Εφαρμοσμένη Βελτιστοποίηση

Ενότητα 2: Μαθηματικά χαρακτηριστικά συναρτήσεων και χώρων

Δημήτρης Παπαδασκαλόπουλος (Επικ. Καθηγητής)
Πολυτεχνική Σχολή
Τμήμα Ηλεκτρολόγων Μηχανικών και Τεχνολογίας Υπολογιστών

Περίληψη προηγούμενης διάλεξης

- Σημασία εφαρμοσμένης βελτιστοποίησης και παραδείγματα

- “Δομικά στοιχεία” προβλημάτων βελτιστοποίησης
  - Μεταβλητές απόφασης
  - Αντικειμενική συνάρτηση
  - Περιορισμοί
  - Παράμετροι

- Προκλήσεις (διατύπωση, επίλυση) > εστιάζουμε στη 2^{η}

- Λύσεις και πολυπλοκότητα προβλημάτων

- Παραδοχή μαθήματος και κατηγορίες μεθόδων που θα εξετάσουμε (αναλυτικές, αριθμητικές)

Σύνδεση προηγούμενης με τη σημερινή διάλεξη

- “Οι μεταβλητές απόφασης, οι αντικειμενικές συναρτήσεις και οι περιορισμοί ταξινομούνται σε διαφορετικές κατηγορίες **ανάλογα με τα μαθηματικά τους χαρακτηριστικά**…”

- “Η επιλογή της πιο κατάλληλης αναλυτικής ή αριθμητικής μεθόδου για την επίλυση ενός προβλήματος βελτιστοποίησης **εξαρτάται από τα μαθηματικά του χαρακτηριστικά**…”

- “Σε αυτό το μάθημα θα εξετάσουμε προβλήματα βελτιστοποίησης **με συγκεκριμένα μαθηματικά χαρακτηριστικά**…”

Δομή σημερινής διάλεξης

- Μαθηματικά χαρακτηριστικά συναρτήσεων
  - Συνέχεια
  - Μονοτονία
  - Ακρότατα και μονοτροπικότητα
  - Κυρτότητα
  - Γραμμικότητα

- Διευθύνσεις στο χώρο πολλαπλών διαστάσεων

- Ανάπτυγμα Taylor συναρτήσεων

- Διαφορικό συναρτήσεων

Παράσταση συνάρτησης

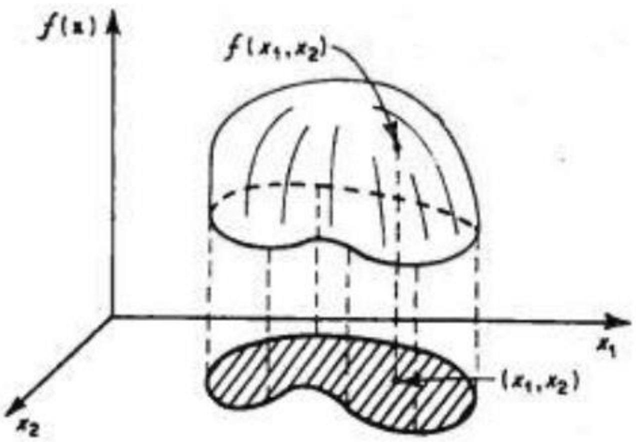
- Μία συνάρτηση **παριστάνεται μαθηματικά** ως $y = f(x)$, όπου y είναι η τιμή της συνάρτησης και x είναι η/οι ανεξάρτητη/ες μεταβλητή/ές:
  - Για συναρτήσεις μίας μεταβλητής: x είναι ένα βαθμωτό μέγεθος (η f ορίζεται σε χώρο μίας διάστασης)
  - Για συναρτήσεις πολλών μεταβλητών: $\boldsymbol{x}$ είναι ένα διάνυσμα $\boldsymbol{x} = [x_1, x_2, .., x_n]$ (η f ορίζεται σε χώρο n-διαστάσεων)

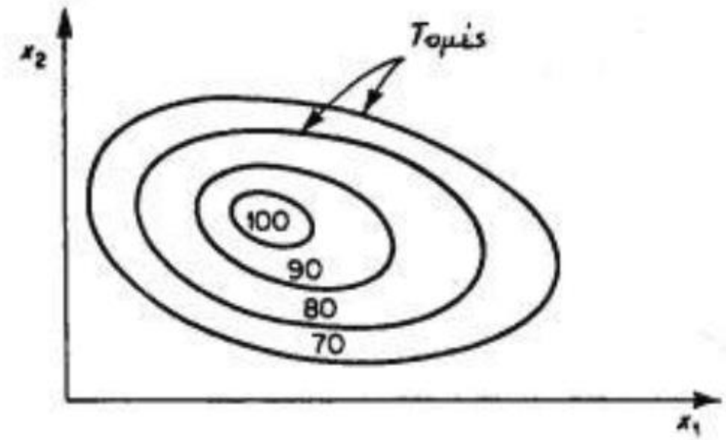
- Η **γεωμετρική ή γραφική παράσταση** μίας συνάρτησης αποτελεί μια εναλλακτική παράσταση η οποία επιτρέπει μια εποπτική εικόνα που δίνει σαφέστερη αντίληψη για τη φύση της συνάρτησης (αλλά είναι δυνατή για συναρτήσεις μίας ή δύο το πολύ μεταβλητών)

Γραφική παράσταση συνάρτησης δύο μεταβλητών

• Ενώ μια συνάρτηση μιας μεταβλητής μπορεί να παρασταθεί μέσω μιας απλής καμπύλης σε ένα δισδιάστατο γράφημα, μια συνάρτηση 2 μεταβλητών μπορεί να παρασταθεί μέσω:

- Μίας επιφάνειας σε ένα τρισδιάστατο γράφημα
- Των τομών της από επίπεδα παράλληλα στους άξονες x_1 και x_2 (καμπύλες $f(x_1, x_2) = k$ για διάφορες τιμές του k)





Συνέχεια συναρτήσεων (1)

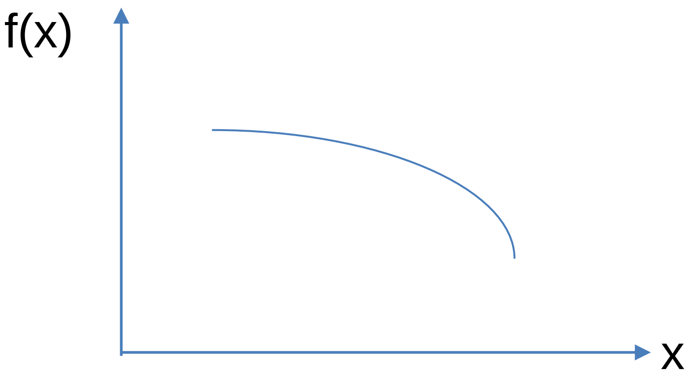
• Με βάση το μαθηματικό χαρακτηριστικό της συνέχειας, οι συναρτήσεις ταξινομούνται σε:

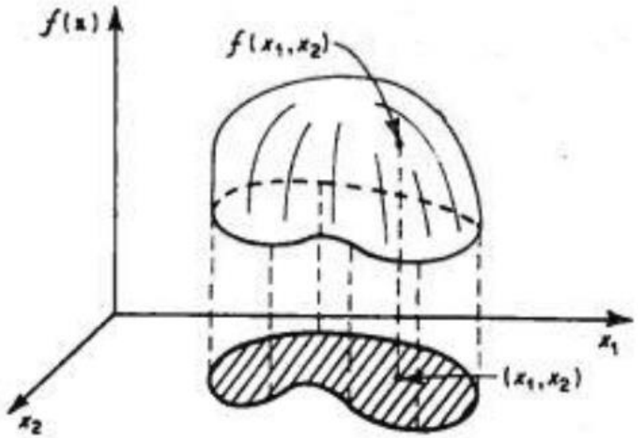
- Συνεχείς
- Ασυνεχείς (και διακριτές)

Συνέχεια συναρτήσεων (2)

• Μια συνάρτηση (αντικειμενική συνάρτηση ή περιορισμός) ορίζεται ως **συνεχής** όταν:

➢ Γραφικά: μπορεί να παρασταθεί από μια συνεχή καμπύλη / επιφάνεια / υπερεπίπεδο για συναρτήσεις μιας / δυο / n μεταβλητών, αντίστοιχα





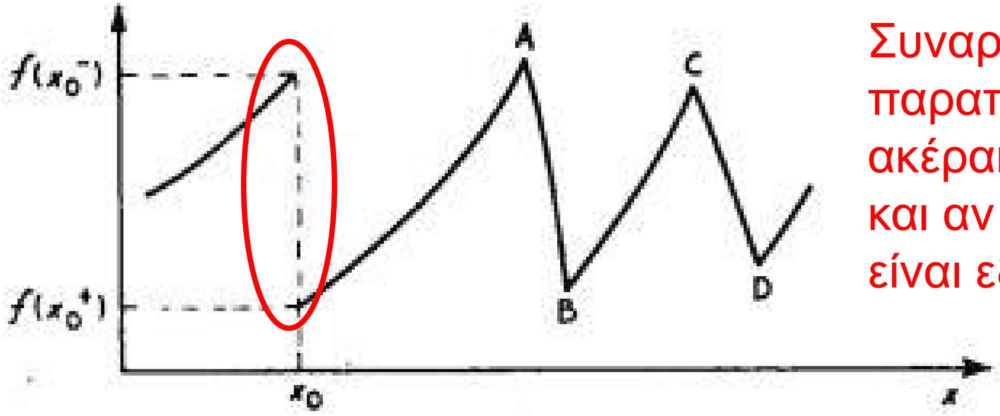
➢ Αναλυτικά: ισχύει $f(x) = \lim_{\Delta x \to 0} f(x + \Delta x)$ όπου Δx κάθε *επιτρεπτή διεύθυνση μεταβολής* γύρω από το σημείο x, και αυτή η συνθήκη ισχύει για κάθε σημείο x στο πεδίο ορισμού της συνάρτησης

Συνέχεια συναρτήσεων (3)

• Μια συνάρτηση (αντικειμενική συνάρτηση ή περιορισμός) ορίζεται ως **ασυνεχής** όταν:

➢ Γραφικά: η γραφική της παράσταση παρουσιάζει τουλάχιστον ένα (ή περισσότερα) σημείο ασυνέχειας

…δηλαδή όταν παίρνει διαφορετικές τιμές ανάλογα με τη διεύθυνση που προσεγγίζουμε το σημείο



Συναρτήσεις με μία ή παραπάνω δυαδικές ή ακέραιες μεταβλητές (ακόμα και αν έχει και συνεχείς) είναι εξ' ορισμού ασυνεχείς

➢ Αναλυτικά: υπάρχει τουλάχιστον ένα σημείο x_0 στο πεδίο ορισμού της συνάρτησης για το οποίο ισχύει $\lim_{\Delta x \to 0} f(x +$

Συνέχεια συναρτήσεων (4)

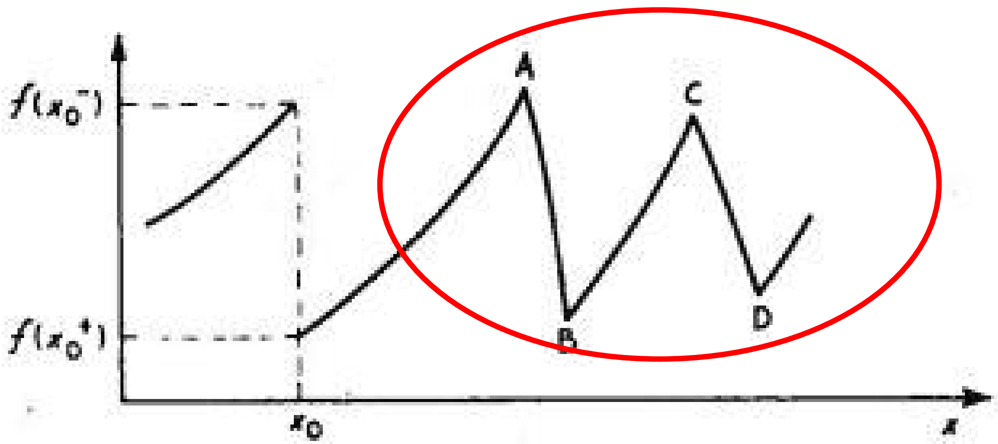
• Μία συνάρτηση παρουσιάζει **ασυνέχεια βάθμωσης** όταν κάποια από τις παραγώγους τις είναι ασυνεχής (παρουσιάζει έστω ένα -ή περισσότερα- σημείο ασυνέχειας)

• Για ένα παράδειγμα συνάρτησης μίας μεταβλητής:

➢ $\lim_{\Delta x \to 0} f'(x + \Delta x) = f'(x_0^+)$ για $x = x_0$ και $\Delta x \geq 0$

➢ $\lim_{\Delta x \to 0} f'(x + \Delta x) = f'(x_0^-)$ για $x = x_0$ και $\Delta x \leq 0$

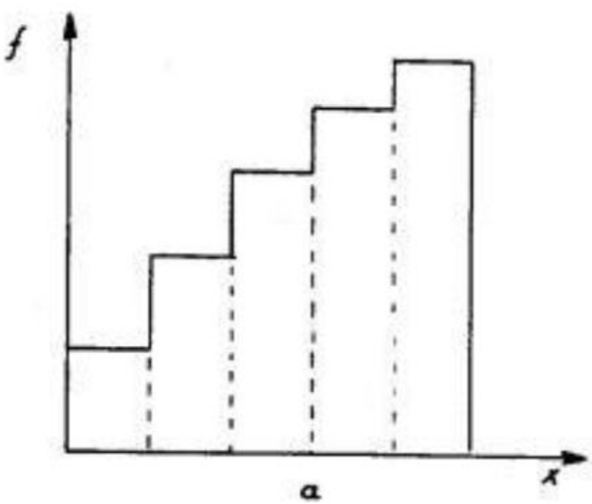
• Στη γραφική παράσταση της συνάρτησης, αυτά τα σημεία αντιστοιχούν σε “απότομες” κορυφές

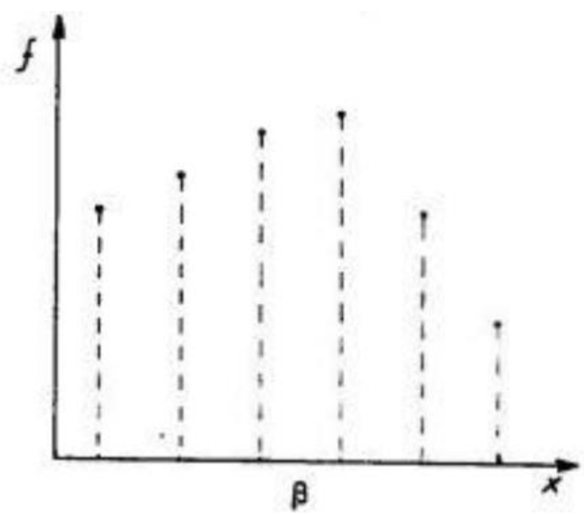


Συνέχεια συναρτήσεων (5)

• Μια άλλη μορφή ασυνέχειας…μία συνάρτηση ορίζεται ως **διακριτή** όταν αποτελείται από ένα σύνολο διακριτών τιμών (ή ισοδύναμα οι μεταβλητές της είναι διακριτές > δυαδικές ή ακέραιες, δείτε ενότητα 1)

• Μπορούν να αναπαρασταθούν γραφικά ως ένα σύνολο διακριτών στοιχείων (σχήμα β) ή ένα ιστόγραμμα (σχήμα α):

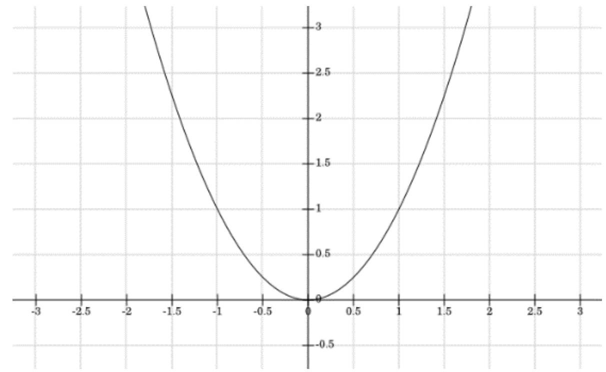




Παραδείγματα συνέχειας συναρτήσεων

- Συνάρτηση $f(x) = ax + b$, όπου a, b παράμετροι

➢ Συνεχής συνάρτηση



- Συνάρτηση $f(x) = x^2$

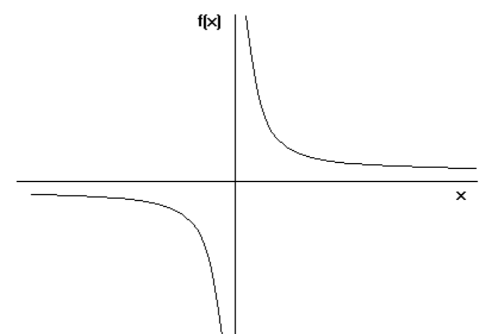
➢ Συνεχής συνάρτηση

➢ Ασυνέχεια βάθμωσης?

- Συνάρτηση $f(x) = \left\{\begin{matrix} x + 5, για\ x \leq 4 \\ x^2, για\ x > 4 \end{matrix}\right\}$

➢ Ασυνεχής συνάρτηση, καθώς $f(4^-) = 9$ και $f(4^+) = 16$

- Συνάρτηση $f(x) = \frac{1}{x}$

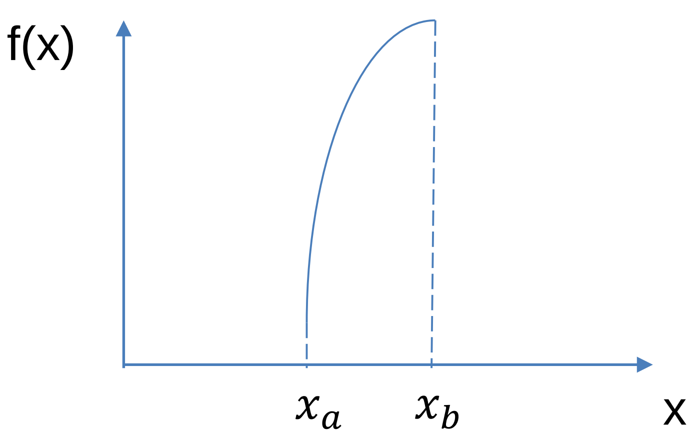


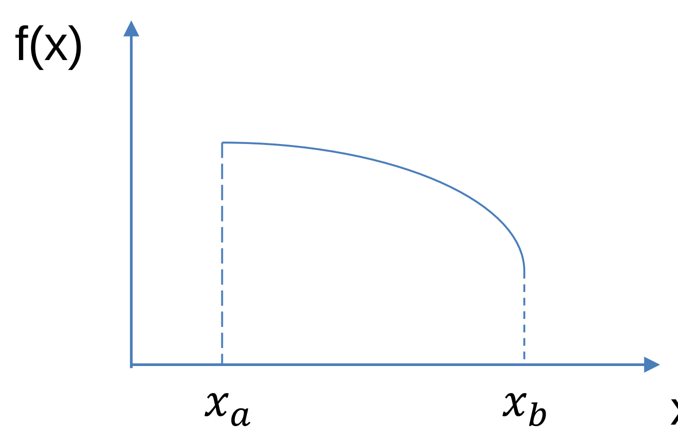
➢ Ασυνεχής συνάρτηση, καθώς δεν ορίζεται στο σημείο $x = 0$

Μονοτονία συναρτήσεων (1)

- Μία συνάρτηση ορίζεται ως **γνησίως αύξουσα** (ή αύξουσα μονότονη) συνάρτηση στο διάστημα $[x_a, x_b]$ όταν ισχύει $f(x + \Delta x) > f(x)$ για $\Delta x > 0$, όπου x, $x + \Delta x \in [x_a, x_b]$

- Μία συνάρτηση ορίζεται ως **γνησίως φθίνουσα** (ή φθίνουσα μονότονη) συνάρτηση στο διάστημα $[x_a, x_b]$ όταν ισχύει $f(x + \Delta x) < f(x)$ για $\Delta x > 0$, όπου x, $x + \Delta x \in [x_a, x_b]$

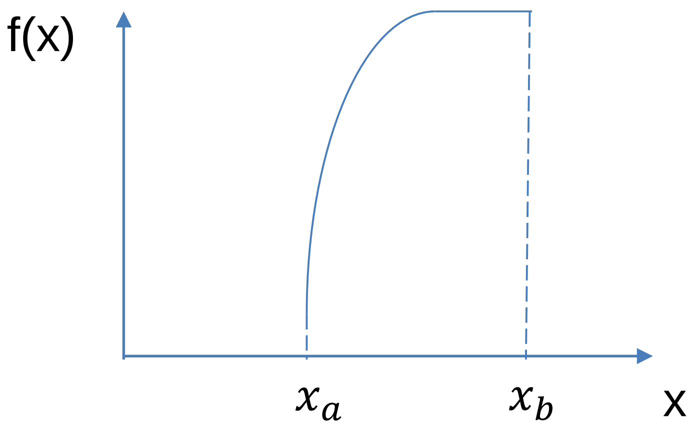


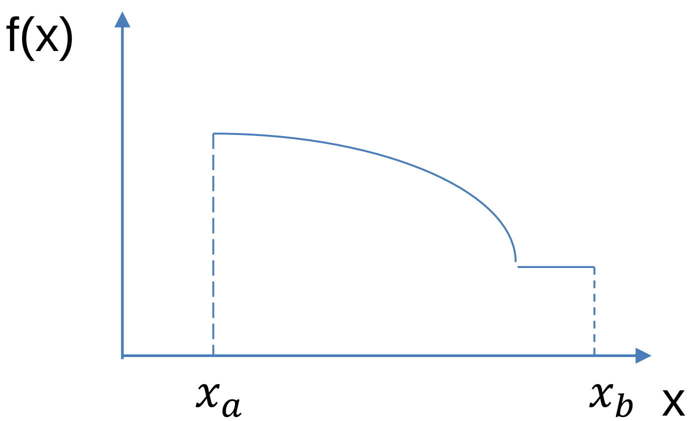


Μονοτονία συναρτήσεων (2)

- Μία συνάρτηση ορίζεται ως **αύξουσα** (ή μη φθίνουσα μονότονη) συνάρτηση στο διάστημα $[x_a, x_b]$ όταν ισχύει $f(x+\Delta x) \geq f(x)$ για $\Delta x > 0$, όπου x, $x+\Delta x \in [x_a, x_b]$
- Μία συνάρτηση ορίζεται ως **φθίνουσα** (ή μη αύξουσα μονότονη) συνάρτηση στο διάστημα $[x_a, x_b]$ όταν ισχύει $f(x+\Delta x) \leq f(x)$ για $\Delta x > 0$, όπου x, $x+\Delta x \in [x_a, x_b]$

- Μία συνάρτηση που είναι ταυτόχρονα μη φθίνουσα και μη-αύξουσα ορίζεται ως **σταθερή** συνάρτηση

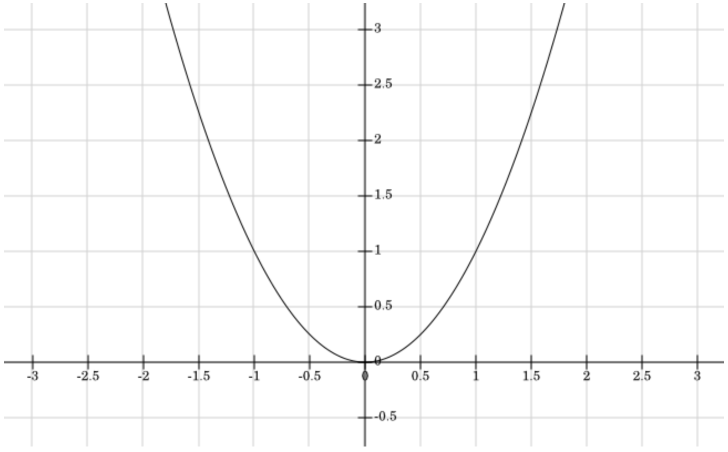




Παραδείγματα μονοτονίας συναρτήσεων

- Συνάρτηση $f(x) = ax + b$, όπου a, b παράμετροι
  - Γνησίως αύξουσα αν $a > 0$
  - Γνησίως φθίνουσα αν $a < 0$
  - Μη-φθίνουσα ΚΑΙ μη-αύξουσα (άρα σταθερή) αν $a = 0$

- Συνάρτηση $f(x) = x^2$
  - Γνησίως αύξουσα στο διάστημα $[0, \infty)$
  - Γνησίως φθίνουσα στο διάστημα $(-\infty, 0]$



Ακρότατα συναρτήσεων (1)

- **Ολικό ή απόλυτο ακρότατο (μέγιστο / ελάχιστο)** x^* είναι το σημείο στο οποίο η συνάρτηση μεγιστοποιείται / ελαχιστοποιείται σε όλο το πεδίο ορισμού της (δηλαδή η βέλτιστη λύση που ψάχνουμε…ενότητα 1)

- …για γνησίως αύξουσες και γνησίως φθίνουσες συναρτήσεις, το πολύ ένα σημείο για το μέγιστο και ένα σημείο για το ελάχιστο…διαφορετικά είναι δυνατόν να έχουμε πολλαπλά ολικά ακρότατα (ενότητα 1) !

- Για ολικό ελάχιστο ισχύει $f(x^*) \leq f(x), \forall x$
- Για ολικό μέγιστο ισχύει $f(x^*) \geq f(x), \forall x$

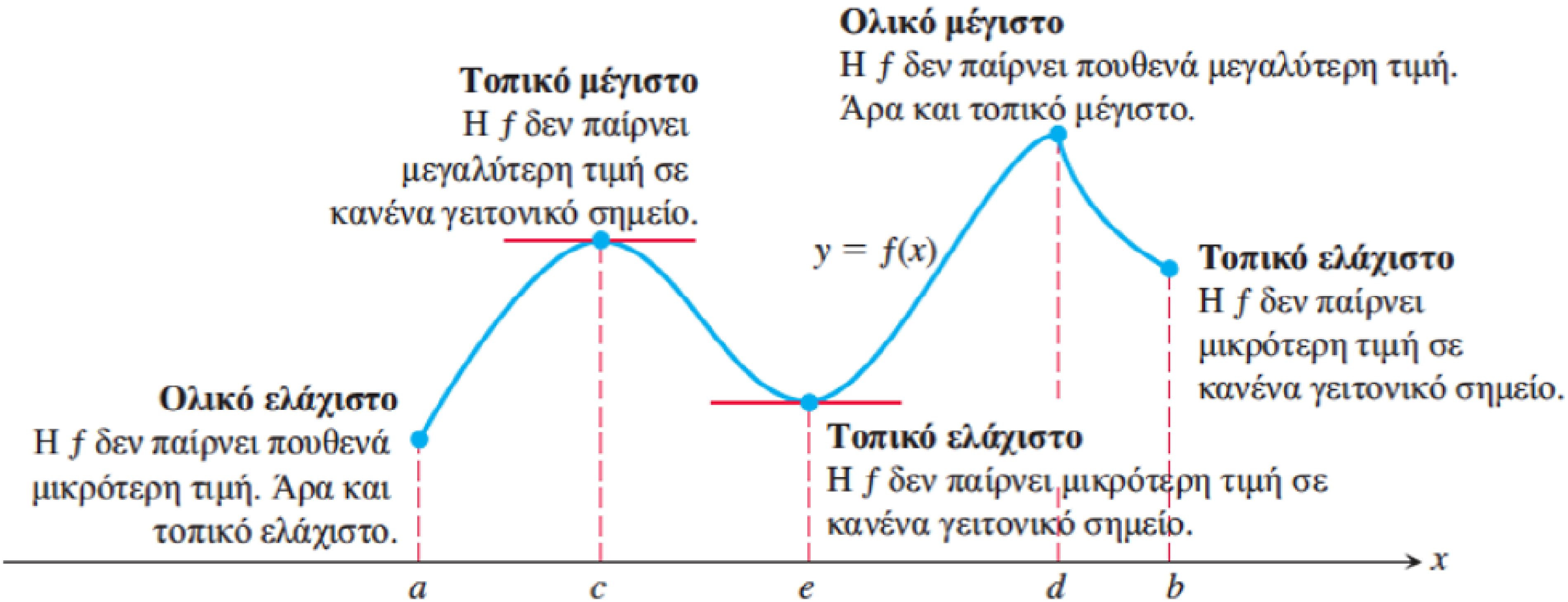
Ακρότατα συναρτήσεων (2)

- **Τοπικό ή σχετικό ακρότατο** $x^{\sim}$ είναι το σημείο στο οποίο η συνάρτηση μεγιστοποιείται / ελαχιστοποιείται σε μια "γειτονική περιοχή" του πεδίου ορισμού της

- Για τοπικό ελάχιστο ισχύει $f(x^{\sim}) \leq f(x), \forall x\colon \|x - x^{\sim}\| \leq \varepsilon$
- Για τοπικό μέγιστο ισχύει $f(x^{\sim}) \geq f(x), \forall x\colon \|x - x^{\sim}\| \leq \varepsilon$

όπου ε θέτει τα όρια της "γειτονικής περιοχής"

Παράδειγμα ακρότατων συναρτήσεων



Μονοτροπικότητα συναρτήσεων (1)

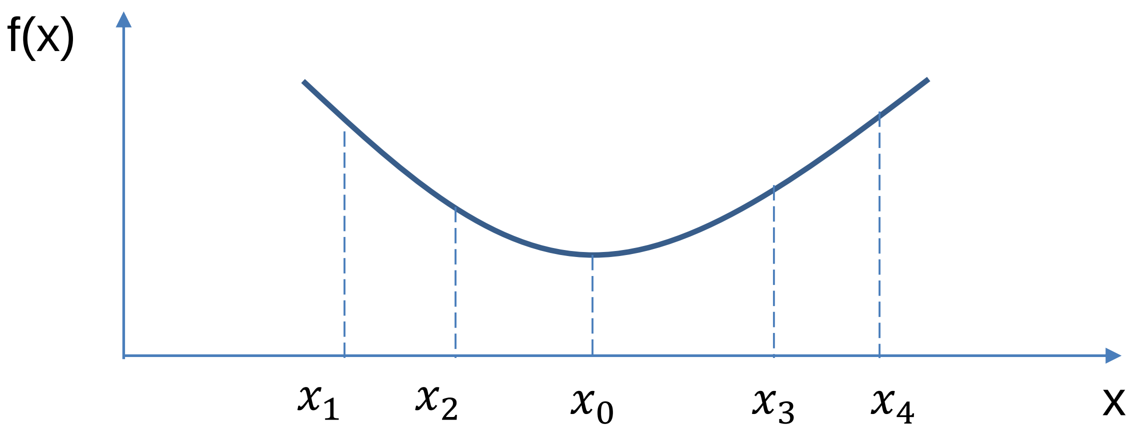
• Μία συνάρτηση ορίζεται ως **μονοτροπική** όταν παρουσιάζει ένα μόνο τοπικό ελάχιστο ή ένα μόνο τοπικό μέγιστο (…άρα και ένα μόνο ολικό ελάχιστο / μέγιστο)

• Μία συνάρτηση μιας μεταβλητής ορίζεται ως μονοτροπική όταν ισχύει (όπου x_0 το ελάχιστο της συνάρτησης):

➢ $f(x_0) < f(x_2) < f(x_1)$, για $x_1 < x_2 < x_0$

➢ $f(x_0) < f(x_3) < f(x_4)$, για $x_0 < x_3 < x_4$

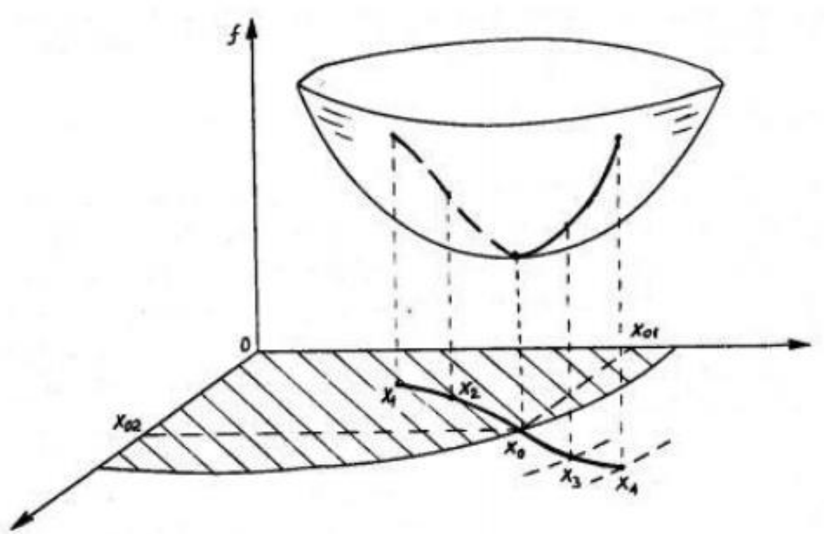
➢ …και αντίστοιχες συνθήκες για το μέγιστο…



Μονοτροπικότητα συναρτήσεων (2)

• Στη γενική περίπτωση συναρτήσεων πολλών μεταβλητών, ορίζουμε μια συνάρτηση ως **ισχυρά μονοτροπική** όταν ισχύουν οι ίδιες συνθήκες, αλλά με τα $\boldsymbol{x_0}$, $\boldsymbol{x_1}$, $\boldsymbol{x_2}$, $\boldsymbol{x_3}$, $\boldsymbol{x_4}$ να αποτελούν σημεία του χώρου των n-διαστάσεων

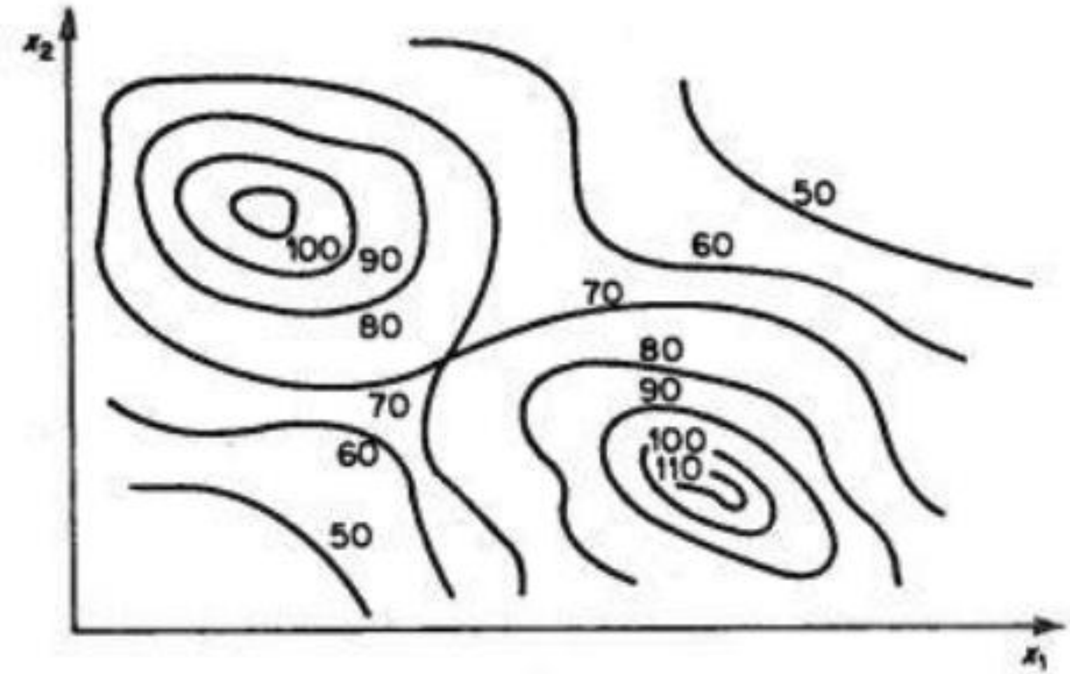
• Για συνάρτηση 2 μεταβλητών για παράδειγμα (σημειώσεις μαθήματος)



Μονοτροπικότητα συναρτήσεων (3)

• Μία συνάρτηση ορίζεται ως **πολυτροπική** όταν παρουσιάζει περισσότερα του ενός τοπικά ακρότατα

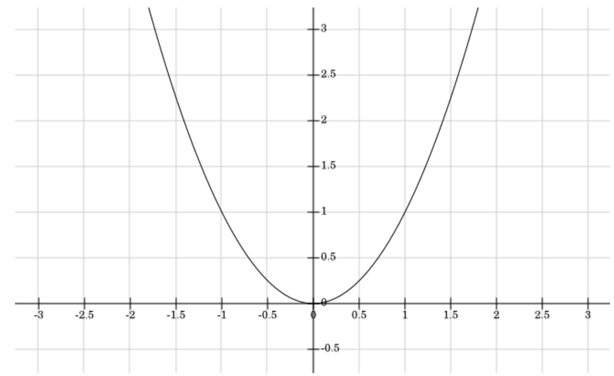
• Για συνάρτηση 2 μεταβλητών για παράδειγμα (σημειώσεις μαθήματος)



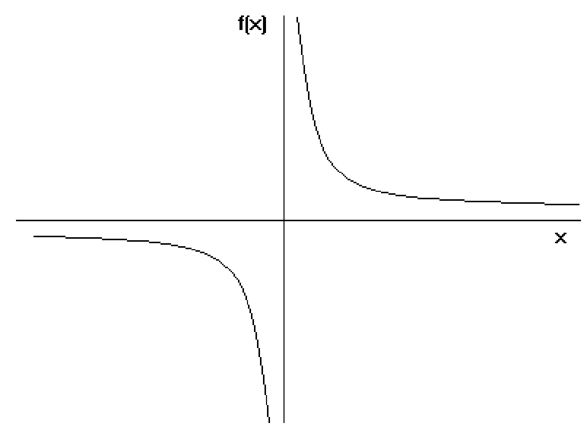
Παραδείγματα μονοτροπικότητας συναρτήσεων

- Συνάρτηση $f(x) = ax + b$, όπου a, b παράμετροι
  - Μονοτροπική αν $a > 0$ ή $a < 0$
  - Πολυτροπική αν $a = 0$

- Συνάρτηση $f(x) = x^2$
  - Μονοτροπική (ως προς ελάχιστο)
  - Πολυτροπική (ως προς μέγιστο)



- Συνάρτηση $f(x) = \frac{1}{x}$
  - Πολυτροπική

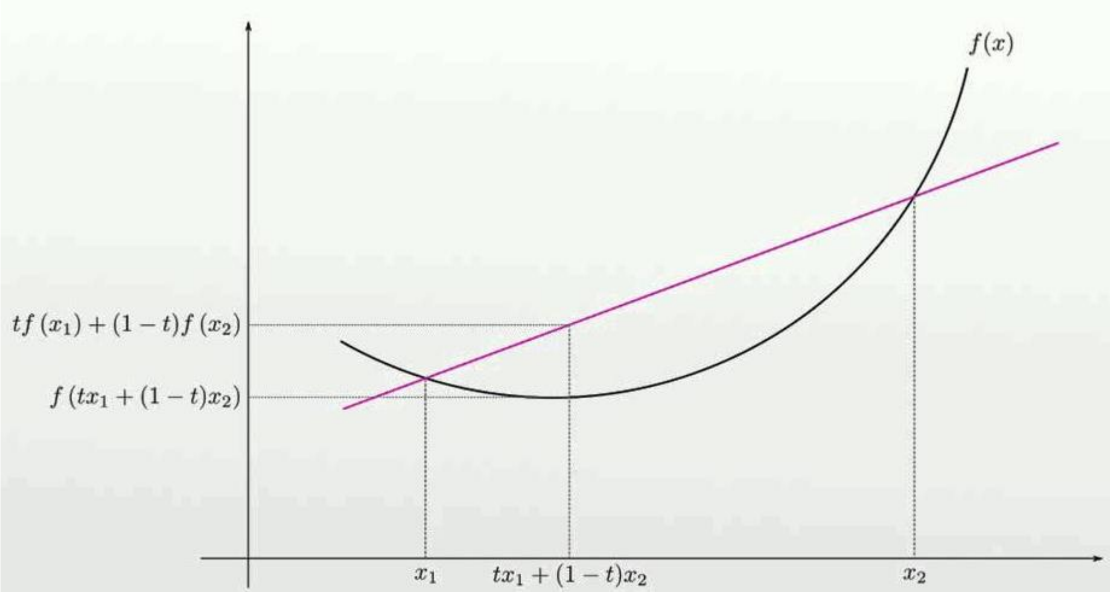


Κυρτότητα συναρτήσεων (1)

- Μια ειδική ιδιότητα των μονοτροπικών συναρτήσεων…

- Μία συνάρτηση ορίζεται ως **κυρτή (convex)** όταν ισχύει $f[tx_1 + (1-t)x_2] \leq tf(x_1) + (1-t)f(x_2), \forall t \in [0,1]$, και οποιαδήποτε σημεία x_1 και x_2 στο διάστημα ορισμού της..

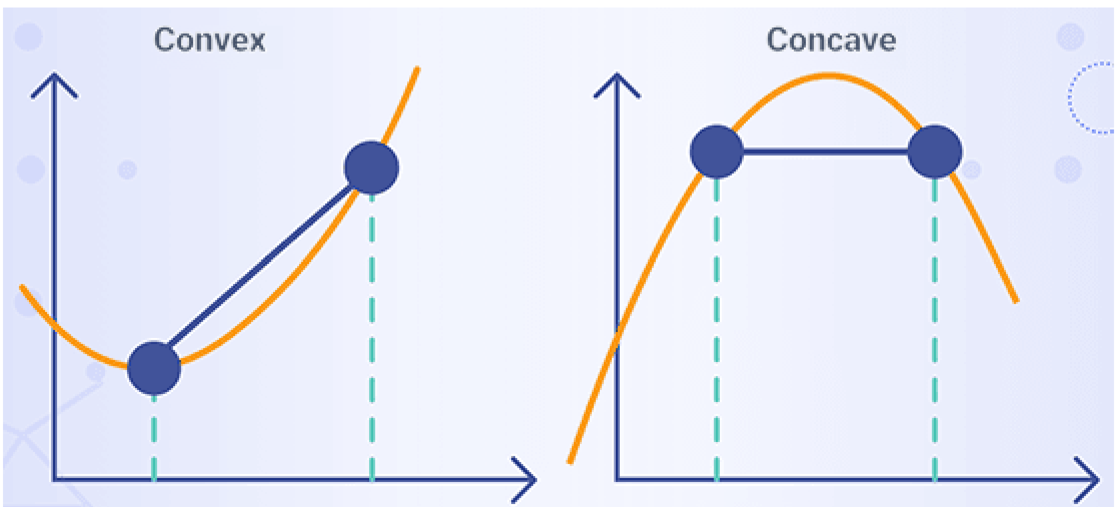
- …ή ισοδύναμα όταν οποιαδήποτε ευθεία γραμμή από το σημείο x_1 στο σημείο x_2 κείται πάνω από την καμπλύλη της συνάρτησης



Κυρτότητα συναρτήσεων (2)

- Μία συνάρτηση g ορίζεται ως **κοίλη (concave)** όταν ισχύει $g[tx_1 + (1-t)x_2] \geq tg(x_1) + (1-t)g(x_2), \forall t \in [0,1]$, και οποιαδήποτε σημεία x_1 και x_2 στο διάστημα ορισμού της..

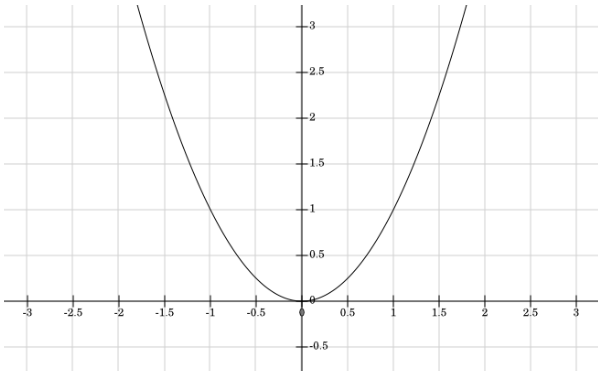
- …ή ισοδύναμα όταν η συνάρτηση $f = -g$ είναι κυρτή



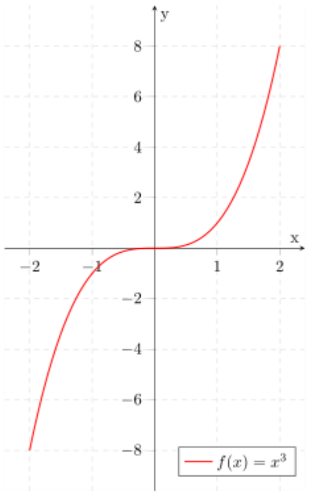
- Μια συνάρτηση αποκαλείται **μη-κυρτή (non-convex)** όταν δεν είναι ούτε κυρτή ούτε κοίλη !

Παραδείγματα κυρτότητας συναρτήσεων

- Συνάρτηση $f(x) = ax + b$, όπου a, b παράμετροι
  - ➢ Κυρτή ΚΑΙ κοίλη συνάρτηση (το οποίο ισχύει ΜΟΝΟ για γραμμικές συναρτήσεις)



- Συνάρτηση $f(x) = x^2$
  - ➢ Κυρτή συνάρτηση



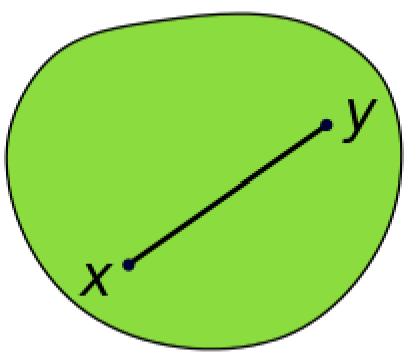
- Συνάρτηση $f(x) = x^3$
  - ➢ Κυρτή συνάρτηση για $x > 0$
  - ➢ Κοίλη συνάρτηση για $x < 0$
  - ➢ Γενικά (σε όλο το πεδίο ορισμού της)

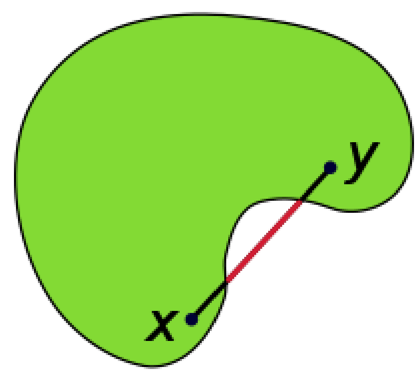
είναι μη-κυρτή (δεν είναι ούτε κυρτή ούτε κοίλη)

Κυρτότητα πεδίου ορισμού συναρτήσεων

- Το **πεδίο ορισμού** S μιας συνάρτησης (και γενικότερα ένα σύνολο) ορίζεται ως **κυρτό (ή συνδεδεμένο)** όταν ισχύει $tx + (1-t)y \in S, \forall t \in [0,1]$, και οποιαδήποτε σημεία $x, y \in S$

- …ή ισοδύναμα όταν η ευθεία που συνδέει οποιαδήποτε δύο σημεία του S βρίσκεται εξ’ ολοκλήρου μέσα στο S





- Εξ’ ορισμού, συναρτήσεις με διακριτές (δυαδικές ή ακέραιες) μεταβλητές έχουν μη-κυρτά πεδία ορισμού

Κυρτότητα προβλημάτων βελτιστοποίησης

• Ένα **πρόβλημα βελτιστοποίησης** ορίζεται ως **κυρτό** (convex problem) όταν…

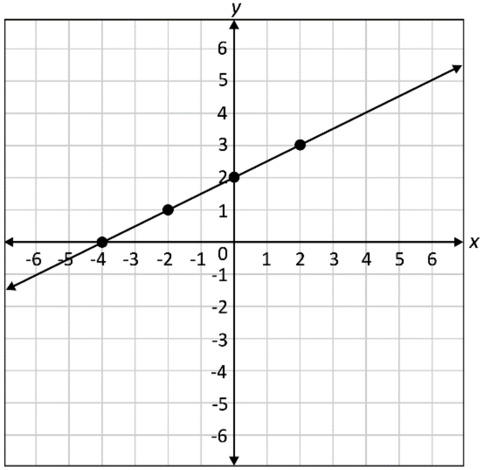
- ➢ Η αντικειμενική συνάρτηση είναι κυρτή ή κοίλη ΚΑΙ
- ➢ Όλοι οι περιορισμοί είναι κυρτές ή κοίλες συναρτήσεις ΚΑΙ
- ➢ Το πεδίο ορισμού S είναι κυρτό (συνδεδεμένο)

Ένα πρόβλημα με δυαδικές ή ακέραιες μεταβλητές είναι εξ' ορισμού μη-κυρτό πρόβλημα

Γραμμικότητα συναρτήσεων

• Μια συνάρτηση (αντικειμενική συνάρτηση ή περιορισμός) ορίζεται ως **γραμμική** όταν:

- ➢ Είναι πολυωνυμική συνάρτηση πρώτου βαθμού…
- ➢ …ή ισοδύναμα η τιμή της συνάρτησης αλλάζει κατά μία σταθερή ποσότητα όταν η τιμή της κάθε μεταβλητής αλλάζει κατά μία σταθερή ποσότητα…
- ➢ …δηλαδή είναι της μορφής $f(x_1, x_2, \ldots, x_n) = c_1 x_1 + c_2 x_2 + \cdots + c_n x_n$ (όπου $c_1, c_2, \ldots, c_n$ παράμετροι)



Γραμμικότητα συναρτήσεων και προβλημάτων (2)

• Ένα **πρόβλημα βελτιστοποίησης** ορίζεται ως **γραμμικό** όταν…

- Η αντικειμενική συνάρτηση είναι γραμμική ΚΑΙ
- Όλοι οι περιορισμοί είναι γραμμικές συναρτήσεις ΚΑΙ
- Το πεδίο ορισμού S είναι κυρτό (συνδεδεμένο)

Ένα γραμμικό πρόβλημα είναι και κυρτό πρόβλημα

Ένα κυρτό πρόβλημα μπορεί να μην είναι γραμμικό, π.χ. ένα πρόβλημα με τετραγωνικούς όρους στην αντικειμενική συνάρτηση και τους περιορισμούς

Διευθύνσεις στο χώρο πολλαπλών διαστάσεων (1)

- Αναφέραμε σε πολλούς από τους προηγούμενους ορισμούς την **έννοια της διεύθυνσης γύρω από ένα σημείο**, η οποία είναι και χρήσιμη για κάποιες από τις μεθόδους επίλυσης προβλημάτων που θα δούμε στο μέλλον

- Η **μέθοδος των διευθύνσεων** (directional method) μας επιτρέπει να συστηματοποιήσουμε την έννοια της διεύθυνσης γύρω από ένα σημείο του χώρου πολλαπλών διαστάσεων…

- …και να **προσεγγίσουμε** μια συνάρτηση πολλών μεταβλητών μέσω μιας συνάρτησης μιας μόνο μεταβλητής

Διευθύνσεις στο χώρο πολλαπλών διαστάσεων (2)

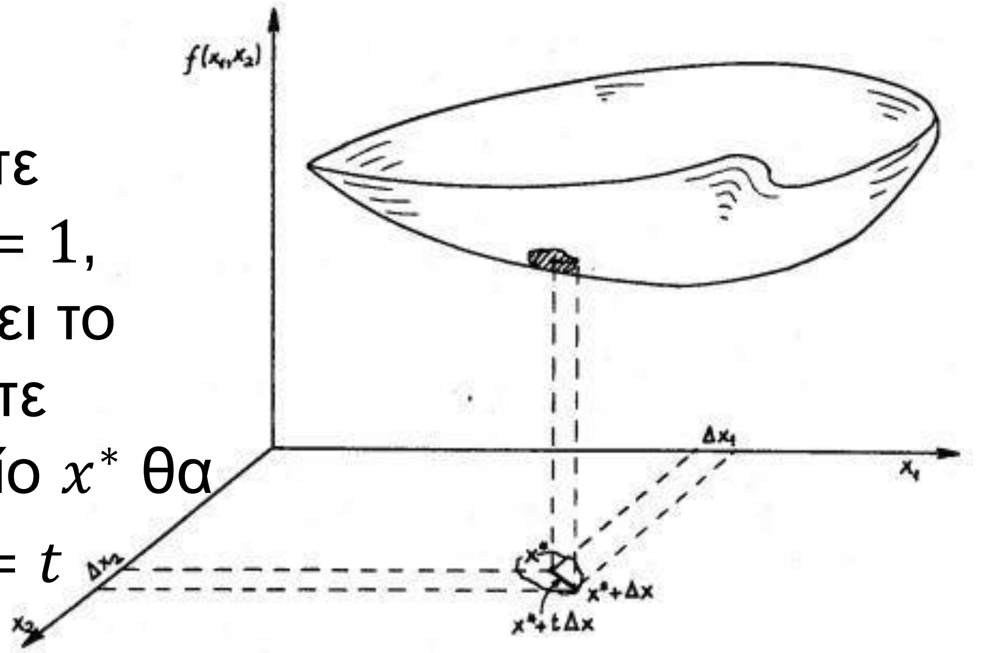
- Ας ξεκινήσουμε από μια **συνάρτηση δύο μεταβλητών** $f(x) = f(x_1, x_2)$, εστιάζοντας σε ένα τυχαίο αρχικό σημείο $x^* = (x_1^*, x_2^*)$, στη γειτονιά του οποίου μπορούμε να ορίσουμε αυθαίρετα κάποιες μεταβολές $\Delta x = (\Delta x_1, \Delta x_2)$ από το αρχικό σημείο και να φθάσουμε στο σημείο $x^* + \Delta x = (x_1^* + \Delta x_1, x_2^* + \Delta x_2)$

- Ορισμός διαφορετικού Δx ορίζει και διαφορετική διεύθυνση:
  - $(\Delta x_1, \Delta x_2) = (1{,}0)$: διεύθυνση παράλληλη στον άξονα x_1 με θετική φορά
  - $(\Delta x_1, \Delta x_2) = (0, -1)$: διεύθυνση παράλληλη στον άξονα x_2 με αρνητική φορά
  - $(\Delta x_1, \Delta x_2) = \left(1/\sqrt{2}, 1/\sqrt{2}\right)$: διεύθυνση παράλληλη στη γραμμή των 45^o με θετική φορά

Διευθύνσεις στο χώρο πολλαπλών διαστάσεων (3)

- Έχοντας επιλέξει μια **συγκεκριμένη διεύθυνση** $\Delta x = (\Delta x_1, \Delta x_2)$, τότε οποιοδήποτε ενδιάμεσο σημείο μεταξύ του x^* και $x^* + \Delta x$ απέχει από το αρχικό σημείο x^* απόσταση $x^* + t\Delta x = (x_1^* + t\Delta x_1, x_2^* + t\Delta x_2)$, όπου $0 \le t \le 1$

- Αν θεωρήσουμε το Δx σαν μοναδιαίο διάνυσμα έτσι ώστε $\Delta x^{\mathrm{T}} \cdot \Delta x = (\Delta x_1)^2 + (\Delta x_2)^2 = 1$, τότε στη διεύθυνση που ορίζει το Δx η απόσταση οποιουδήποτε σημείου από το αρχικό σημείο x^* θα είναι $d = \sqrt{(t\Delta x_1)^2 + (t\Delta x_2)^2} = t$



Διευθύνσεις στο χώρο πολλαπλών διαστάσεων (4)

- … επομένως, **θεωρώντας ως παράμετρο τη διεύθυνση** Δx, η αρχική συνάρτηση δύο μεταβλητών $f(x_1, x_2)$ **προσεγγίζεται** με μια συνάρτηση μιας μόνο μεταβλητής $g(t)$ **στη γειτονιά του σημείου** $\boldsymbol{x}^*$, η οποία μπορεί να εκφρασθεί ως $g(t) = f(x^* + t\Delta x) = f(x_1^* + t\Delta x_1, x_2^* + t\Delta x_2)$

- όπου η $g(t)$ για $t \to 0$ είναι $g(0) = f(x_1^*, x_2^*) = f(x^*)$ (δηλαδή το αρχικό σημείο) και $g(1) = f(x_1^* + \Delta x_1, x_2^* +$

Διευθύνσεις στο χώρο πολλαπλών διαστάσεων (5)

- Η παραπάνω μέθοδος των διευθύνσεων μπορεί να γενικευθεί στην περίπτωση μιας **συνάρτησης n-μεταβλητών** θεωρώντας ως αρχικό σημείο το $x^* = (x_1^*, x_2^*, .., x_n^*)$ και ως διεύθυνση μεταβολής τη $\Delta x = (\Delta x_1, \Delta x_2, .., \Delta x_n)$

- … τότε οποιοδήποτε ενδιάμεσο σημείο μεταξύ του x^* και $x^* + \Delta x$ δίνεται από τη σχέση $x^* + t\Delta x = (x_1^* + t\Delta x_1, x_2^* + t\Delta x_2, .., x_n^* + t\Delta x_n)$, όπου $0 \leq t \leq 1$

- … και η αρχική συνάρτηση n-μεταβλητών **προσεγγίζεται** με μια συνάρτηση μιας μόνο μεταβλητής $g(t)$ **στη γειτονιά του σημείου $\boldsymbol{x}^*$**, η οποία μπορεί να εκφρασθεί ως $g(t) = f(x^* + t\Delta x) = f(x_1^* + t\Delta x_1, x_2^* + t\Delta x_2, .., x_n^* + t\Delta x_n)$

Ανάπτυγμα Taylor συναρτήσεων (1)

- Για μια **συνάρτηση μιας μεταβλητής** $f(x)$, η τιμή της στη γειτονιά ενός τυχαίου σημείου x δίνεται από την **άπειρη σειρά Taylor**:

$$f(x+\Delta x) = f(x) + f'(x)\Delta x + \frac{1}{2} f''(x)(\Delta x)^2 + \ldots + \frac{1}{n!} f^{(n)}(x)(\Delta x)^n + \ldots$$

- ή από ένα **πεπερασμένο ανάπτυγμα** (τύπος του Taylor):

$$f(x+\Delta x) = f(x) + f'(x)\Delta x + \frac{1}{2} f''(x)(\Delta x)^2 + \ldots + \frac{1}{n!} f^{(n)}(k)(\Delta x)^n$$

όπου k κάποιο ενδιάμεσο σημείο μεταξύ x και $x + \Delta x$, δηλαδή $k = x + c\Delta x$, όπου $0 < c < 1$

Ανάπτυγμα Taylor συναρτήσεων (2)

• Στη γενική περίπτωση μιας **συνάρτησης n-μεταβλητών**, η τιμή της στη γειτονιά ενός τυχαίου σημείου x δίνεται από (χρησιμοποιώντας τη μέθοδο των διευθύνσεων):

$$f\left(x+\Delta x\right)=g\left(t\right)\Big|_{t=1}=g\left(1\right) \text{ όπου } f\left(x\right)=g\left(0\right)$$

• Επομένως τα παραπάνω αναπτύγματα Taylor ισχύουν για τη συνάρτηση μιας μεταβλητής $g(t)$:

$$g\left(1\right)=g\left(0\right)+g^{'}\left(0\right)+\frac{1}{2}g^{''}\left(0\right)+\ldots+\frac{1}{n!}g^{(n)}\left(0\right)+\ldots$$

$$g\left(1\right)=g\left(0\right)+g^{'}\left(0\right)+\frac{1}{2}g^{''}\left(0\right)+\ldots+\frac{1}{n!}g^{(n)}\left(k\right)$$

όπου $\Delta x = 1$ και $0 < k < 1$

• …απαιτείται ο υπολογισμός των παραγώγων της $g(t)$ για $t \to 0$

Ανάπτυγμα Taylor συναρτήσεων (3)

- Για την πρώτη παράγωγο έχουμε:

$$g^{'}(t)\Big|_{t=0} = \left.\frac{df(x+t\Delta x)}{dt}\right|_{t=0}$$

- Αυτή η ολική παράγωγος της f μπορεί να εκφρασθεί ως προς τις μερικές παραγώγους της:

$$\frac{df(x+t\Delta x)}{dt} = \frac{\partial f(x+t\Delta x)}{\partial(x_1+t\Delta x_1)}\frac{d(x_1+t\Delta x_1)}{dt} + \ldots + \frac{\partial f(x+t\Delta x)}{\partial(x_n+t\Delta x_n)}\frac{d(x_n+t\Delta x_n)}{dt}$$

- Εφόσον η Δx θεωρείται παράμετρος (μέθοδος των διευθύνσεων) ισχύει

$$\frac{d(x_i+t\Delta x_i)}{dt} = \Delta x_i \text{ για i=1, 2,..., n}$$

- Αντικαθιστώντας τις δύο τελευταίες σχέσεις στην πρώτη:

$$g^{'}(0) = \frac{\partial f(x)}{\partial x_1}\Delta x_1 + \frac{\partial f(x)}{\partial x_2}\Delta x_2 + \ldots + \frac{\partial f(x)}{\partial x_n}\Delta x_n$$

Ανάπτυγμα Taylor συναρτήσεων (4)

- Η οποία μπορεί να εκφρασθεί και υπό μορφή διανυσμάτων:

$$g'(0) = \nabla^T f(x) \Delta x$$

με $\nabla f(x) = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial f(x)}{\partial x_1} & \dots & \dfrac{\partial f(x)}{\partial x_n} \end{bmatrix}^T$ τη **Jacobian της *f*** και $\Delta x = [\Delta x_1 \quad \dots \quad \Delta x_n]^T$

- Με αντίστοιχο τρόπο υπολογίζουμε τη δεύτερη παράγωγο της $g(t)$ για $t \to 0$:

$$g''(0) = \Delta x^T \nabla^2 f(x) \Delta x$$

με $\nabla^2 f(x) = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1^2} & \dots & \dfrac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n \partial x_1} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \dfrac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1 \partial x_n} & \dots & \dfrac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n^2} \end{bmatrix}$ τη **Hessian μήτρα της *f***

Ανάπτυγμα Taylor συναρτήσεων (5)

- Με αντίστοιχο τρόπο υπολογίζουμε τη γενική n-παράγωγο της $g(t)$ για $t \to 0$: $g^{(n)}(0) = (\Delta x^{\mathrm{T}} \nabla)^n f(x)$

με $\left(\Delta x^T \nabla\right)^n = \left(\Delta x_1 \frac{\partial f(x)}{\partial x_1} + \Delta x_2 \frac{\partial f(x)}{\partial x_2} + \ldots + \Delta x_n \frac{\partial f(x)}{\partial x_n}\right)^n$ τον **τελεστή της *f***

- Επομένως, έχοντας υπολογίσει τις παραγώγους της $g(t)$ για $t \to 0$, μπορούμε να υπολογίσουμε τα αναπτύγματα Taylor της συνάρτησης n-μεταβλητών:

$$f(x+\Delta x) = f(x) + \nabla^T f(x)\Delta x + \frac{1}{2}\Delta x^T \nabla^2 f(x)\Delta x + \ldots + \frac{1}{n!}\left(\Delta x^T \nabla\right)^n f(x) + \ldots$$

$$f(x+\Delta x) = f(x) + \nabla^T f(x)\Delta x + \frac{1}{2}\Delta x^T \nabla^2 f(x)\Delta x + \ldots + \frac{1}{n!}\left(\Delta x^T \nabla\right)^n f(x+c\Delta x)$$

Διαφορικό συναρτήσεων (1)

- Για μια συνάρτηση μιας μεταβλητής $f(x)$, η **πρώτη παράγωγός** της στο σημείο x ορίζεται ως:

$$f'(x) = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f\left(x + \Delta x\right) - f\left(x\right)}{\Delta x}$$

- Για πολύ μικρό αλλά πεπερασμένο $\Delta x \neq 0$, και σύμφωνα με το ανάπτυγμα Taylor της f, κάνουμε την προσέγγιση:

$$f\left(x + \Delta x\right) - f\left(x\right) \approx f'(x)\Delta x$$

- Η γεωμετρική ερμηνεία αυτής της προσέγγισης είναι πως η εφαπτομένη ευθεία στο σημείο $(x, f(x))$ βρίσκεται πολύ κοντά στην καμπύλη της f για μικρά Δx

Διαφορικό συναρτήσεων (2)

- Στη γενική περίπτωση μιας συνάρτησης n-μεταβλητών, η αντίστοιχη προσέγγιση είναι:

$$f\left(x+\Delta x\right)-f\left(x\right)\approx\nabla^T f(x)\Delta x$$

- Το γινόμενο $f'(x)\Delta x$ ή $\nabla^T f(x)\Delta x$ που χρησιμοποιούμε στις παραπάνω προσεγγίσεις ορίζεται ως το **διαφορικό της συνάρτησης $\boldsymbol{f}$ στο σημείο $\boldsymbol{x}$ ως προς $\boldsymbol{\Delta x}$** και συμβολίζεται $df\left(x,\Delta x\right)$

Τέλος Ενότητας