{x}) h_i.$$

При фиксированной точке это линейная функция от вектора приращения. В распространённой записи $df = \sum_i f_{x_i}\, dx_i$ символы dx_i обозначают компоненты приращения. Приращение Δf и дифференциал df в общем случае не равны: дифференциал даёт приближение первого порядка.

Достаточное условие. Если все частные производные существуют в некоторой открытой окрестности точки и непрерывны в этой точке, функция дифференцируема в ней. Непрерывная дифференцируемость в области обозначается $f \in C^1$.

Почему одного существования частных производных недостаточно. Определим

$$g(x,y) = \begin{cases} \dfrac{xy}{\sqrt{x^2+y^2}}, & (x,y) \neq (0,0), \\ 0, & (x,y) = (0,0). \end{cases}$$

Вдоль обеих координатных осей функция равна нулю, поэтому $g_x(0,0) = g_y(0,0) = 0$. При этом функция непрерывна в начале координат, поскольку

$$|g(x,y)| \leq \frac{1}{2}\sqrt{x^2+y^2}.$$

Если бы она была дифференцируема, её линейная часть была бы нулевой, а отношение $g(x,y)/\sqrt{x^2+y^2}$ стремилось бы к нулю. Но вдоль $x = y = t \neq 0$

$$g(t,t) = \frac{|t|}{\sqrt{2}}, \qquad \frac{g(t,t)}{\sqrt{2t^2}} = \frac{1}{2}.$$

Получено противоречие. Даже непрерывность функции вместе с существованием всех частных производных в точке не гарантирует дифференцируемость.

3 Градиент и линейная модель

Для дифференцируемой скалярной функции градиент — вектор-столбец частных производных [1]:

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} f_{x_1}(\mathbf{x}) \\ \vdots \\ f_{x_n}(\mathbf{x}) \end{pmatrix}.$$

Он позволяет записать дифференциал через скалярное произведение:

$$df(\mathbf{x})[\mathbf{h}] = \nabla f(\mathbf{x})^{\mathrm{T}} \mathbf{h}.$$

Линейная модель функции около точки $\mathbf{x}^0$ имеет вид

$$L(\mathbf{x}^0 + \mathbf{h}) = f(\mathbf{x}^0) + \nabla f(\mathbf{x}^0)^{\mathrm{T}} \mathbf{h}.$$

Для функции двух переменных уравнение касательной плоскости к графику записывается как

$$z = f(\mathbf{x}^0) + f_{x_1}(\mathbf{x}^0)(x_1 - x_1^0) + f_{x_2}(\mathbf{x}^0)(x_2 - x_2^0).$$

Вычисление вручную. Для квадратичной функции раздела 1 в точке $(2;0)$ получаем $f = 9$, $\nabla f = (6;6)^{\mathsf{T}}$. При $\mathbf{h} = (0{,}1;-0{,}05)$ дифференциал равен

$$df = 6 \cdot 0{,}1 + 6 \cdot (-0{,}05) = 0{,}3.$$

Линейная модель даёт $L = 9{,}3$. Непосредственная подстановка даёт $f(2{,}1;-0{,}05) = 9{,}315$. Разность $0{,}015$ обусловлена квадратичными членами, которые линейная модель не учитывает.

Градиент имеет размерность $n \times 1$, дифференциал и значение функции — скаляры. Произведение $\nabla f^{\mathsf{T}}\mathbf{h}$ допустимо по размерам: строка $1 \times n$ умножается на столбец $n \times 1$. Проверка размерностей помогает обнаруживать ошибки в формулах и программах.

4 Производная по направлению

Пусть $\mathbf{e}$ — единичный вектор, $\| \mathbf{e} \|_2 = 1$. Производная по направлению $\mathbf{e}$ определяется формулой

$$D_{\mathbf{e}} f(\mathbf{x}) = \lim_{t \to 0} \left(\frac{f(\mathbf{x} + t\mathbf{e}) - f(\mathbf{x})}{t} \right).$$

Если функция дифференцируема, подстановка $\mathbf{h} = t\mathbf{e}$ в её линейное представление даёт

$$D_{\mathbf{e}} f(\mathbf{x}) = \nabla f(\mathbf{x})^{\mathsf{T}} \mathbf{e}.$$

Если задан произвольный ненулевой вектор $\mathbf{p}$, для скорости изменения на единицу евклидова расстояния его нормируют:

$$\mathbf{e} = \frac{\mathbf{p}}{\| \mathbf{p} \|_2}.$$

В то же время производная функции пути $\varphi(t) = f(\mathbf{x} + t\mathbf{p})$ по параметру t при $t = 0$ равна $\nabla f(\mathbf{x})^{\mathsf{T}}\mathbf{p}$. Она определена и без нормировки. Эти две величины отличаются множителем $\| \mathbf{p} \|_2$.

Пример. В точке $(2;0)$ имеем градиент $(6;6)^{\mathsf{T}}$. Для $\mathbf{p} = (-3;-4)$ длина равна 5, единичное направление $\mathbf{e} = (-3/5;-4/5)$. Поэтому

$$D_{\mathbf{e}} f = 6\left(-\frac{3}{5}\right) + 6\left(-\frac{4}{5}\right) = -\frac{42}{5} = -8{,}4.$$

Производная по параметру пути с ненормированным вектором равна -42. Обе величины верны, но отвечают разным параметризациям. Если в ответе на вопрос о единичном направлении написать -42, будет потеряна нормировка.

Некоторые направления в той же точке:

Единичный вектор	Производная	Смысл
$(1;0)$	6	Рост при увеличении первой координаты
$(0;1)$	6	Рост при увеличении второй координаты
$(-3/5;-4/5)$	$-8{,}4$	Убывание в указанном направлении
$(-1;-1)/\sqrt{2}$	$-6\sqrt{2}$	Наибольшее убывание на единицу длины
$(1;-1)/\sqrt{2}$	0	Нет изменения в линейном приближении

Нулевая производная по направлению не означает постоянства функции вдоль всей прямой. В последнем направлении для нашего примера точное значение равно $9 + t^2$: линейный член отсутствует, но квадратичный остаётся.

5 Геометрический смысл градиента

Для любого единичного направления по неравенству Коши — Буняковского

$$-\| \nabla f(\mathbf{x}) \|_2 \leq \nabla f(\mathbf{x})^{\mathsf{T}} \mathbf{e} \leq \| \nabla f(\mathbf{x}) \|_2.$$

Если градиент ненулевой, правое равенство достигается при $\mathbf{e} = \nabla f / \| \nabla f \|_2$, а левое — при противоположном направлении. Следовательно, градиент задаёт направление наибольшего мгновенного роста, антиградиент — наибольшего мгновенного убывания **среди единичных направлений в евклидовой норме**.

Это утверждение относится к линейному приближению в данной точке. Оно не означает, что любой конечный шаг вдоль антиградиента обязательно уменьшит функцию. На выбор конечного шага влияет кривизна.

Пусть гладкая кривая $\mathbf{r}(t)$ лежит на линии уровня $f(\mathbf{r}(t)) = \gamma$. Дифференцируя по t, получаем

$$\nabla f(\mathbf{r}(t))^{\mathsf{T}} \mathbf{r}'(t) = 0.$$

Ненулевой градиент перпендикулярен касательной к регулярной линии уровня. В точке с нулевым градиентом направление нормали из этой формулы определить нельзя; геометрия уровня там может быть особой.

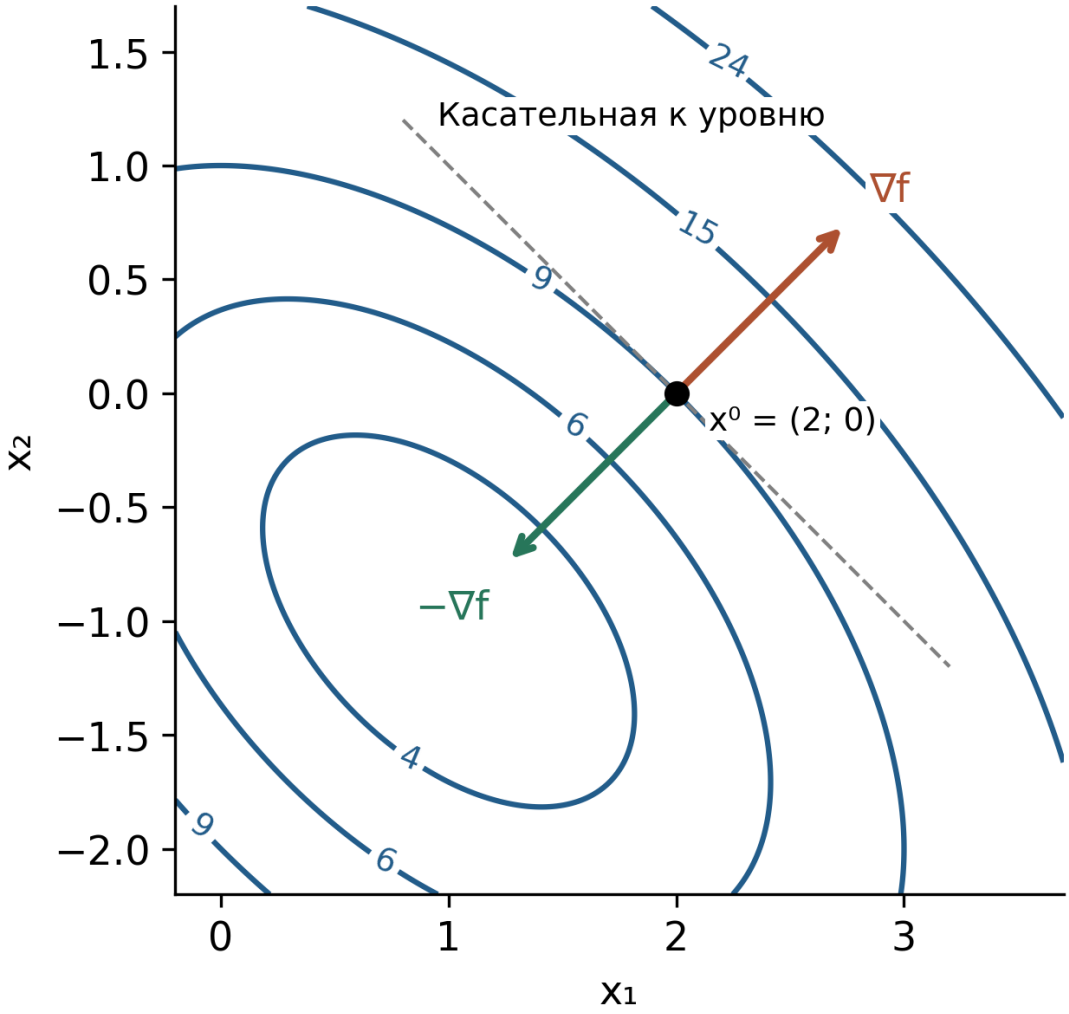


Рисунок 2 — Градиент направлен по нормали к линии уровня

На рисунке в точке $(2; 0)$ градиент пропорционален $(1; 1)$, поэтому касательная к уровню задаётся равенством $(x_1 - 2) + x_2 = 0$. Стрелки градиента и антиградиента укорочены для читаемости: они показывают направления, а не длину вектора $(6; 6)$ в масштабе осей.

Для единичного вектора $\mathbf{e} = (\cos\theta; \sin\theta)$ производная в данной точке равна

$$D_{\mathbf{e}} f = 6\cos\theta + 6\sin\theta = 6\sqrt{2}\cos(\theta - \pi/4).$$

Максимум достигается при угле 45°, минимум — при 225°.

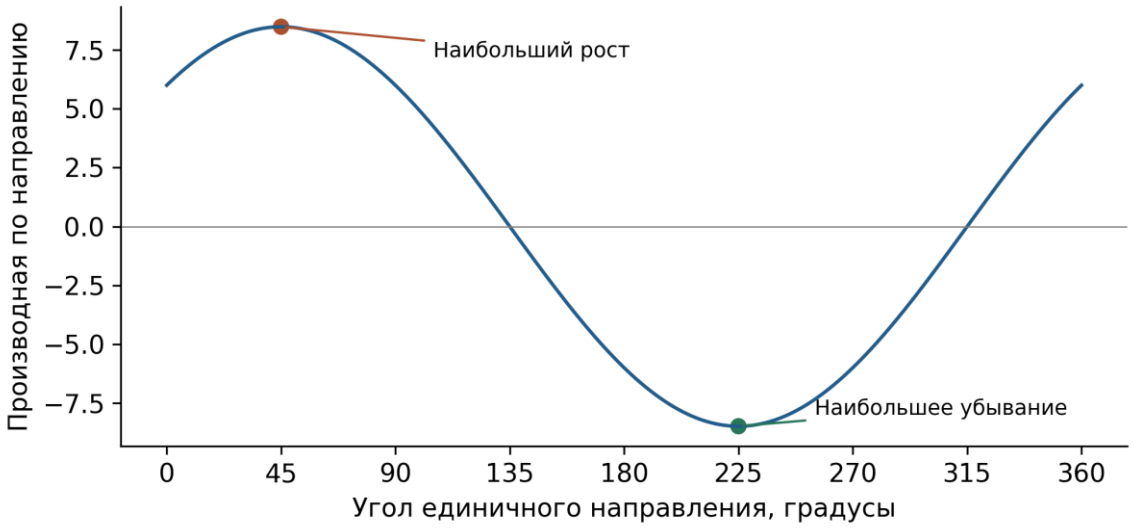


Рисунок 3 — Изменение производной при повороте единичного направления

Если на переменные наложены ограничения, направление антиградиента может оказаться недопустимым. Например, на границе области разрешены не все малые перемещения. Утверждение о наибольшем убывании среди всех единичных векторов само по себе не учитывает ограничения.

6 Правило цепочки и производная вдоль пути

Пусть $\mathbf{x} = \mathbf{r}(t)$ — дифференцируемый путь, а f дифференцируема в соответствующих точках. Для композиции $\varphi(t) = f(\mathbf{r}(t))$

$$\varphi'(t) = \sum_{i=1}^{n} f_{x_i}(\mathbf{r}(t)) r_i'(t) = \nabla f(\mathbf{r}(t))^{\mathsf{T}} \mathbf{r}'(t).$$

Пример. Для функции $F(x_1, x_2) = e^{x_1} + x_1 x_2 + x_2^2$ выберем путь $\mathbf{r}(t) = (t; 1 - t/2)$. В точке $t = 0$ имеем $\mathbf{r}(0) = (0; 1)$, $\mathbf{r}'(0) = (1; -1/2)$ и $\nabla F = (2; 2)^{\mathsf{T}}$. Поэтому $\varphi'(0) = 2 - 1 = 1$.

Проверим результат прямой подстановкой:

$$\varphi(t) = e^t + t(1 - t/2) + (1 - t/2)^2 = e^t + 1 - \frac{t^2}{4}.$$

Следовательно, $\varphi'(t) = e^t - t/2$ и $\varphi'(0) = 1$. Совпадение двух способов служит удобной проверкой вычислений.

При замене нескольких переменных $\mathbf{x} = T(\mathbf{z})$ вводят матрицу Якоби J_T, элементы которой равны $(J_T)_{ij} = \partial x_i / \partial z_j$. Для $G(\mathbf{z}) = f(T(\mathbf{z}))$

$$\nabla_{\mathbf{z}} G(\mathbf{z}) = J_T(\mathbf{z})^{\mathsf{T}} \nabla_{\mathbf{x}} f(T(\mathbf{z})).$$

Например, если $x_1 = z_1$, $x_2 = 5 z_2$, то производная G по z_2 равна $5 f_{x_2}$. Поэтому после масштабирования переменных компоненты градиента также меняются. Нельзя переносить градиент из старых координат в новые без преобразования.

7 Вторые производные и матрица Гессе

Повторное дифференцирование частных производных даёт вторые производные. Чтобы избежать неоднозначности порядка индексов, определим

$$H_{ij}(\mathbf{x}) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\frac{\partial f}{\partial x_i}\right)(\mathbf{x}).$$

Матрица H называется матрицей Гессе, или Гессианом. Для двух переменных

$$H(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} f_{x_1x_1} & f_{x_1x_2} \\ f_{x_2x_1} & f_{x_2x_2} \end{pmatrix}.$$

При $f \in C^2$ в окрестности точки смешанные производные равны, поэтому $H = H^{\mathsf{T}}$. Условие непрерывности вторых производных — достаточное основание для перестановки порядка. Сам факт существования двух смешанных производных в одной точке без дополнительных условий такой перестановки не гарантирует.

Для квадратичной функции раздела 1:

$$f_{x_1x_1} = 4, \quad f_{x_1x_2} = 2, \quad f_{x_2x_1} = 2, \quad f_{x_2x_2} = 4,$$

$$H = \begin{pmatrix} 4 & 2 \\ 2 & 4 \end{pmatrix}.$$

Гессиан постоянен и не зависит от точки. В лекции 10 эта функция записывалась как $f = (\mathbf{x} - \mathbf{x}^*)^{\mathsf{T}} Q (\mathbf{x} - \mathbf{x}^*) + 3$ с $Q = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$. Здесь $H = 2Q$, а не $H = Q$.

В общем случае для симметричной постоянной матрицы Q

$$\nabla(\mathbf{x}^{\mathsf{T}} Q \mathbf{x}) = 2Q\mathbf{x}, \qquad \nabla^2(\mathbf{x}^{\mathsf{T}} Q \mathbf{x}) = 2Q.$$

Если функция задана с множителем $1/2$, то $\nabla(1/2\,\mathbf{x}^{\mathsf{T}} Q \mathbf{x}) = Q\mathbf{x}$ и её Гессиан равен Q. Именно поэтому множитель $1/2$ часто используют при записи квадратичных моделей.

Для нелинейной функции $F = e^{x_1} + x_1 x_2 + x_2^2$ получаем

$$H_F(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} e^{x_1} & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}, \qquad H_F(0;1) = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}.$$

В отличие от квадратичного случая, матрица зависит от положения точки. Совпадение её значений в отдельных точках не означает постоянства во всей области.

8 Кривизна вдоль направления

Для прямолинейного пути $\mathbf{x}(t) = \mathbf{x}^0 + t\mathbf{p}$ с постоянным вектором $\mathbf{p}$ правило цепочки даёт

$$\varphi'(t) = \nabla f(\mathbf{x}^0 + t\mathbf{p})^{\mathsf{T}} \mathbf{p},$$

$$\varphi''(t) = \mathbf{p}^{\mathsf{T}} H(\mathbf{x}^0 + t\mathbf{p})\mathbf{p}.$$

Величина $\mathbf{p}^{\mathsf{T}} H \mathbf{p}$ называется квадратичной формой Гессиана. При единичном $\mathbf{p}$ она описывает вторую производную по длине вдоль выбранной прямой. Умножение направления на число c умножает эту величину на c^2.

Для $H = \begin{pmatrix} 4 & 2 \\ 2 & 4 \end{pmatrix}$ и $\mathbf{p} = (p_1; p_2)$ имеем

$$\mathbf{p}^{\mathsf{T}} H \mathbf{p} = 4p_1^2 + 4p_1p_2 + 4p_2^2.$$

Смешанный член равен $4p_1p_2$, поскольку в матричном произведении встречаются оба элемента H_{12} и H_{21}. Вдоль единичного направления $(1;1)/\sqrt{2}$ кривизна равна 6, а вдоль $(1;-1)/\sqrt{2}$ — 2. Это согласуется с разной длиной полуосей линий уровня.

Симметричная матрица положительно определена, если $\mathbf{p}^{\mathsf{T}}H\mathbf{p} > 0$ для любого ненулевого $\mathbf{p}$. Если неравенство нестрого, матрица положительно полуопределена. В этой терминологии положительная определённость является частным случаем положительной полуопределённости. Если форма принимает и положительные, и отрицательные значения, матрица неопределённая.

Предостережение. Положительность диагональных элементов не обеспечивает положительную определённость всей матрицы. Например,

$$H = \begin{pmatrix} 2 & 4 \\ 4 & 2 \end{pmatrix}, \qquad (1;-1)H(1;-1)^{\mathsf{T}} = -4.$$

Матрица описывает седловую геометрию функции $x_1^2 + 4x_1x_2 + x_2^2$ из лекции 10. Для симметричной матрицы второго порядка положительная определённость эквивалентна условиям $H_{11} > 0$ и $\det H > 0$.

Для криволинейного пути возникает дополнительное слагаемое:

$$\frac{d^2}{dt^2} f(\mathbf{r}(t)) = \mathbf{r}'(t)^{\mathsf{T}} H(\mathbf{r}(t))\mathbf{r}'(t) + \nabla f(\mathbf{r}(t))^{\mathsf{T}}\mathbf{r}''(t).$$

Поэтому формулу с одним квадратичным членом нельзя без проверки применять к произвольной кривой. Для прямой $\mathbf{r}''(t) = 0$, и дополнительный член исчезает.

9 Формула Тейлора второго порядка

Пусть $f \in C^2$ в окрестности точки $\mathbf{x}^0$. Тогда [1]

$$f(\mathbf{x}^0 + \mathbf{h}) = f(\mathbf{x}^0) + \nabla f(\mathbf{x}^0)^{\mathsf{T}}\mathbf{h} + \frac{1}{2}\mathbf{h}^{\mathsf{T}} H(\mathbf{x}^0)\mathbf{h} + o(\| \mathbf{h} \|_2^2).$$

Квадратичная модель получается отбрасыванием остатка. Обозначение $o(\| \mathbf{h} \|_2^2)$ означает, что отношение остатка к квадрату нормы стремится к нулю. При одном условии C^2 не следует автоматически заменять этот остаток на $O(\| \mathbf{h} \|_2^3)$: для кубической оценки нужны более сильные предположения.

Для двух переменных квадратичный член раскрывается как

$$\frac{1}{2}\mathbf{h}^{\mathsf{T}} H\mathbf{h} = \frac{1}{2} f_{x_1x_1} h_1^2 + f_{x_1x_2} h_1h_2 + \frac{1}{2} f_{x_2x_2} h_2^2.$$

Все производные здесь вычисляются в одной исходной точке. Перед смешанным членом в раскрытой формуле нет дополнительного множителя $1/2$: два симметричных члена уже объединились.

Связь с одномерной формулой. Введём $\psi(t) = f(\mathbf{x}^0 + t\mathbf{h})$, $0 \le t \le 1$. Если весь отрезок лежит в области гладкости, то одномерная формула Тейлора даёт

$$f(\mathbf{x}^0 + \mathbf{h}) = f(\mathbf{x}^0) + \nabla f(\mathbf{x}^0)^{\mathsf{T}}\mathbf{h} + \frac{1}{2}\mathbf{h}^{\mathsf{T}} H(\mathbf{x}^0 + \theta\mathbf{h})\mathbf{h},$$

где $0 < \theta < 1$ для данного приращения. Непрерывность H позволяет заменить матрицу в промежуточной точке матрицей в $\mathbf{x}^0$ с остатком $o(\| \mathbf{h} \|_2^2)$.

Для квадратичной функции Гессиан постоянен, поэтому разложение второго порядка **точно** при любом приращении. Для общей нелинейной функции это локальная модель, точность которой нужно оценивать.

10 Два примера вычисления по формуле Тейлора

10.1 Квадратичная функция

Для функции раздела 1 возьмём $\mathbf{x}^0 = (2; 0)$ и $\mathbf{h} = (0{,}1; -0{,}05)$. Уже получены $f(\mathbf{x}^0) = 9$ и $\nabla f^{\mathsf{T}}\mathbf{h} = 0{,}3$. Квадратичный член равен

$$\frac{1}{2}\mathbf{h}^{\mathsf{T}} H \mathbf{h} = 2(0{,}1)^2 + 2(0{,}1)(-0{,}05) + 2(-0{,}05)^2 = 0{,}015.$$

Таким образом, $f(\mathbf{x}^0 + \mathbf{h}) = 9 + 0{,}3 + 0{,}015 = 9{,}315$. Остаток равен нулю, поскольку исходная функция квадратичная.

10.2 Нелинейная функция

Для $F = e^{x_1} + x_1 x_2 + x_2^2$ положим $\mathbf{x}^0 = (0; 1)$ и возьмём то же приращение. Имеем

$$F(\mathbf{x}^0) = 2, \quad \nabla F(\mathbf{x}^0) = (2; 2)^{\mathsf{T}}, \quad H_F(\mathbf{x}^0) = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}.$$

Линейный член равен $2 \cdot 0{,}1 + 2 \cdot (-0{,}05) = 0{,}1$. Квадратичный член составляет

$$\frac{1}{2}\left((0{,}1)^2 + 2(0{,}1)(-0{,}05) + 2(-0{,}05)^2\right) = 0{,}0025.$$

Сравним результаты:

Способ	Значение	Абсолютная ошибка
Прямая подстановка	2,1026709181	—
Линейная модель	2,1	0,0026709181
Квадратичная модель	2,1025	0,0001709181

Разность между функцией и квадратичной моделью здесь обусловлена только экспонентой. По одномерной формуле Тейлора

$$R = e^{0{,}1} - 1 - 0{,}1 - \frac{(0{,}1)^2}{2} = \frac{e^{\xi}}{6}(0{,}1)^3, \qquad 0 < \xi < 0{,}1.$$

Следовательно, $|R| \le e^{0{,}1} \cdot 10^{-3}/6 \approx 1{,}842 \cdot 10^{-4}$. Фактическая ошибка $1{,}709181 \cdot 10^{-4}$ удовлетворяет оценке.

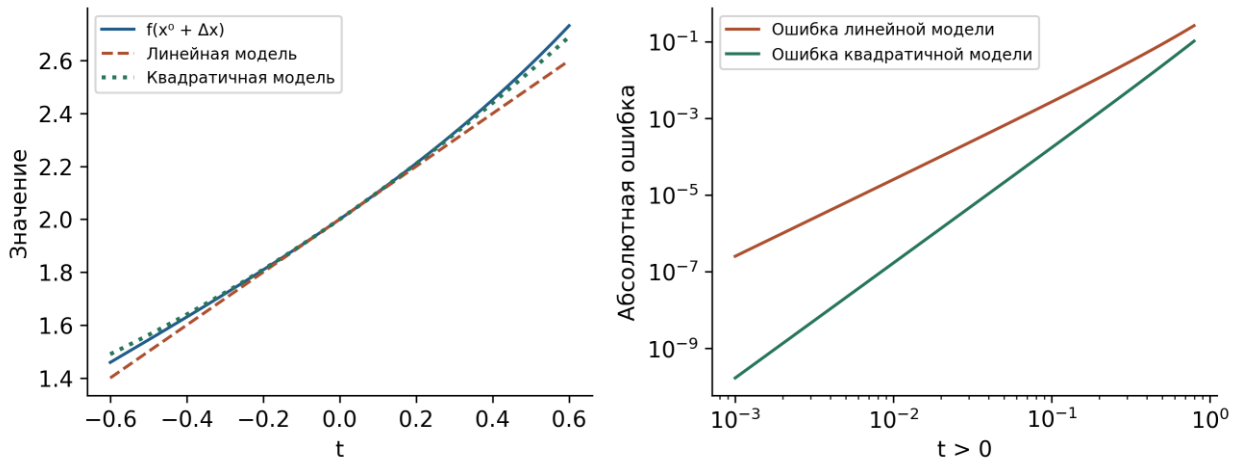


Рисунок 4 — Линейная и квадратичная модели вдоль приращения $(t; -t/2)$

На рисунке сравниваются точная функция $e^t + 1 - t^2/4$, линейная модель $2 + t$ и квадратичная модель $2 + t + t^2/4$. При $t \to 0$ линейная ошибка имеет порядок t^2, квадратичная — t^3. Для отрицательных и больших по модулю приращений значения ошибок меняются; локальную картину нельзя без проверки переносить далеко от исходной точки.

11 Почему антиградиент требует выбора шага

Пусть градиент ненулевой, $\mathbf{p} = -\nabla f(\mathbf{x}^0)$. Дифференцируемость даёт

$$f(\mathbf{x}^0 + \alpha\mathbf{p}) - f(\mathbf{x}^0) = -\alpha \parallel \nabla f(\mathbf{x}^0) \parallel_2^2 + o(\alpha), \qquad \alpha \to 0.$$

Поэтому при достаточно малом положительном α функция уменьшается. Это локальное утверждение, требующее, чтобы пробные точки лежали в области определения. При ограничениях они также должны быть допустимыми.

Для основной квадратичной функции в точке $(2; 0)$ направление антиградиента равно $(-6; -6)$. Прямая подстановка даёт

$$f((2; 0) + \alpha(-6; -6)) = 9 - 72\alpha + 216\alpha^2.$$

Сравнение с исходным значением 9 показывает, что уменьшение происходит при $0 < \alpha < 1/3$. При $\alpha = 1/6$ достигается точный минимум 3, при $\alpha = 1/3$ значение возвращается к 9, а при $\alpha = 1$ становится равным 153.

Таким образом, знак производной в нуле определяет поведение малых шагов, но не заменяет выбор шага. Построение алгоритмов спуска на основе этих фактов относится к следующим лекциям.

12 Численное дифференцирование и проверка формул

Когда значения функции доступны, производные можно приближать разностями. Для единичного координатного вектора $\mathbf{e}_i$ центральная формула имеет вид

$$f_{x_i}(\mathbf{x}) \approx \frac{f(\mathbf{x} + h\mathbf{e}_i) - f(\mathbf{x} - h\mathbf{e}_i)}{2h}.$$

При достаточной гладкости, например непрерывных третьих производных в нужной окрестности, её ошибка усечения имеет порядок h^2. Для диагональных элементов Гессиана используют

$$H_{ii}(\mathbf{x}) \approx \frac{f(\mathbf{x}+h\mathbf{e}_i) - 2f(\mathbf{x}) + f(\mathbf{x}-h\mathbf{e}_i)}{h^2}.$$

Смешанный элемент при $i \neq j$ приближается четырьмя значениями:

$$H_{ij}(\mathbf{x}) \approx \frac{f(\mathbf{x}+h\mathbf{e}_i+h\mathbf{e}_j) - f(\mathbf{x}+h\mathbf{e}_i-h\mathbf{e}_j)}{4h^2}$$
$$+\frac{-f(\mathbf{x}-h\mathbf{e}_i+h\mathbf{e}_j) + f(\mathbf{x}-h\mathbf{e}_i-h\mathbf{e}_j)}{4h^2}.$$

Для вторых производных ошибка усечения также имеет порядок h^2 при соответствующей гладкости четвёртого порядка. Все пробные точки должны принадлежать области определения. Вблизи её границы центральная формула может оказаться неприменимой.

Почему нельзя бесконечно уменьшать шаг. Вычитание близких чисел усиливает влияние округления. В типичной модели вычислений с ошибкой машинного масштаба вклад округления в первую производную растёт как $\varepsilon_{\text{mach}}/h$, а во вторую — как $\varepsilon_{\text{mach}}/h^2$, с коэффициентами, зависящими от масштаба функции и вычислений. Поэтому слишком малый шаг может ухудшить результат.

Для нелинейного примера в точке $(0;1)$ аналитически известны $\nabla F = (2;2)$ и $H_F = \begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & 2\end{pmatrix}$. Сравним их с центральными разностями. Для градиента используется евклидова норма ошибки, для матрицы — норма Фробениуса:

$$\| E \|_F = \sqrt{\sum_{i,j} E_{ij}^2}.$$

h	**Ошибка градиента**	**Ошибка Гессиана**
$1{,}000 \cdot 10^{-1}$	$1{,}668 \cdot 10^{-3}$	$8{,}336 \cdot 10^{-4}$
$1{,}000 \cdot 10^{-2}$	$1{,}667 \cdot 10^{-5}$	$8{,}333 \cdot 10^{-6}$
$1{,}000 \cdot 10^{-3}$	$1{,}667 \cdot 10^{-7}$	$8{,}318 \cdot 10^{-8}$
$1{,}000 \cdot 10^{-4}$	$1{,}667 \cdot 10^{-9}$	$4{,}698 \cdot 10^{-8}$
$1{,}000 \cdot 10^{-5}$	$1{,}325 \cdot 10^{-11}$	$2{,}552 \cdot 10^{-6}$
$1{,}000 \cdot 10^{-6}$	$7{,}856 \cdot 10^{-11}$	$3{,}173 \cdot 10^{-4}$
$1{,}000 \cdot 10^{-7}$	$1{,}169 \cdot 10^{-9}$	$4{,}283 \cdot 10^{-2}$
$1{,}000 \cdot 10^{-8}$	$1{,}719 \cdot 10^{-8}$	$2{,}646 \cdot 10^{0}$

Последние цифры и значения при очень малом шаге могут отличаться в зависимости от платформы и библиотек. Существенна общая картина: сначала уменьшение ошибки, затем потеря точности из-за округления.

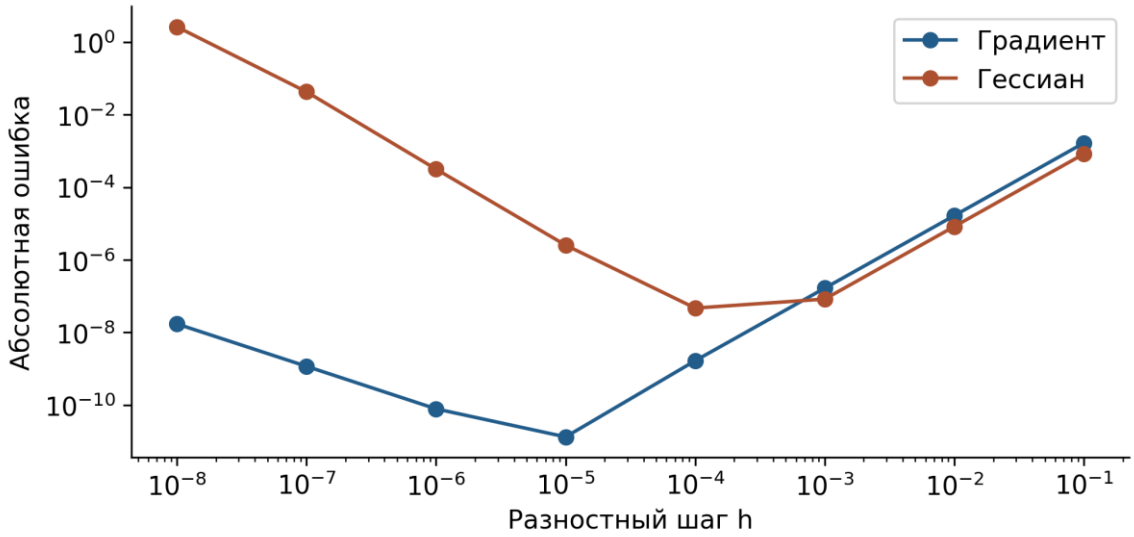


Рисунок 5 — Уменьшение разностного шага не всегда повышает точность

Для квадратичной функции центральные формулы алгебраически точны при любом ненулевом шаге, если вычисления точны. В обычной арифметике ошибки остаются из-за округления. Поэтому квадратичный пример полезен для проверки коэффициентов, но недостаточен для демонстрации ошибки усечения; для этого в программе выбран пример с экспонентой.

12.1 Реализация на Python

В архиве находится derivatives_2d.py. Функция finite_differences(f, x, h) возвращает численный градиент, Гессиан и число использованных значений функции. Четыре соседние точки повторно используются в обеих формулах. Вместе с центральной точкой и четырьмя угловыми точками получается **девять вычислений функции** на один шаг h.

В программе применяются обычные числа с плавающей точкой. Она проверяет размерность вектора, положительность шага и конечность значений. Аналитические производные задаются отдельно от разностных формул. Симметрия численного Гессиана обеспечивается присваиванием одного рассчитанного смешанного элемента обеим позициям; такая симметрия сама по себе не доказывает точность вычислений.

Для запуска нужны Python 3.10 или новее, NumPy и Matplotlib:

```
python -m pip install numpy matplotlib
python derivatives_2d.py
python derivatives_2d.py --example quadratic
python derivatives_2d.py --variant 7
```

В Windows вместо python можно использовать py. По умолчанию запускается нелинейный пример. Скрипт сохраняет таблицу ошибок CSV, полный результат JSON и график PNG 300 dpi. Для каждого примера создаётся своя подпапка. Повторный запуск того же примера перезаписывает его результаты.

При проверке производных полезно использовать несколько точек, несколько шагов и несколько направлений. Совпадение в одной точке не доказывает правильность формулы во всей области. Если аналитическая производная получена неверно, совпадение двух программ с одной и той же ошибкой тоже не является независимой проверкой.

13 Самостоятельная работа

Сохраняются 18 вариантов квадратичных функций из лекции 10:

$$f(x_1, x_2) = a(x_1 - s)^2 + 2b(x_1 - s)(x_2 - t) + c(x_2 - t)^2 + d.$$

В этой записи d — постоянное слагаемое. Для каждого варианта примите $\mathbf{x}^0 = (s + 1; t + 1)$, $\mathbf{h} = (0{,}1; -0{,}05)$ и $\mathbf{p} = (-3; -4)$.

№	a	b	c	s	t	d
1	2	1	2	-1	1	0
2	1	0	9	-1	-1	0
3	3	-1	2	-1	2	0
4	4	2	3	-1	0	0
5	1	0	25	-1	-2	0
6	5	-2	2	-1	1	0
7	2	1	2	0	1	3
8	1	0	9	0	-1	3
9	3	-1	2	0	2	3
10	4	2	3	0	0	3
11	1	0	25	0	-2	3
12	5	-2	2	0	1	3
13	2	1	2	1	1	-2
14	1	0	9	1	-1	-2
15	3	-1	2	1	2	-2
16	4	2	3	1	0	-2
17	1	0	25	1	-2	-2
18	5	-2	2	1	1	-2

Порядок выполнения.

1. Найдите обе частные производные первого порядка и запишите градиент в общем виде. Вычислите его в точке $\mathbf{x}^0$.
2. Найдите все четыре вторые производные. Составьте Гессиан, проверьте симметрию и объясните связь с матрицей квадратичной формы.
3. Нормируйте $\mathbf{p}$. Вычислите производную по единичному направлению и отдельно производную по параметру пути с ненормированным вектором.
4. Найдите единичные направления наибольшего роста и убывания. Запишите уравнение касательной к линии уровня в исходной точке.
5. Вычислите полный дифференциал для $\mathbf{h}$. Сравните линейную модель с точным значением функции.

6. Постройте квадратичную модель Тейлора. Покажите вручную, почему она совпадает с исходной квадратичной функцией в новой точке.
7. Запустите свой вариант в Python. Сопоставьте ошибки при $h = 10^{-1}, \dots, 10^{-8}$. Объясните, почему отсутствие ошибки усечения не устраняет округление.
8. Выполните общий нелинейный пример. Для приращений $(t; -t/2)$ при $t = 0{,}1$ и $t = 0{,}05$ сравните ошибки моделей и объясните наблюдаемый порядок.

Содержание отчёта: функция варианта; ручной вывод производных; значения в исходной точке; нормировка направления; линейная и квадратичная модели; таблица ошибок; график; объяснение расхождений. Программные результаты сопровождаются математическим выводом.

13.1 Формулы для самопроверки

При $u = x_1 - s, v = x_2 - t$

$$\nabla f = \begin{pmatrix} 2au + 2bv \\ 2bu + 2cv \end{pmatrix}, \qquad H = \begin{pmatrix} 2a & 2b \\ 2b & 2c \end{pmatrix}.$$

В точке $\mathbf{x}^0$ имеем $u = v = 1$, поэтому

$$f_0 = a + 2b + c + d, \qquad \nabla f_0 = (2a + 2b; 2b + 2c)^{\mathrm{T}}.$$

Для заданного единичного направления

$$D_{\mathbf{e}} f(\mathbf{x}^0) = -\frac{6a + 14b + 8c}{5}.$$

Полный дифференциал и квадратичная поправка равны

$$df = 0{,}2a + 0{,}1b - 0{,}1c,$$

$$\frac{1}{2}\mathbf{h}^{\mathrm{T}} H \mathbf{h} = 0{,}01a - 0{,}01b + 0{,}0025c.$$

Точное значение в новой точке равно сумме f_0, дифференциала и этой поправки. Для касательной к уровню используется равенство $\nabla f_0^{\mathrm{T}}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^0) = 0$. Во всех данных вариантах градиент в выбранной исходной точке ненулевой.

14 Контрольные вопросы и задачи

1. Какие переменные фиксируются при вычислении частной производной?
2. Почему существование частных производных в точке не гарантирует дифференцируемость?
3. Чем дифференциал отличается от точного приращения функции?
4. Как связаны градиент и касательная плоскость к графику?
5. Когда при вычислении производной по направлению нужна нормировка?
6. Почему антиградиент задаёт наибольшее мгновенное убывание?
7. При каком условии градиент задаёт нормаль к линии уровня?
8. Какие условия позволяют переставлять смешанные производные?
9. Почему Гессиан функции $\mathbf{x}^{\mathrm{T}} Q \mathbf{x}$ равен $2Q$ при симметричном Q?
10. Какой дополнительный член появляется во второй производной вдоль кривой?
11. Чем остаток $o(\| \mathbf{h} \|^2)$ отличается от оценки $O(\| \mathbf{h} \|^3)$?

12. Почему при численном дифференцировании слишком малый шаг опасен?

Задача 1. Для $f(x,y) = x^2y + 3y^2$ найдите градиент и Гессиан в точке $(1;2)$.

Ответ: $\nabla f = (2xy;\, x^2 + 6y)^{\mathsf{T}}$, поэтому $\nabla f(1;2) = (4;13)^{\mathsf{T}}$. Гессиан равен $\begin{pmatrix} 2y & 2x \\ 2x & 6 \end{pmatrix}$, а в заданной точке — $\begin{pmatrix} 4 & 2 \\ 2 & 6 \end{pmatrix}$.

Задача 2. В точке известен градиент $(3;4)^{\mathsf{T}}$. Найдите производную по направлению вектора $(0;-2)$ на единицу расстояния и наибольшую скорость убывания.

Ответ: единичное направление $(0;-1)$ даёт производную -4. Минимум производной среди всех единичных направлений равен -5 и достигается при $(-3/5;-4/5)$.

Задача 3. Для $f(x,y) = x^2 + y^2$ и пути $\mathbf{r}(t) = (t;t^2)$ найдите вторую производную композиции при $t = 1$.

Ответ: прямая подстановка даёт $f(\mathbf{r}(t)) = t^2 + t^4$, вторая производная равна $2 + 12t^2$, то есть 14. По правилу цепочки первый член равен $(1;2)\, 2I\, (1;2)^{\mathsf{T}} = 10$, второй — $(2;2)(0;2)^{\mathsf{T}} = 4$. Их сумма равна 14.

Задача 4. Для нелинейного примера F из раздела 10 уменьшите приращение вдвое. Как меняются ошибки моделей?

Ответ: при $\mathbf{h} = (0{,}05;-0{,}025)$ точное значение равно приблизительно 2,0506460964, линейная модель — 2,05, квадратичная — 2,050625. Ошибки составляют 0,0006460964 и 0,0000210964. По сравнению с приращением $(0{,}1;-0{,}05)$ они уменьшаются примерно в 4,13 и 8,10 раза, что согласуется с асимптотическими порядками 2 и 3.

15 Литература

[1] Пантелеев А. В., Летова Т. А. Методы оптимизации в примерах и задачах: учебное пособие. 4-е изд., испр. СПб.: Лань, 2015. 512 с. Глава 1, § 1, с. 9–11: градиент, матрица Гессе, разложение Тейлора и квадратичные формы.

[2] Рабочая программа дисциплины «Методы оптимизации», 2024. Образовательная программа 6B06103 «Математическое и компьютерное моделирование». Тема 11 «Методы многомерной оптимизации. Дифференцирование функции многих переменных».