2.3 Taylor-Formel und lokale Extrema

Erinnerung an Analysis I. $\varphi: \mathbb{R} \supset I \to \mathbb{R}$ sei eine $m+1$-mal stetig d'bare Funktion. Dann gilt für $x \in I$ und $h \in \mathbb{R}$ mit $x+h \in I$: Es existiert ein $\vartheta \in [x, x+h]$, so daß

$$\varphi(x+h) = \sum_{k=0}^{m} \frac{1}{k!}\, \varphi^{(k)}(x) \cdot h^{(k)} + \frac{1}{(m+1)!}\, \varphi^{(m+1)}(\vartheta) \cdot h^{m+1}$$

Diese Formel soll verallgemeinert werden auf Funktionen

$$f: \mathbb{R}^n \supset \Omega \to \mathbb{R}, \quad f \in C^{m+1}(\Omega).$$

Dazu führen wir für einen festen Vektor $h \in \mathbb{R}^n$ den Differentialoperator d_h ein, den wir durch

$$d_h f(x) = \sum_{j=1}^{n} h_j \frac{\partial f}{\partial x_j}(x)$$

für $f \in C^1(\Omega)$ definieren. Die Iterierten dieses Operators (= lineare Abbildung) mögen kompliziert aussehen, sind aber (da h konstant ist) zumindest leicht auszuschreiben. Z. B. haben wir

$$d_h^2 f(x) = d_h \sum_{j=1}^{n} h_j \frac{\partial f}{\partial x_j}(x) = \sum_{j,k=1}^{n} h_j h_k \frac{\partial^2 f}{\partial x_k \partial x_j}(x),$$

$$d_h^3 f(x) = \sum_{j,k,l=1}^{n} h_j h_k h_l \frac{\partial^3 f}{\partial x_l \partial x_k \partial x_j}(x) \quad \text{etc.}$$

Satz 1 (Taylorsche Formel): Es seien $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ offen, $x, x+h \in \Omega$, so daß $[x, x+h] \subset \Omega$. Die Funktion

$$f : \Omega \to \mathbb{R}$$

sei $m+1$-mal stetig diff'bar. Dann gibt es eine Zwischenstelle $\xi \in [x, x+h]$, so daß

$$f(x+h) = \sum_{k=0}^{m} \frac{1}{k!} d_h^k f(x) + \frac{1}{(m+1)!} d_h^{m+1} \cdot f(\xi).$$

Bew.: Wir definieren

$$\varphi : [0,1] \to \mathbb{R}, \quad t \mapsto \varphi(t) = f(x+th).$$

Dann ist $\varphi \in C^{m+1}([0,1])$ und die Taylorsche Formel für Funktionen einer Variablen ergibt

$$f(x+h) = \varphi(1) = \sum_{k=0}^{m} \frac{1}{k!} \varphi^{(k)}(0) + \frac{1}{(m+1)!} \varphi^{(m+1)}(\vartheta)$$

mit einer Zwischenstelle $\vartheta \in [0,1]$.

Per Induktion über $k \in \{0, \dots, m+1\}$ zeigen wir

$$\varphi^{(k)}(t) = d_h^k f(x+th) = \left(\sum_{j=1}^{n} h_j \frac{\partial}{\partial x_j} \right)^k f(x+th). \quad (!)$$

Ist dies bewiesen, folgt die behauptete Formel durch Wahl von $\xi = x + \vartheta h$.

Bew. von (!): Für $k=0$ ist nichts zu zeigen. Für den Induktionsschritt $k \to k+1$ benutzen wir (wie beim MWS) die Kettenregel:

$$\varphi^{(k+1)}(t) = \frac{d}{dt}\varphi^{(k)}(t) = \frac{d}{dt} d_h^k f(x+t\cdot h) \quad (\text{I.V.})$$

$$= d_h^k \frac{d}{dt} f(x+th) = d_h^k \sum_{j=1}^{n} h_j \cdot \frac{\partial f}{\partial x_j}(x+th)$$

Kettenregel, Spezialfall

$$= d_h^{k+1} f(x+t\cdot h) \qquad \square$$

Soweit die Analysis. In der Literatur findet man zumeist eine andere Darstellung, die Multiindices und Multinomialkoeffizienten verwendet. In der Regel führt das dazu, daß man vor lauter Kombinatorik die einfache Anwendung der Kettenregel nicht mehr erkennt, die doch den Kern der Sache bildet. Um die Übereinstimmung mit der Standarddarstellung nachzuweisen, benötigen wir einige Bezeichnungen und Definitionen:

- ein n-Tupel $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_n) \in \mathbb{N}_0^n$ wird als <u>Multiindex</u> bezeichnet, $|\alpha| = \sum_{j=1}^{n} \alpha_j$ heißt die <u>Länge</u> des Multiindex;
- Monome in mehreren Veränderlichen kann man damit in der folgenden Kurzform anschreiben: Ist $x = (x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$ und $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_n) \in \mathbb{N}_0^n$ ein Multiindex, so setzt man

  $$x^\alpha := x_1^{\alpha_1} \cdots x_n^{\alpha_n} = \prod_{j=1}^{n} x_j^{\alpha_j};$$

- In ähnlicher Weise definiert man für den Gradienten $\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial}{\partial x_n}\right)$:

$$\nabla^\alpha = \frac{\partial^{\alpha_1}}{\partial x_1^{\alpha_1}} \cdot \ldots \cdot \frac{\partial^{\alpha_n}}{\partial x_n^{\alpha_n}} =: \frac{\partial^{|\alpha|}}{\partial x_1^{\alpha_1} \cdots \partial x_n^{\alpha_n}}.$$

Das "Produkt" bezeichnet hier die Verkettung linearer Abbildungen, der partiellen Ableitungen nämlich.

- Fakultäten: Für $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_n)$ heißt $\alpha! := \prod_{j=1}^{n} \alpha_j!$ die Fakultät des Multiindex α;

- Multinomial- oder Polynomialkoeffizienten:
Ist $|\alpha| = N$, so setzt man $\binom{N}{\alpha} = \frac{N!}{\alpha!}$.
Diese verallgemeinern die Binomialkoeffizienten:
Ist $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2)$ mit $\alpha_1 + \alpha_2 = N$, so ist

$$\binom{N}{\alpha} = \frac{N!}{\alpha_1! \, \alpha_2!} = \frac{N!}{\alpha_1! (N-\alpha_1)!} = \binom{N}{\alpha_1} = \binom{N}{\alpha_2}.$$

In Verallgemeinerung des binomischen Lehrsatzes gilt dann:

Satz 2 (Polynomischer Lehrsatz): Sei R ein kommutativer Ring mit Einselement, $x_1, \dots, x_n \in R$ und $N \in \mathbb{N}$. Dann gilt

$$\left(\sum_{j=1}^{n} x_j \right)^N = \sum_{\substack{|\alpha| = N \\ \alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_n)}} \binom{N}{\alpha} x^\alpha .$$

Bew.: Induktion über n, nichts zu zeigen ist für $n=1$.

(Für $n=2$: binomischer Lehrsatz)

$$n \to n+1: \left(\sum_{j=1}^{n+1} x_j\right)^N = \left(\sum_{j=1}^{n} x_j + x_{n+1}\right)^N$$

$$= \sum_{\ell=0}^{N} \binom{N}{\ell} \left(\sum_{j=1}^{n} x_j\right)^{\ell} x_{n+1}^{N-\ell} \qquad \text{(binomischer Lehrsatz)}$$

$$= \sum_{\ell=0}^{N} \binom{N}{\ell} \sum_{\substack{|\alpha|=\ell \\ \alpha=(\alpha_1,\dots,\alpha_n)}} \binom{\ell}{\alpha} x_1^{\alpha_1} \cdots x_n^{\alpha_n} x_{n+1}^{N-\ell} \qquad \text{(I.V.)}$$

$$= \sum_{\ell=0}^{N} \sum_{\substack{|\alpha|=\ell \\ \alpha=(\alpha_1,\dots,\alpha_n)}} \frac{N!}{\alpha_1! \dots \alpha_n! (N-\ell)!} x_1^{\alpha_1} \cdots x_n^{\alpha_n} x_{n+1}^{N-\ell}$$

Nun setzen wir $\beta = (\beta_1, \dots, \beta_{n+1}) = (\alpha_1, \dots, \alpha_n, N-\ell)$. Dann ist $|\beta| = |\alpha| + N - \ell = N$, und die Doppelsumme erstreckt sich über alle $\beta \in \mathbb{N}_0^{n+1}$ mit $|\beta| = N$. Wir erhalten:

$$\dots = \sum_{\substack{|\beta|=N \\ \beta=(\beta_1,\dots,\beta_{n+1})}} \frac{N!}{\beta_1! \dots \beta_{n+1}!} x_1^{\beta_1} \cdots x_n^{\beta_n} x_{n+1}^{\beta_{n+1}}$$

$$= \sum_{\substack{|\beta|=N \\ \beta=(\beta_1,\dots,\beta_{n+1})}} \binom{N}{\beta} x^{\beta},$$ wie behauptet. $\square$

Anwendung auf d_h ergibt:

$$d_h^k = \left(\sum_{j=1}^{n} h_j \frac{\partial}{\partial x_j}\right)^k = \sum_{\substack{|\alpha|=k \\ \alpha=(\alpha_1,\dots,\alpha_n)}} \binom{k}{\alpha} (h\cdot\nabla)^{\alpha},$$

wobei $(h\cdot\nabla)^{\alpha} = \left(h_1 \frac{\partial}{\partial x_1}\right)^{\alpha_1} \cdots \left(h_n \frac{\partial}{\partial x_n}\right)^{\alpha_n}$.

Damit ergibt sich die folgende Darstellung der Taylorformel im mehrdimensionalen:

<u>Folgerung aus Satz 1:</u> Unter den o.g. Voraussetzungen gilt:

$$f(x+h) = \sum_{k=0}^{m} \frac{1}{k!} \sum_{\substack{|\alpha|=k \\ \alpha=(\alpha_1,\dots,\alpha_n)}} \binom{k}{\alpha} (h\cdot\nabla)^\alpha f(x)$$

$$+ \frac{1}{(m+1)!} \sum_{\substack{|\alpha|=m+1 \\ \alpha=(\alpha_1,\dots,\alpha_n)}} \binom{m+1}{\alpha} (h\cdot\nabla)^\alpha f(\xi),$$

wobei $(h\cdot\nabla)^\alpha = \prod_{j=1}^{n} \left(h_j \frac{\partial}{\partial x_j}\right)^{\alpha_j}$.

<u>Bem.:</u> (1) Die erste Summe kann man noch verändern zu

$$\sum_{\substack{|\alpha|\le m \\ \alpha=(\alpha_1,\dots,\alpha_n)}} \frac{1}{\alpha!} (h\cdot\nabla)^\alpha f(x), \text{ die zweite zu}$$

$$\sum_{\substack{|\alpha|=m+1 \\ \alpha=(\alpha_1,\dots,\alpha_n)}} \frac{1}{\alpha!} (h\cdot\nabla)^\alpha f(\xi).$$

Das ist dann exakt die Darstellung in Forster, Analysis 2, §7.

(2) Das Restglied $\frac{1}{(m+1)!} \sum_{|\alpha|=m+1} \binom{m+1}{\alpha} \dots$ benötigt man oft nicht in expliziter Form und kürzt es zu $R_{m+1}(h;f)$, $R_{m+1}(h,x;f)$ oder nur R_{m+1} ab. In den meisten Fällen ist es ausreichend zu wissen, dass

$$\lim_{h\to 0} \frac{1}{|h|^m} R_{m+1}(h) = 0 \quad \text{gilt.}$$

(3) Der Term

$$\sum_{k=0}^{m} \frac{1}{k!}\, d_h^k f(x) = \sum_{\substack{|\alpha| \le m \\ \alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_n)}} \frac{1}{\alpha!} (h \cdot \nabla)^\alpha f(x) = \dots$$

ist ein Polynom m-ten Grades in der Variablen $h = (h_1, \dots, h_n)$. Es wird als das Taylorpolynom m-ter Ordnung von f bezeichnet und hängt vom Entwicklungspunkt x ab.

Spezialfälle:

(1) $m = 0$: $f(x+h) = f(x) + \sum_{j=1}^{n} h_j \frac{\partial f}{\partial x_j}(\xi) = f(x) + \nabla f(\xi) \cdot h$

Wie in Analysis I erhalten wir den MWS (Satz 6 des vorigen Abschnitts als Spezialfall der Taylor-Formel.

(2) $m = 1$: $f(x+h) = f(x) + \nabla f(x) \cdot h + R_2(x, h; f)$ mit

$$R_2(x, h; f) = \frac{1}{2} \cdot d_h^2 f(\xi) = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{n} h_i h_j \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(\xi).$$

Dies ist eine quadratische Form mit Argument h, was man üblicherweise mit Hilfe einer Matrix in Kurzform schreibt. Dies führt auf die folgende Definition:

Def.: Für eine zweimal partiell diff'bare Funktion

$$f : \mathbb{R}^n \supset \Omega \to \mathbb{R}$$

heißt die $n \times n$ - Matrix

$$\operatorname{Hess} f(x) := \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(x) \right)_{1 \le i,j \le n}$$

die Hesse-Matrix von f im Punkt $x \in \Omega$.

Bem.: (1) Für $f \in C^2(\Omega)$ ist die Hesse-Matrix aufgrund des Satzes von Schwarz symmetrisch.

(2) Das Restglied R_2 kann man mit Hilfe der Hesse-Matrix schreiben als

$$R_2(x, h; f) = \frac{1}{2} \langle h, \operatorname{Hess} f(\xi) h \rangle \qquad (\xi \in [x, x+h]),$$

so daß

$$f(x+h) = f(x) + \nabla f(x) \cdot h + \frac{1}{2} \langle h, \operatorname{Hess} f(\xi) h \rangle .$$

letzter Spezialfall: $m = 3$. Hier ergibt sich, ebenfalls unter Verwendung der Hesse-Matrix

$$f(x+h) = f(x) + \nabla f(x) \cdot h + \frac{1}{2} \langle h, \operatorname{Hess} f(x), h \rangle + R_3(x, h; f)$$

mit $R_3(x, h, f) = \sum\limits_{\substack{|\alpha| = 3 \\ \alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_n)}} \frac{1}{\alpha!} (h \nabla)^\alpha f(\xi) = \frac{1}{6} d_h^3 f(\xi).$

Für eine zweimal stetig diff'bare Funktion

$$f : \mathbb{R} \supset I \to \mathbb{R}$$

kennen wir die folgenden notwendigen und hinreichenden Bedingungen für lokale Extrema:

(i) f besitzt in x_0 ein lokales Extremum $\Rightarrow f'(x_0)=0$

(ii) f " " x_0 " " Maximum $\Rightarrow f''(x_0) \leq 0$

(iii) $f'(x_0)=0$ und $f''(x_0)<0 \Rightarrow f$ hat in x_0 ein lok. Max.

(ii) und (iii) gelten entsprechend für lokale Minima, wenn wir die Ungleichheitszeichen umkehren. Diese Kriterien hatten wir in Analysis I mit Hilfe der Taylor-Formel gezeigt. Wir wollen jetzt ganz ähnlich verfahren, um sie auf Funktionen mehrerer Veränderlicher zu verallgemeinern. Dazu notieren wir zunächst, was im mehrdimensionalen unter einem lokalen Extremum zu verstehen ist:

Def.: Es sei $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ offen und $f : \Omega \to \mathbb{R}$ eine Funktion. f besitzt in $x \in \Omega$ ein <u>lokales Maximum</u> (<u>Minimum</u>), falls eine Umgebung $U(x)$ existiert, so daß

$$f(x) \geq f(y) \quad (f(x) \leq f(y)) \text{ für alle } y \in U(x).$$

Gilt $f(x) > f(y)$ $(f(x) < f(y))$ für alle $y \in U(x) \setminus \{x\}$, so spricht man von einem <u>isolierten</u> lokalen Maximum (Minimum).

Bem.: (1) Extremum = Maximum oder Minimum

(2) Unter einem globalen Maximum verstehen wir $\max\{f(x) : x \in \Omega\}$, falls dieses existiert. Entsprechend für's Minimum.

(3) Im Ggs. zum globalen Maximum, welches eindeutig bestimmt ist, kann es eine Vielzahl lokaler Maxima geben.

In Verallgemeinerung der notwendigen Bed. (i) zeigen wir zuerst:

Satz B: Es sei $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ offen und $f : \Omega \to \mathbb{R}$ partiell diff'bar. Besitzt f in $x_0 \in \Omega$ ein lokales Extremum, so gilt $\nabla f(x_0) = 0$.

Bew.: Wir wählen $\varepsilon > 0$ so, daß $B_\varepsilon(x_0) \subset \Omega$ und setzen $g_j : (-\varepsilon, \varepsilon) \to \mathbb{R}$, $t \mapsto g_j(t) := f(x_0 + te_j)$, $1 \le j \le n$. Dann besitzt jedes g_j in $t=0$ ein lokales Extremum. Nach (i) ist also

$$0 = g_j'(0) = \lim_{t\to 0} \frac{1}{t}\left(f(x_0+te_j) - f(x_0)\right) = \frac{\partial f}{\partial x_j}(x_0).$$

Dies gilt für jedes $j \in \{1, \dots, n\}$. Also ist

$$\nabla f(x_0) = 0.$$

$\square$

Welche Bedingung an die Hesse-Matrix

$$\operatorname{Hess} f(x) = \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(x) \right)_{1 \le i,j \le n}$$

verallgemeinert in geeigneter Weise die Ungleichungen $f''(x) \ge 0$, $f''(x) > 0$, etc. aus den Kriterien (ii) und (iii)? Dazu zunächst eine Definition!

<u>Def.</u>: Eine Matrix $A \in M_n(\mathbb{R})$ heißt

(1) positiv definit, wenn $\forall\, \xi \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$ gilt, dass $\langle \xi, A\xi \rangle > 0$;

(2) positiv semidefinit, wenn für alle $\xi \in \mathbb{R}^n$ $\langle \xi, A\xi \rangle \ge 0$ ist;

(3) negativ (semi-) definit, wenn $-A$ positiv (semi-) definit ist,

(4) indefinit, falls $\xi, \eta \in \mathbb{R}^n$ existieren, so dass $\langle \xi, A\xi \rangle > 0 > \langle \eta, A\eta \rangle$.

Für <u>symmetrische</u> Matrizen hat man die folgenden Kriterien für Definitheit:

Lemma 1: Eine symmetrische Matrix $A \in M_n(\mathbb{R})$ ist genau dann

(1) positiv definit, wenn alle Eigenwerte $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ von A positiv sind;

(2) positiv semidefinit, wenn alle λ_i, $1 \le i \le n$, nicht negativ sind;

(3) indefinit, wenn es Eigenwerte λ und μ von A gibt, so dass $\lambda > 0 > \mu$.

Bew.: Da A reell und symmetrisch ist, gilt

(i) alle Eigenwerte $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ von A sind reell,

(ii) es gibt eine ONB $v_1, \dots, v_n$ von $\mathbb{R}^n$, die aus Eigenvektoren zu diesen Eigenwerten besteht

(sog. "Spektralsatz für symmetrische Matrizen", Gegenstand der LA I, wird im Verlauf dieser Vorlesung noch mit analytischen Hilfsmitteln gezeigt.)

Ist nun $\xi = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i v_i$, so folgt

$$\langle \xi, A\xi \rangle = \sum_{i,j=1}^{n} \alpha_i \alpha_j \langle v_i, A v_j \rangle = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i^2 \lambda_i .$$

Hieraus sind die obigen Behauptungen jetzt ablesbar. $\square$

Bsp.: $n=2$. Ist $A \in M_2(\mathbb{R})$ symmetrisch, hat sie die Gestalt $A = \begin{pmatrix} a & b \\ b & c \end{pmatrix}$ mit $a,b,c \in \mathbb{R}$. Die Eigenwerte erhält man als Nullstellen des charakteristischen Polynoms, das ist

$$\det(A - \lambda I) = \det\begin{pmatrix} a-\lambda & b \\ b & c-\lambda \end{pmatrix} = (a-\lambda)(c-\lambda) - b^2$$

$$= \lambda^2 - (a+c)\lambda + ac - b^2$$

Sie sind gerade gegeben durch

$$\lambda_{1,2} = \frac{a+c}{2} \pm \sqrt{\frac{(a+c)^2}{4} + b^2 - ac} = \frac{a+c}{2} \pm \sqrt{\frac{(a-c)^2}{4} + b^2}.$$

Diese sind von unterschiedlichem Vorzeichen, genau dann, wenn

$$0 > \lambda_1 \lambda_2 = \frac{(a+c)^2}{4} - \frac{(a-c)^2}{4} - b^2 = ac - b^2 = \det(A).$$

Also: $A = \begin{pmatrix} a & b \\ b & c \end{pmatrix}$ ist indefinit genau dann, wenn $\det(A) = ac - b^2 < 0$ ist.

Die gleiche Rechnung zeigt: A ist (semi-)definit genau dann, wenn $\det A = ac - b^2 > 0$ (≥ 0) ist, und zwar positiv (semi-)definit, wenn zusätzlich $a > 0$ (≥ 0) oder $c > 0$ (≥ 0) gilt. (Beachte: Wenn A definit ist, haben a und c nicht verschiedene Vorzeichen!)

Dieses Bsp. hat eine Verallgemeinerung im folgenden Determinantenkriterium:

Lemma 2: Es sei $A = (a_{ij})_{1 \le i,j \le n}$ eine reelle symmetrische Matrix und, für $k \in \{1, \dots, n\}$,

$$A_k = (a_{ij})_{1 \le i,j \le k}.$$

Dann gilt: A ist positiv definit genau dann, wenn $\det A_k > 0$ für alle $k \in \{1, \dots, n\}$ ist.

(Ausnahmsweise ohne Bew., siehe z.B. Kaballo II, Satz 20.12)

Vorsicht: (1) In Lemma 2 kann man nicht "positiv definit, wenn $\det A_k > 0$" durch "positiv semidefinit, wenn $\det A_k \ge 0$" ersetzen. Bsp. $A = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ mit $\det A_1 = \det A_2 = 0$, wobei die Matrix A negativ semidefinit ist (die Eigenwerte sind $\lambda_1 = 0$ und $\lambda_2 = -1$).

(2) Will man mit diesem Krit. entscheiden, ob eine Matrix negativ definit ist, so ist Lemma 2 auf $-A$ anzuwenden. Bsp. $A = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ ist negativ definit, denn $-A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ ist positiv definit (z.B. $\det(-A)_1 = 1$ und $\det(-A)_2 = 1$). Man beachte dabei, dass auch $\det A = \det A_2 = 1 > 0$ ist!

(Ende des Exkurses zur Linearen Algebra)

<u>Satz 4</u>: Es sei $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ offen. $f \in C^2(\Omega)$ besitze in $x_0 \in \Omega$ ein lokales Maximum. Dann ist $\operatorname{Hess} f(x_0)$ negativ semidefinit.

<u>Bew.</u>: Es reicht, die Ungleichung

$$\langle h, \operatorname{Hess} f(x_0) h \rangle \leq 0$$

für alle $h \in \mathbb{R}^n$ mit $|h| = 1$ zu zeigen. Zu einem solchen h wählen wir $\varepsilon > 0$, so dass $[x_0, x_0 + \varepsilon h] \subset \Omega$. Da f in x_0 ein lokales Maximum besitzt, gilt (ggf. nach Verkleinerung von ε):

$$0 \geq f(x_0 + \varepsilon h) - f(x_0) = \nabla f(x_0) \cdot \varepsilon h + \frac{\varepsilon^2}{2} \langle h, \operatorname{Hess} f(\xi_\varepsilon) h \rangle$$

mit einem $\xi_\varepsilon \in [x_0, x_0 + \varepsilon h]$ aufgrund der Taylor'schen Formel. Da $\nabla f(x_0) = 0$ ist (Satz 3), haben wir also

$$\frac{1}{2} \langle h, \operatorname{Hess} f(\xi_\varepsilon) h \rangle \leq 0.$$

Da $f \in C^2(\Omega)$ vorausgesetzt ist, erhalten wir für $\varepsilon \to 0$ $\quad \langle h, \operatorname{Hess} f(x_0) h \rangle \leq 0$. $\square$

<u>Folgerung</u>: $f \in C^2(\Omega)$ besitze in $x_0 \in \Omega$ ein lokales Minimum. Dann ist $\operatorname{Hess} f(x_0)$ positiv semidefinit.

(Wende Satz 4 an auf $-f$!)

Satz 5: Es sei $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ offen, $f \in C^2(\Omega)$ und in $x_0 \in \Omega$ gelte: $\nabla f(x_0) = 0$ und $\operatorname{Hess} f(x_0)$ ist negativ definit. Dann besitzt f in x_0 ein isoliertes lokales Maximum.

Bew.: Da f zweimal stetig diff'bar ist, existiert $\varepsilon > 0$, so daß $\operatorname{Hess} f(\xi)$ negativ definit ist für alle $\xi \in B_\varepsilon(x_0)$. Für $h \in \mathbb{R}^n$ mit $|h| < \varepsilon$ ergibt die Taylor-Formel

$$f(x_0+h) - f(x_0) = \underbrace{\nabla f(x_0) \cdot h}_{=0} + \frac{1}{2} \langle h, \operatorname{Hess} f(\underset{B_\varepsilon(x_0)}{\underset{\cap}{\xi}}) h \rangle < 0$$

Also $f(x_0+h) < f(x_0)$. $\square$

Folgerung: Ist $\nabla f(x_0) = 0$ und $\operatorname{Hess} f(x_0)$ positiv definit (ansonsten: Voraussetzungen wie in Satz 5), so besitzt f in x_0 ein isoliertes lokales Minimum.

(Wieder: Wende Satz 5 an auf $-f$!)

Welche "neuen" Situationen entstehen im mehrdimensionalen? Dies soll an drei ganz einfachen Bspen. illustriert werden!

Bsp. 1 Quadratische Polynome in zwei Variablen ohne linearen und konstanten Term:

1.1 $P_1(x,y) = x^2+y^2$ ← Entspricht dem ebenen dem eindim. $P(x)=x^2$

Graph: Rotationsparaboloid (Skizze!)

Besitzt ein isoliertes globales Minimum in $(x_0,y_0)=(0,0)$

$\nabla P_1(x,y) = 2(x,y)$

$\nabla P_1(0,0) = (0,0)$

$\text{Hess}\, P_1(x,y) = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} = \text{Hess}\, P_1(0,0)$

Positiv definit. Also liefert Satz 5 zumindest für das lokale Verhalten die richtige Aussage.

(Aussagen über das globale Verhalten erlauben die Sätze 4/5 nicht. Monotonieargumente schwieriger wg. mehreren Variablen.)

1.2 $P_2(x,y) = x^2-y^2$

Graph: "Affen"sattel (Skizze!)

Hier liegt im Nullpunkt tatsächlich ein Sattelpunkt vor (echt mehrdim.!)

$\nabla P_2(x,y) = 2(x,-y)$

$\nabla P_2(0,0) = (0,0)$

(kritische Stelle)

$\text{Hess}\, P_2(x,y) = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & -2 \end{pmatrix} = \text{Hess}\, P_2(0,0)$

Negativ definit. Satz 4 ergibt also die korrekte Aussage, dass kein Extremum vorliegt.

1.3 $P_3(x,y) = x^2$

Graph entsteht durch Verschiebung der Normalparabel entlang der y-Achse

Jeder Punkt $(0,y)$, $y \in \mathbb{R}$ ist eine globale, <u>nicht isolierte</u> Minimalstelle (mehrdim.!)

$\nabla P_3(x,y) = 2(x,0)$

(alle Punkte der y-Achse kritisch!)

$\text{Hess}\, P_3(x,y) = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \text{Hess}\, P_3(0,y)$

Positiv <u>semi</u>definit, also erlauben unsere Kriterien keine Aussagen (gilt allgemein bei nicht isolierten Extrema!)

Bem.: Einzelfalluntersuchungen (über die Anwendung der Extremwertkriterien hinaus) sind also erforderlich, wenn

(a) nach globalen Extrema gefragt ist,

(b) nicht isolierte lokale Extrema vorliegen.

Das folgende Bsp. zeigt, was im Fall einer semidefiniten Hesse-Matrix auch passieren kann:

Bsp. 2 Polynom 4. Ordnung in zwei Variablen

2.1 $P_4(x,y) = x^2 + y^4$

$\nabla P_4(x,y) = (2x, 4y^3)$

2.2. $P_5(x,y) = x^2 - y^4$

$\nabla P_5(x,y) = (2x, -4y^3)$

einzige kritische Stelle: $(x_0, y_0) = (0,0)$

Hesse-Matrix im Nullpunkt in beiden Fällen

$$\text{Hess}\, P_i(0,0) = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \left(\begin{matrix}\text{positiv} \\ \text{semidefinit}\end{matrix}\right)$$

Im Nullpunkt liegt ein isoliertes Minimum vor. (In diesem Fall ein globales.)

Wie im Bsp. 1.2 handelt es sich um einen Sattelpunkt.

Bsp. 3: Gegeben seien feste Punkte $a_1, \dots, a_r \in \mathbb{R}^n$. Gesucht ist ein Punkt $x_0 \in \mathbb{R}^n$, so daß die Summe der Abstandsquadrate zu den a_i minimal wird. Wir suchen also nach dem (globalen) Minimum der Funktion

$$f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}, \quad x \mapsto f(x) = \sum_{k=1}^{r} |x - a_k|^2$$

1. Notwendige Bedingung: $\nabla f(x_0) = 0$!

$$\frac{\partial f}{\partial x_j}(x) = \frac{\partial}{\partial x_j} \sum_{k=1}^{r} |x - a_k|^2 = \sum_{k=1}^{r} \frac{\partial}{\partial x_j} \sum_{i=1}^{n} (x_i - a_{k,i})^2$$

$$= \sum_{k=1}^{r} 2(x_j - a_{kj})$$

$$\Rightarrow \quad \nabla f(x) = \sum_{k=1}^{r} 2x^T - 2a_k^T = 2r\,x^T - 2\sum_{k=1}^{r} a_k^T$$

Also $\nabla f(x_0) = 0 \Leftrightarrow x_0 = \frac{1}{r} \cdot \sum_{k=1}^{r} a_k$, was wir als den Schwerpunkt der Menge $\{a_1, \dots, a_r\}$ auffassen können.

2. Hinreichende Bedingung für ein isoliertes lokales Minimum. Für die zweiten partiellen Ableitungen erhalten wir

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(x) = \frac{\partial}{\partial x_i}\, 2 \sum_{k=1}^{r} x_j - a_{kj} = 2r \cdot \delta_{ij}$$

Also gilt für jedes $x \in \mathbb{R}^n$, insbes. auch für die krit. Stelle x_0 aus 1., dass

$$\text{Hess}\, f(x) = 2r \cdot I_n \quad (I_n \text{ die } n{\times}n \text{ Einheitsmatrix})$$

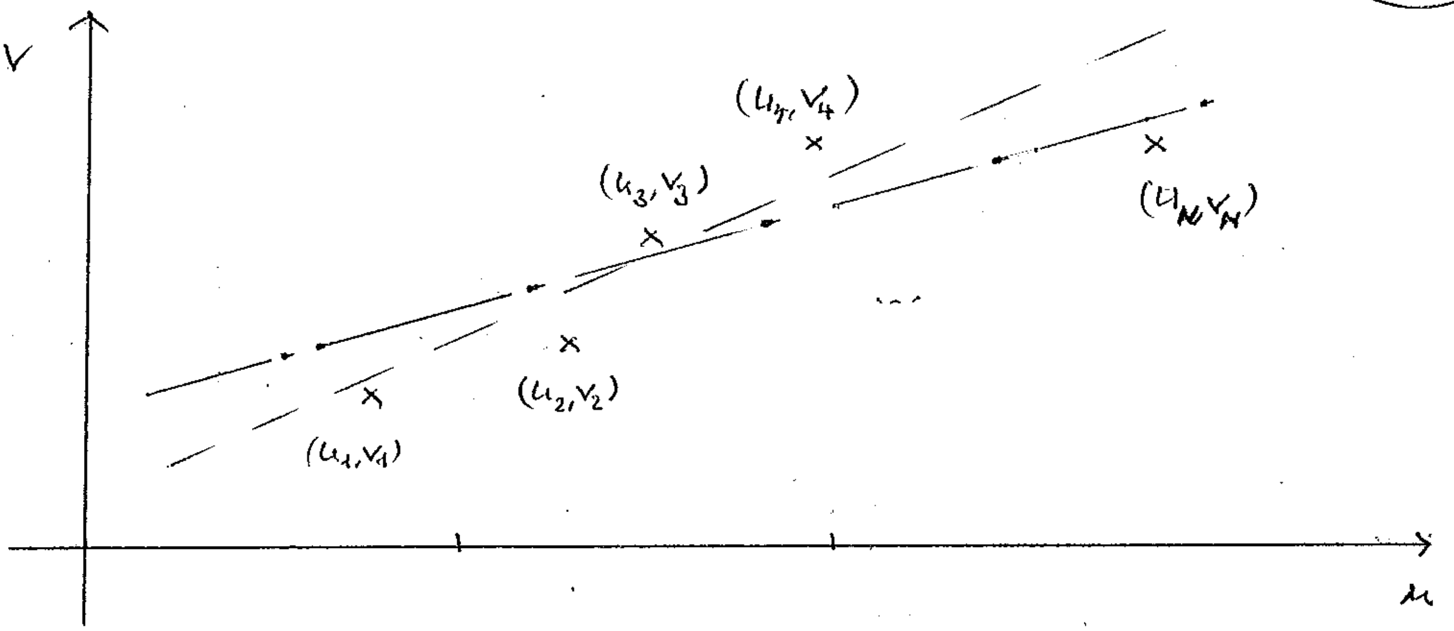
Hessf(x_0) ist also positiv definit (Definition oder Eigenwerte!),

in
$$x_0 = \frac{1}{r} \sum_{k=1}^{r} a_k$$
liegt also ein isoliertes lokales Minimum vor.

3. Zusatzüberlegung: Aus $\lim_{x\to\infty} f(x) = \infty$ folgt: Es gibt ein $R > 0$, so daß
$$f(x) > f(x_0) + 1 \quad \forall x \in B_R(0)^c$$
Die Funktion $f|_{\overline{B_R(0)}}$ ist stetig auf einem Kompaktum, nimmt also ihr Minimum an, und zwar in $B_R(0)$.
Da nur eine krit. Stelle existiert, folgt
$$f(x_0) < f(x) \quad \forall x \in B_R(0) \setminus \{x_0\},$$
insgesamt: $f(x_0) < f(x) \; \forall x \in \mathbb{R}^4 \setminus \{x_0\}$. In x_0 ist also eine globale Minimalstelle.

Bsp. 4 "Methode der kleinsten Quadrate"

Zwischen zwei meßbaren Größen u und v bestehe ein affin-linearer Zusammenhang der Form
$$v = v(u) = xu + y$$
mit unbekannten reellen Größen x und y, die experimentell bestimmt werden sollen. Eine Meßreihe ergebe die Wertepaare $(u_1, v_1), \dots, (u_N, v_N)$.



Welche Gerade approximiert die Meßwerte am besten?

<u>Gauss</u>: Wähle x und y so, dass die Summe der Abstandsquadrate zwischen Meßwerten und der sog. "Ausgleichsgeraden", das ist

$$\sum_{k=1}^{N} (v_k - x u_k - y)^2 =: f(x,y)$$

minimal wird. Notwendige Bedingung

$$0 = \frac{\partial f}{\partial x}(x,y) = -2 \sum_{k=1}^{N} (v_k - x u_k - y)\, u_k \qquad \text{und}$$

$$0 = \frac{\partial f}{\partial y}(x,y) = -2 \sum_{k=1}^{N} v_k - x u_k - y, \quad \text{also}$$

$$0 = \sum_{k=1}^{N} (v_k - x u_k - y)\, u_k = \sum_{k=1}^{N} v_k - x u_k - y$$

In den unbekannten Größen x und y ist dies ein lineares Gleichungssystem.

$$\left(\sum_{k=1}^{N} u_k^2\right) x + \left(\sum_{k=1}^{N} u_k\right) \cdot y = \sum_{k=1}^{N} u_k v_k$$

$$\left(\sum_{k=1}^{N} u_k\right) x + N y = \sum_{k=1}^{N} v_k$$

Führen wir die Mittelwerte $\bar{u} = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} u_k$ und $\bar{v} = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} v_k$ ein, ergibt sich nach Division durch N

$$\left(\frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} u_k^2\right) x + \bar{u} y = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} u_k v_k,$$

$$\bar{u} x + y = \bar{v}.$$

Multiplikation der zweiten Zeile mit $\bar{u}$ und Subtraktion von der ersten ergibt

$$\left(\frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} u_k^2 - \bar{u}^2\right) x = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} u_k v_k - \bar{u}\bar{v}.$$

Beachten wir noch

$$\frac{1}{N} \cdot \sum_{k=1}^{N} (u_k - \bar{u})(v_k - \bar{v}) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} (u_k v_k - u_k \bar{v} - \bar{u} v_k + \bar{u}\bar{v})$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} u_k v_k - \bar{u}\bar{v},$$

erhalten wir schließlich

$$x = \frac{\sum_{k=1}^{N} (u_k - \bar{u})(v_k - \bar{v})}{\sum_{k=1}^{N} (u_k - \bar{u})^2}, \quad y = \bar{v} - \bar{u} \cdot x.$$

Diese Formeln werden in den experimentellen Wissenschaften tatsächlich benutzt, um die optimale Ausgleichsgerade zu bestimmen.

Als eine weitere Anwendung der Extremwertkriterien soll noch das (schwache) Maximumprinzip für harmonische Funktionen bewiesen werden.

Def. : Es sei $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ offen. Eine Funktion $f \in C^2(\Omega)$ heißt harmonisch in Ω, falls $\Delta f(x) = 0 \ \forall x \in \Omega$.
Hierbei ist $\Delta = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2}$ der Laplace-Operator.

Bem. $\Delta f(x) = \text{Spur Hess} f(x)$.

Satz 6: Es sei $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ offen und beschränkt, $f \in C^2(\Omega) \cap C(\overline{\Omega})$ harmonisch. Dann nimmt f ihr Maximum auf $\partial\Omega$ an, d.h.

$$m := \max\{f(x) : x \in \partial\Omega\} = \max\{f(x) : x \in \overline{\Omega}\} =: M.$$

Bew.: Wir führen die Annahme $m < M$ zum Widerspruch. Dazu setzen wir für $\varepsilon > 0$

$$f_\varepsilon(x) = f(x) + \varepsilon |x|^2$$

und wählen ε so klein, dass

$$\max\{f_\varepsilon(x) : x \in \partial\Omega\} \underset{\text{Wahl}}{<} M \underset{\text{gilt stets}}{\leq} \max\{f_\varepsilon(x) : x \in \overline{\Omega}\}.$$

Dann nimmt f_ε ihr Maximum also in einem Punkt $x_0 \in \Omega$ an. Nach Satz 4 gilt dann:

Hess $f_\varepsilon(x_0)$ ist negativ semidefinit und daher $\Delta f_\varepsilon(x_0) = \text{Spur Hess} f_\varepsilon(x_0) \leq 0$.

Andererseits: $\Delta f_\varepsilon(x) = \underbrace{\Delta f(x)}_{=0 \text{ n.V.}} + \varepsilon \Delta |x|^2 = \varepsilon \cdot n \cdot 2 > 0$. □

Folgerung: Ist $f \in C^2(\Omega) \cap C(\overline{\Omega})$ harmonisch, so nimmt f ihr Minimum auf $\partial\Omega$ an. ($\Omega \subset \mathbb{R}^n$ offen und beschränkt!)

Anwendung: Es seien $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ offen und beschränkt, $f \in C(\Omega)$ und $g \in C(\partial\Omega)$. Dann existiert höchstens eine Lösung $u \in C^2(\Omega) \cap C(\overline{\Omega})$ der Poisson-Gleichung

$$\Delta u = f \quad \text{in } \Omega,$$

die der Dirichlet-Randbedingung

$$u = g \quad \text{auf } \partial\Omega$$

genügt ("Das Dirichlet-Problem für die Poisson-Gleichung ist – wenn überhaupt – eindeutig lösbar.")

Bew.: Seien u und $v \in C^2(\Omega) \cap C(\overline{\Omega})$ Lösungen und $w = u - v$. Dann ist $\Delta w = 0$ und $w(x) = 0$ für $x \in \partial\Omega$. Für $x \in \Omega$ ist dann nach dem Max.-Prinzip $w(x) \leq 0$, nach der Folgerung daraus $w(x) \geq 0$, insgesamt also $w(x) = 0$ und damit $u(x) = v(x)$ für alle $x \in \overline{\Omega}$. □