周期的極小曲面に拘束された電子の量子力学

東北大多元研　藤田伸尚

周期的極小曲面に拘束された電子の量子力学

微分積分 II

Počátky kvantové mechaniky

Essentials of Metaheuristics

A Set of Undergraduate Lecture Notes by

Sean Luke
Department of Computer Science
George Mason University

Second Edition
Online Version 2.3
February, 2016

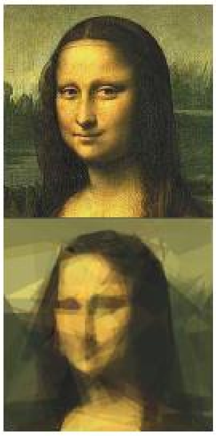


Figure 0 The Mona Lisa, estimated with the $(5+1)$ Evolution Strategy. The objective is to find a set of fifty polygons which most closely approximates the original image. After Roger Alsing.

Essentials of Metaheuristics

Optimisation et contrôle

Grégoire ALLAIRE, Alexandre ERN
Ecole Polytechnique

5 février 2024

OPTIMISATION ET CONTRÔLE

Molecular Modelling for Beginners

Alan Hinchliffe
UMIST, Manchester, UK

WILEY

Molecular Modelling for Beginners

>

听讲解

鞍点（Saddle Point）是一个在数学、物理、优化理论和计算机科学等多个领域中出现的重要概念。它通常指一个函数在某一点的梯度为零，但该点既不是局部极小值也不是局部极小值的驻点。鞍点的名称来源于其形状类似于马鞍的二维曲面，即在某些方向上函数值增加，而在另一些方向上函数值减少。

鞍点的数学定义

在数学中，鞍点通常出现在多变量函数的图像上。对于一个二元实值函数 F(x,y)F(x, y)F(x, y)，如果该函数在某一点 (x0,y0)(x_0, y_0)(x0, y0) 处的梯度为零，且该点的海

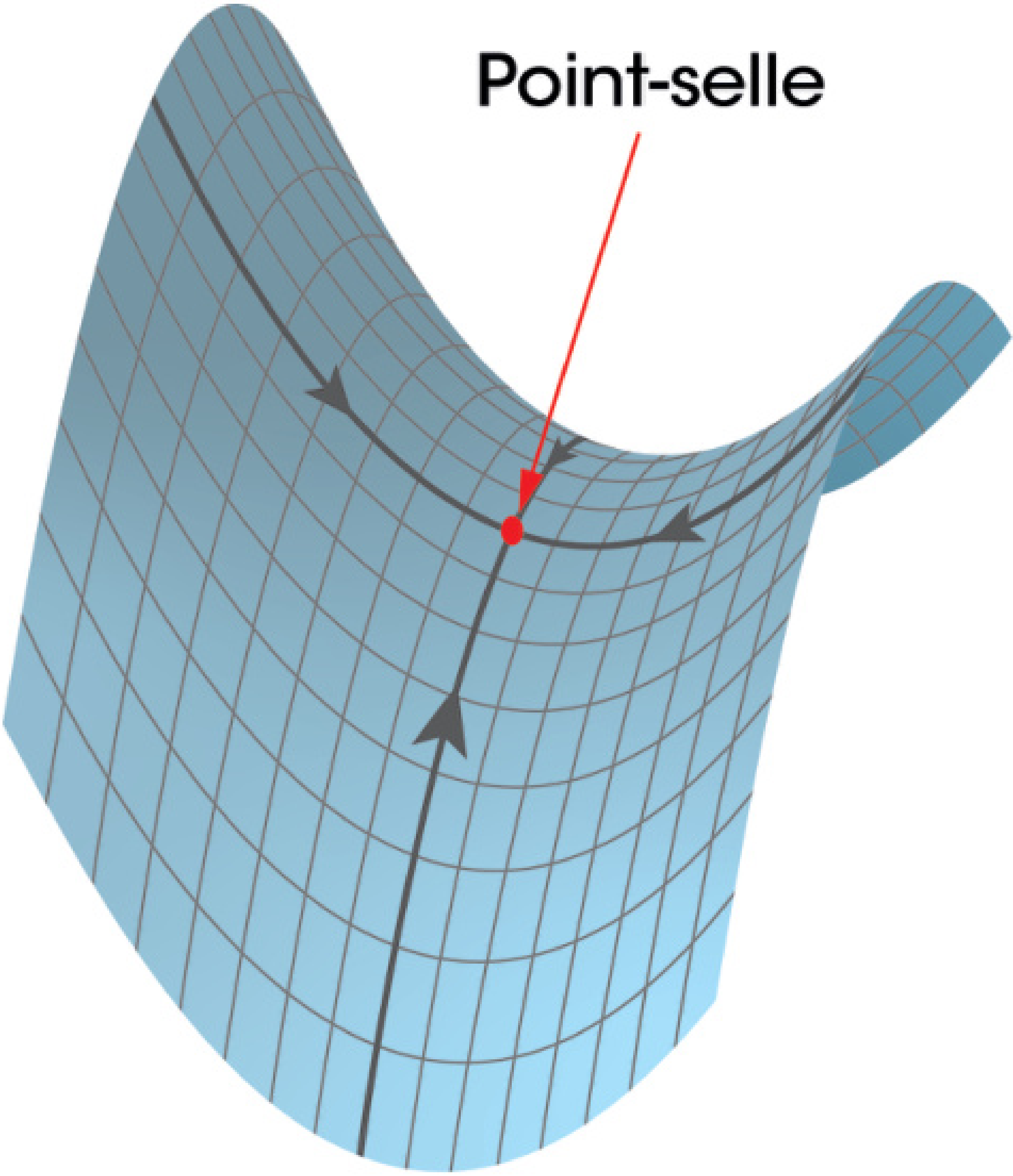
森矩阵（Hessian matrix）是不定的（即存在正特征值和负特征值），那么该点就是鞍点。例如，函数 f(x,y)=x2-y2f(x, y) = x^2 - y^2f(x, y) = x2 - y2 在原点 (0,0)(0, 0)(0, 0) 处就是一个鞍点，因为其海森矩阵为：

[200−2]\begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & -2 \\ \end{bmatrix} [200−2]

该矩阵的行列式为负，说明它是一个不定矩阵，因此该点是鞍点。

鞍点的物理意义

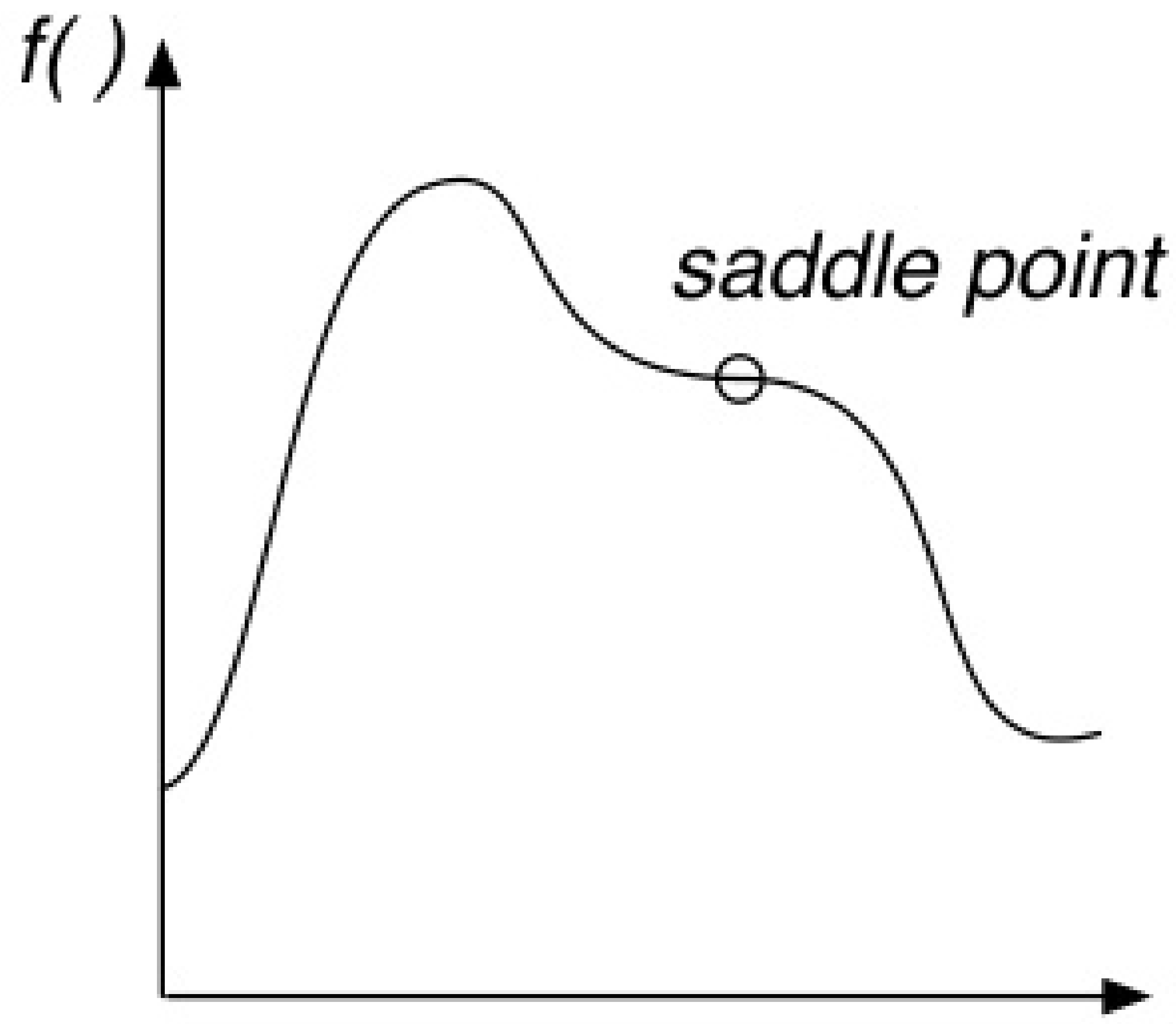
在物理学中，鞍点可以描述为一个系统在某个方向上是稳定状态，在另一个方向上是不稳定状态的点。例如，在动力系统中，鞍点是一个奇点，沿着某一方向稳定，另一方向不稳定。在控制理论中，鞍点也被称为“点 selle”或“鞍点”，用于描述拉格朗日函数的极值点。



查看

鞍点在优化中的应用

在优化理论中，鞍点是一个重要的概念，特别是在深度学习和机器学习中。鞍点通常出现在高维非凸函数中，它们是许多优化算法（如梯度下降）难以逃离的点。虽然鞍点不是局部最优解，但它们在高维空间中非常常见。研究表明，鞍点附近的某些点比鞍点的函数值更大，而另一些点的函数值更小。因此，鞍点在优化过程中可能成为训练过程中的局部最优解，但并不是全局最优解。



查看

鞍点在矩阵中的定义

在矩阵理论中，鞍点是指一个元素在所在行中是最大值，在所在列中是最小值的元素。例如，对于一个 n×nn \times nn×n 的矩阵，如果某个元素 aija_{ij}aij 是第 iii 行的最大值，并且是第 jjj 列的最小值，则 aija_{ij}aij 就是一个鞍点。这种定义在计算机科学中常用于图像处理和数据挖掘等领域。

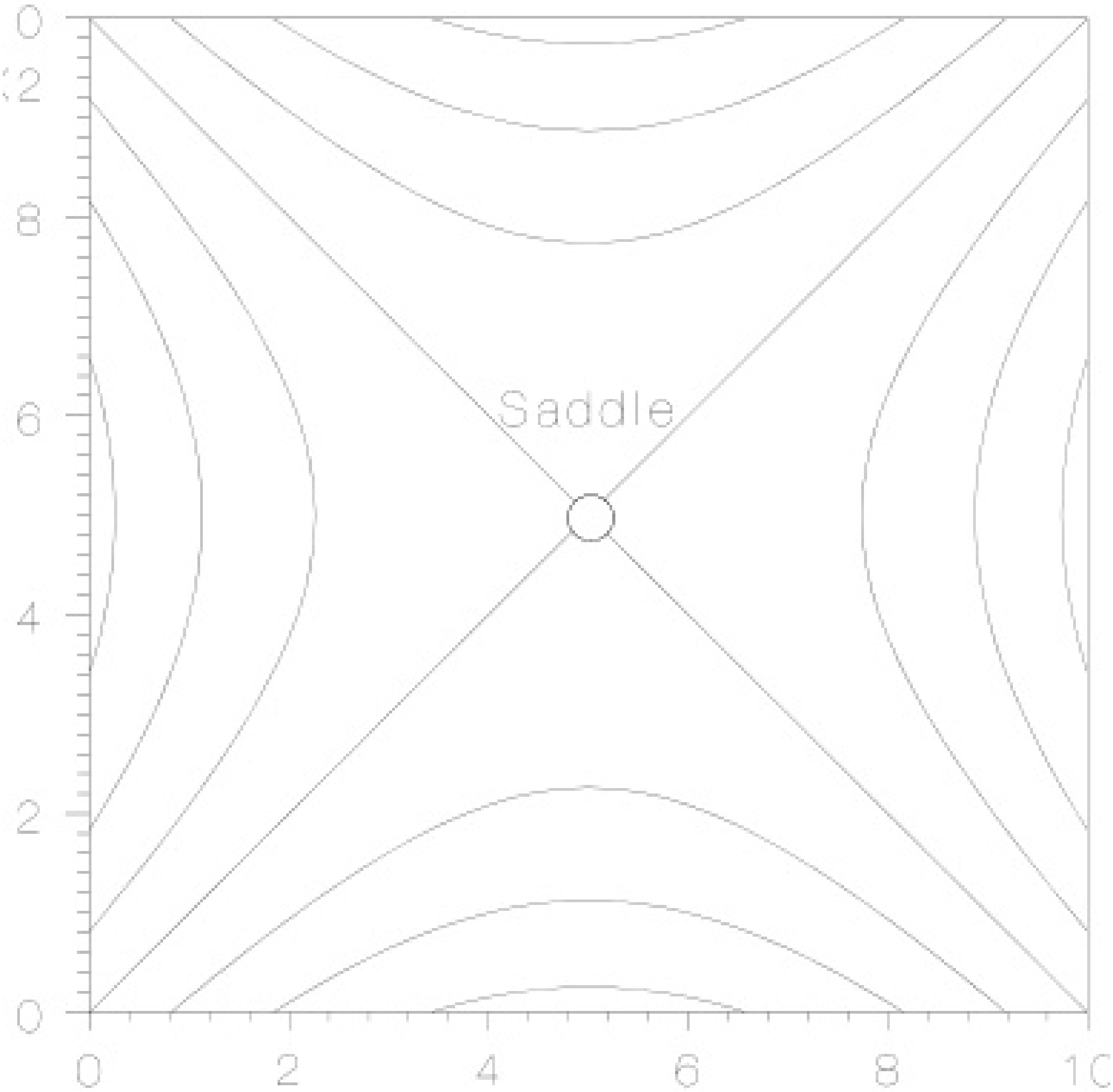
鞍点的判别方法

判断一个点是否为鞍点的方法包括：

- 一维函数：如果函数在鞍点的一阶导数为零，且二阶导数在该点换正负符号，则该点为鞍点。
- 二元函数：通过计算该点的海森矩阵，如果该矩阵的行列式小于零，则该点为鞍点。

鞍点的图像表示

鞍点的图像通常表现为一个马鞍形的曲面，即在某些方向上曲面向上弯曲，在另一些方向上曲面向下弯曲。例如，函数 z=x2-y2z = x^2 - y^2z = x2 - y2 的图像在原点处形成一个典型的鞍形。在等高线图中，鞍点通常表现为两个等高线圈相交的点。



鞍点的其他应用

鞍点在多个领域都有应用，包括：

- 微分几何：鞍点是光滑曲面上的一个特殊点，其高斯曲率为负。
- 动力系统：鞍点是稳定和不稳定流形维度不为零的超线性周期点。
- 控制理论：鞍点是拉格朗日函数的极值点，用于描述系统的最优控制问题。

总结

鞍点是一个在多个领域中出现的重要概念，它既不是局部极值点，也不是全局极值点。在数学中，鞍点可以通过海森矩阵来判断；在物理中，鞍点可以描述系统的稳定性和非稳定性；在优化中，鞍点是许多算法难以逃离的点；在矩阵中，鞍点是指行最大值和列最小值的元素。鞍点的研究对于理解函数的极值点、优化算法的设计以及系统的稳定性分析具有重要意义。

数学定义与性质

- 非局部极值点的驻点
- 二元实函数的 Hessian 矩阵为不定矩阵
- 在正交方向上的导数均为零
- 曲面在某些方向往上曲，在其他方向往下曲

物理与工程学应用

- 动态系统中的稳定与不稳定状态
- 势能表面中的局部最大值与最小值
- 控制理论中的鞍点

矩阵理论

- 矩阵中元素在所在行最大、所在列最小

最优化理论

- 拉格朗日函数的第一阶条件描述

- 局部最优解但非全局最优解

几何图形

- 马鞍形的二维图形

- 马鞍形的三维图形

编程实现

- 寻找二维数组中的鞍点