多元函数极值判定方法笔记

1 拉格朗日乘数法

在求解多元函数在约束条件下的极值问题时，拉格朗日乘数法无疑是最重要、最直观的工具之一。作为一名高中生，我在学习这一方法时既感到惊喜又有些迷惑：惊喜的是它将约束问题转化为无约束问题的思想实在巧妙；迷惑的是在实际推导过程中总有种“哎呀，这步怎么走过来的?”的感觉。下面我将详细讲述这一方法的原理、推导过程以及我在学习过程中产生的一些疑问和联想。

设有目标函数

$$f(x_1, x_2, \ldots, x_n),$$

以及约束条件

$$g(x_1, x_2, \ldots, x_n) = 0.$$

为了寻找在约束条件下的局部极值，我们构造拉格朗日函数

$$\mathcal{L}(x_1, x_2, \ldots, x_n, \lambda) = f(x_1, x_2, \ldots, x_n) - \lambda\big(g(x_1, x_2, \ldots, x_n) - 0\big).$$

从直观上讲，我们可以把 λ 看作“惩罚因子”，它的作用就是把违背约束条件的解“拉”回约束面上。现在，我们令所有变量的偏导数为零，即

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x_i} = 0, \quad i = 1, 2, \ldots, n, \quad \text{以及} \quad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \lambda} = 0.$$

于是，我们就得到了一个由 $n+1$ 个方程组成的方程组。求解这个方程组，便可以得到候选的极值点。

这里有一个细节值得注意：在构造 $\mathcal{L}$ 的时候，我发现很多教科书和论文（例如 CMU 上的 *Notes on Hessians* 中也有提及）都将约束条件写成 $g(x) = c$ 的形式，为了简单起见，我们这里固定 $c = 0$。当然，如果约束条件不为零，我们完全可以进行变量平移，将其转化为零约束。

—

例 1. 考虑函数

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

在约束条件 $x+y=1$ 下的极值问题。构造拉格朗日函数

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

对 x,y,λ 分别求偏导并令其为零，有：

$$\begin{cases} \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial x}=2x-\lambda=0, \\ \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial y}=2y-\lambda=0, \\ \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\lambda}=-(x+y-1)=0. \end{cases}$$

从前两个方程可以看出 $2x=2y$，即 $x=y$；再由第三个方程得 $2x=1$，于是 $x=y=\frac{1}{2}$。这就是该约束条件下的唯一候选极值点，也是全局最小值点。

在这里，我突然发现虽然这个例子简单明了，但在处理更复杂的非线性约束时，求解方程组就会变得十分繁琐。我猜测对于复杂系统，可能需要借助数值方法，例如牛顿法等迭代算法来求解这些非线性方程组。

补充说明： 关于拉格朗日乘数法的严格证明，很多文献都采用了隐函数定理或者 Kuhn-Tucker 条件（当约束条件不再仅是等式时）。虽然这些方法超出了高中数学的范畴，但我在查阅维基百科英文版时了解到，其本质思想与单变量极值问题的推广是一致的，都是利用导数为零的必要条件来寻找极值。由于时间原因，我们先打住关于更广义最优化理论的讨论，暂时回到当前的主题。

2 黑塞矩阵与二阶充分条件

在求得候选极值点之后，如何判断其是否为极值点呢？这就需要用到二阶导数信息，也就是黑塞矩阵（Hessian Matrix）的概念。黑塞矩阵是一个以函数的所有二阶偏导数组成的矩阵，它为我们提供了关于函数在某点处曲率的信息。设

$f(x_1, x_2, \ldots, x_n)$ 在某点 $\mathbf{x}_0$ 处二阶可微，则其黑塞矩阵定义为

$$H_f(\mathbf{x}_0) = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2}(\mathbf{x}_0) & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2}(\mathbf{x}_0) & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n}(\mathbf{x}_0) \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_1}(\mathbf{x}_0) & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2}(\mathbf{x}_0) & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_n}(\mathbf{x}_0) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1}(\mathbf{x}_0) & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_2}(\mathbf{x}_0) & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n^2}(\mathbf{x}_0) \end{pmatrix}.$$

由对称性条件（当混合偏导连续时，$\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} = \frac{\partial^2 f}{\partial x_j \partial x_i}$），黑塞矩阵是对称矩阵，这为我们应用线性代数中的正定性理论提供了便利。

正定性与极值判定：若黑塞矩阵在候选点处正定，则该点为局部极小点；若负定，则为局部极大点；若既不正定也不负定，则可能是鞍点。常用的判定方法是利用 **Sylvester 判别法则**：即考察黑塞矩阵的所有主子式（leading principal minors）的符号。

例如，考虑二元函数 $f(x, y)$ 的黑塞矩阵

$$H_f(x, y) = \begin{pmatrix} f_{xx}(x, y) & f_{xy}(x, y) \\ f_{yx}(x, y) & f_{yy}(x, y) \end{pmatrix}.$$

若 $f_{xx}(x_0, y_0) > 0$ 且行列式 $\det H_f(x_0, y_0) = f_{xx}(x_0, y_0) f_{yy}(x_0, y_0) - \big(f_{xy}(x_0, y_0)\big)^2 > 0$，则 (x_0, y_0) 为局部极小点。

疑问与联想：在计算高维函数的黑塞矩阵时，我发现直接计算主子式可能非常复杂，尤其是当 n 较大时。于是我突发奇想，也许可以利用矩阵分解的方法（例如 Cholesky 分解）来判断正定性；不过我猜测这种方法在理论证明上需要更高阶的线性代数知识。使用数值方法估计特征值可能也是一种有效的方法。遗憾的是，这部分内容我暂时还未掌握，所以只能停留在对 Sylvester 判别法的理解上。

例 2. 考虑函数

$$f(x, y) = x^3 + 3xy + y^3,$$

求其在临界点处的极值。先求一阶导数并解出候选点，然后计算黑塞矩阵。由于此例中计算量较大，我在推导过程中多次遇到混合偏导数计算不准确的问题。经过反复检查，我发现必须严格按照偏导数的定义逐项计算，否则极易出错。正如我在复习高等数学时所体会到的："细节决定成败"，这句话在这里同样适用。

此外，我在思考时还注意到，黑塞矩阵的正定性不仅仅是一个数值判断问题，而是与函数在该点附近的局部几何形状密切相关。正定性保证了函数图像在该点

附近“凸起”，而负定性则意味着“凹陷”。当黑塞矩阵既不正定也不负定时，我们常说该点是鞍点。

3 带边界的黑塞矩阵（Bordered Hessian Matrix）

当我们处理有约束的极值问题时，单纯的黑塞矩阵已经无法完全描述候选点的局部性质，此时需要引入带边界的黑塞矩阵。带边界黑塞矩阵主要用于检验含约束条件下的极值问题的充分条件，其构造方法可视为在原来的黑塞矩阵外加上关于约束条件的一组“边界”信息。

设目标函数为 $f(x_1, x_2, \ldots, x_n)$，约束条件为

$$g_i(x_1, x_2, \ldots, x_n) = 0, \quad i = 1, 2, \ldots, m.$$

在应用拉格朗日乘数法构造拉格朗日函数后，我们得到候选点。为了判断候选点是否为极值点，我们构造带边界的黑塞矩阵，其形式通常写作:

$$B = \begin{pmatrix} 0_{m\times m} & \nabla g(x)^\top \\ \nabla g(x) & H_f(x) - \sum_{i=1}^m \lambda_i H_{g_i}(x) \end{pmatrix},$$

其中 $\nabla g(x)$ 为约束条件的梯度矩阵，$H_f(x)$ 为目标函数的黑塞矩阵，而 $H_{g_i}(x)$ 是各约束函数的黑塞矩阵，λ_i 为相应的拉格朗日乘数。

直观理解: 我们可以把带边界的黑塞矩阵看作是在原黑塞矩阵的基础上，加入了约束条件对函数曲率的修正。这就好比是当我们骑自行车上坡时，除了考虑路面的起伏外，还要考虑风的影响；风力就相当于这里加入的额外项。这样一来，判断候选点的极值性质就不仅仅依赖于目标函数本身，还要综合考虑约束对其局部“曲率”的调控作用。

疑问: “如果候选点满足拉格朗日条件，但带边界的黑塞矩阵不能判定其正定性或负定性，我们该如何处理呢?” 据我初步了解，这种情况可能意味着该点处存在退化情形，此时常需要借助更高阶的导数信息或者其他局部分析工具来进一步判断。我猜测在这种情况下，问题会变得更加复杂，可能还会涉及到奇异点理论，这部分内容我目前还未深入研究，只简单记录，留待以后探索。

例 3. 考虑函数

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

在约束条件 $x+y=1$ 下的极值问题。首先利用拉格朗日乘数法求出候选点，再构造带边界的黑塞矩阵检验其极值性质。对于该例，我先计算约束梯度 $\nabla g=(1,1)$，然后计算目标函数的黑塞矩阵

$$H_f=\begin{pmatrix}2 & 1\\ 1 & 2\end{pmatrix}.$$

构造带边界黑塞矩阵后，可以验证在候选点处，其行列式符号满足极小值的判定条件。这个过程虽然计算较繁琐，但细致的推导使我对边界条件在极值问题中所起的作用有了更深刻的体会。

有不少讨论专门针对带边界黑塞矩阵的奇异情形展开。比如，有学者提出，当约束的梯度向量线性相关时，传统的带边界方法可能会失效，这时需要引入更精细的分析工具。

4　多元函数极值判定的其他方法和拓展

在上述讨论中，我们主要介绍了利用二阶导数（黑塞矩阵及其带边界形式）来判断多元函数极值的传统方法。然而，实际问题中常常会遇到一些特殊情形，使得传统二阶充分条件不足以判定极值性质。接下来，我将结合部分教科书和网络资料，介绍一些其他的判定方法和拓展思路。

4.1　利用高阶导数的判定方法

当二阶导数测试不能确定极值（即黑塞矩阵既非正定也非负定时），我们有时需要借助高阶泰勒展开来判断极值性质。设 f 在 $\mathbf{x}_0$ 附近有泰勒展开式：

$$f(\mathbf{x}_0+\mathbf{h})=f(\mathbf{x}_0)+\frac{1}{2}\mathbf{h}^\top H_f(\mathbf{x}_0)\mathbf{h}+\frac{1}{3!}D^3f(\mathbf{x}_0)[\mathbf{h},\mathbf{h},\mathbf{h}]+\cdots.$$

如果黑塞矩阵判定不定，我们可以考察三阶或更高阶项的符号来进一步分析。对于高阶项，我猜测其分析方法可能要用到对称张量的正定性判定，这无疑会引入更深层次的数学工具。虽然这些知识超出了高中数学范畴，但在我自问自答的过程中，我发现这种方法为处理退化极值问题提供了一条思路。由于涉及到复杂的多线性代数，我在这里仅作初步介绍，详细证明和应用我暂且留待以后深入学习。

4.2 鞍点和极值的判别

在多元函数中，鞍点是一种既不是局部极大也不是局部极小的临界点。通常，通过黑塞矩阵的特征值符号可以判断候选点是否为鞍点。例如，当黑塞矩阵既有正特征值又有负特征值时，我们可以判定该点为鞍点。然而，在一些边界或约束条件下，鞍点的判断会变得复杂。这时，我们往往需要结合拉格朗日乘数法与带边界黑塞矩阵来综合分析。

一些思考：如果仅凭黑塞矩阵的符号不能完全判断极值性质，那么是否可以利用函数的几何图形直观地辅助判断？直觉告诉我，这是一种非常有效的辅助手段。例如，通过绘制函数的等高线图，可以直观地看到某些点周围是否存在"马鞍"形状。

4.3 约束优化的其他方法

除了拉格朗日乘数法，目前在最优化理论中还有许多其他方法，例如 Kuhn-Tucker 条件、罚函数法以及内点法等。对于这些方法，我猜测其思想与拉格朗日乘数法有某种内在联系——都是为了将原本受限的问题转化为更易处理的无约束问题。特别是当约束条件为不等式时，Kuhn-Tucker 条件为我们提供了必要且充分的判别标准。虽然我目前对这些方法仅知道名字，但在翻阅相关资料时，我发现这些内容在经济学和运筹学中有着广泛应用，这也激发了我对跨学科研究的兴趣。

4.4 数值方法与计算机辅助证明

在实际应用中，尤其是当函数和约束条件十分复杂时，解析解往往难以求得。这时，数值方法便显得尤为重要。例如，利用 MATLAB 等工具，可以通过数值求导和矩阵分解方法来近似判断黑塞矩阵的正定性。正如我在实验室中反复调试代码时体会到的那样，数值计算虽然不能给出严格证明，但却在实际问题求解中具有很高的实用价值。

我曾经在 MathStackExchange 上看到过一个问题，讨论如何利用数值方法判断一个高维函数在某点处是否为极值。回答者建议使用特征值分解，并指出在实际操作时应注意舍入误差和数值稳定性问题。对此，我突发奇想，也许可以设计一种混合方法：先利用数值方法定位候选点，再结合局部解析方法进行验证。
不过这种方法目前还只是我的猜测。

LEFT FOR NOTES

5 高级知识讨论

经过前面几节对拉格朗日乘数法、黑塞矩阵及其带边界形式的详细讨论，我们逐渐接近了多元函数极值判定问题的核心。然而，我猜测这仅仅是冰山一角，背后还隐藏着更加深邃的数学结构。以下是一些胡思乱想：

5.1 从局部几何到全局拓扑

在传统的极值判定中，我们主要关注函数在某一点附近的二阶导数信息。但我突发奇想，也许可以从全局角度考虑问题。比如，当一个函数在某个紧致区域内取得极值时，其极值点不仅受到局部导数信息的制约，还与该区域的全局拓扑性质有关。类似于点集拓扑中的"紧致性"概念，在某些情况下，我们可以利用全局不变量（如 Euler 示性数）对极值问题做出预测。虽然这些想法在严格证明上可能尚不完备，但它们为我打开了一扇认识数学整体结构的大门。

5.2 奇异性与退化情形

在实际应用中，我们经常会遇到候选点处黑塞矩阵奇异（行列式为零）的情况。对此，我猜测传统的二阶判别法便失去了效力，这时需要引入"退化极值"的

概念。根据我在 MathOverflow 上浏览到的讨论，当黑塞矩阵奇异时，我们可能需要考察高阶导数或利用其他方法（例如 Lyapunov 函数方法）来判断该点的稳定性。

5.3 联系数学分析与代数结构

在拉格朗日乘数法的推导中,我们不难发现,其实质是将一个约束条件嵌入到了目标函数中,从而使得问题的求解转化为求多元函数的驻点。这种方法与数学分析中的无穷小思想密切相关,同时又暗含了代数中"消元法"的思想。正因如此,我在整理笔记时常常联想到线性代数中的矩阵理论和特征值分解方法。事实上,黑塞矩阵的正定性判断正是一个典型的矩阵分析问题。当我们面对一个对称矩阵时，检查它的特征值往往比计算所有主子式更为直观。

5.4 计算机辅助与 MATLAB 实践

在现代数学研究中，计算机辅助证明和数值计算已经成为不可或缺的工具。作为一名热爱 MATLAB 的学生，我深知编程在解决实际问题中的重要性。例如，在处理高维函数的极值问题时，我们可以利用 MATLAB 编写程序，自动计算梯度和黑塞矩阵，并通过特征值分解判断矩阵的正定性。在这里，我就简单写出一个 Matlab 代码示例:

```
% Matlab示例：计算给定点处的黑塞矩阵特征值
syms x y z
f = x^2 + y^2 + z^2 + x*y + y*z + z*x;
H = hessian(f, [x, y, z]);
point = [1/3, 1/3, 1/3];
H_numeric = double(subs(H, [x, y, z], point));
eig_values = eig(H_numeric);
disp('黑塞矩阵特征值：');
disp(eig_values);
```

这段代码姑且展示了如何利用符号计算和数值代入的方法来判断某个驻点处的黑塞矩阵是否正定。当然，在处理更复杂的带约束问题时，还需要对边界黑塞矩阵进行类似的数值测试。