

Εισαγωγικές έννοιες

Δ. Γ. Παπαγεωργίου
Τμήμα Μηχανικών Επιστήμης Υλικών
Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων

dparageo@cc.uoi.gr
<http://pc164.materials.uoi.gr/dparageo>

Κατηγορίες προβλημάτων (σε μια διάσταση)

Το πρόβλημα

Να βρεθεί το ελάχιστο της συνάρτησης $f(x)$. Γράφουμε: $\min_x f(x)$

- Ελαχιστοποίηση χωρίς περιορισμούς
 $x \in \mathbb{R}$ $f(x): \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$

- Ελαχιστοποίηση με περιορισμούς
Επιπλέον, πρέπει να ικανοποιούνται οι περιορισμοί:
 $c_i(x) = 0, \quad i = 1 \dots K$ ισοτικοί περιορισμοί
 $c_i(x) \geq 0, \quad i = K + 1 \dots M$ ανισοτικοί περιορισμοί
Πχ. $\min_x f(x), \quad c_1(x) = x^2 - 1 \geq 0$

- Ελαχιστοποίηση με όρια στις μεταβλητές
 $x \in [a, b]$
Πχ. $\min_x f(x), \quad x \in [0, 1]$

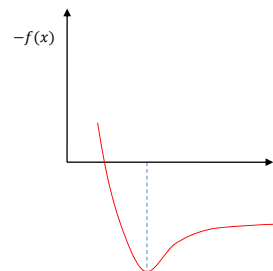
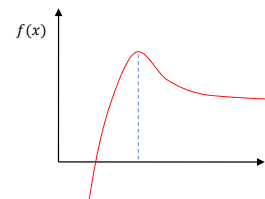
Προβλήματα εύρεσης μεγίστου

Προβλήματα εύρεσης μεγίστου:

$$\max_x f(x)$$

μπορούν να αναχθούν σε
προβλήματα ελαχιστοποίησης

$$\max_x f(x) = \min_x [-f(x)]$$



Συμβολισμοί

N, n Πλήθος μεταβλητών (παραμέτρων) της συνάρτησης. Ονομάζεται και διάσταση του προβλήματος.

\mathbf{x}, \vec{x} Διάνυσμα του N -διάστατου χώρου με στοιχεία x_1, x_2, \dots, x_N
Αναπαριστάται και ως πίνακας στήλη:

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_N \end{bmatrix}$$

$f(\mathbf{x})$ Η συνάρτηση της οποίας αναζητούμε ελάχιστο. Ονομάζεται και αντικειμενική συνάρτηση.

$\nabla f(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f}{\partial x_2} \\ \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial x_N} \end{bmatrix}$ Το διάνυσμα πρώτων παραγώγων της συνάρτησης.
Συμβολίζεται και με $\mathbf{g}(\mathbf{x})$

Συμβολισμοί

Ο πίνακας των δευτέρων παραγώγων της συνάρτησης.

$$\nabla^2 f(\mathbf{x}) = \mathbf{G}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_N} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2} & & \\ \vdots & & \ddots & \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_N \partial x_1} & & & \frac{\partial^2 f}{\partial x_N^2} \end{bmatrix}$$

Λέγεται και Εσσιανός πίνακας (Hessian). Τα στοιχεία του είναι: $G_{ij} = \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}$

Αν f είναι δύο φορές συνεχώς παραγωγίσιμη, τότε τα στοιχεία του είναι συμμετρικά:

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} = \frac{\partial^2 f}{\partial x_j \partial x_i}$$

Συμβολισμοί

\mathbf{x}^* Το σημείο στο οποίο η αντικειμενική συνάρτηση έχει ελάχιστο. Ονομάζεται και **ελαχιστοποιητής** της $f(\mathbf{x})$.

$f^* = f(\mathbf{x}^*)$ Η τιμή της συνάρτησης στο ελάχιστο.

$\mathbf{G}^* = \mathbf{G}(\mathbf{x}^*)$ Ο πίνακας των δευτέρων παραγώγων στο ελάχιστο.

Μικρά έντονα γράμματα συμβολίζουν διανύσματα N θέσεων.

Κεφαλαία έντονα γράμματα συμβολίζουν πίνακες $N \times N$

Ο εκθέτης T δηλώνει τον ανάστροφο πίνακα (οι γραμμές γίνονται στήλες):

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_N \end{bmatrix} \quad \mathbf{x}^T = [x_1 \quad x_2 \quad \cdots \quad x_N]$$
$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{bmatrix} \quad \mathbf{A}^T = \begin{bmatrix} 1 & 3 \\ 2 & 4 \end{bmatrix}$$

Ο εκθέτης -1 δηλώνει τον αντίστροφο:

$$\mathbf{A}^{-1}\mathbf{A} = \mathbf{A}\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{I} \quad \mathbf{I} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Τι είναι ελάχιστο

Για μονοδιάστατη συνάρτηση

Τοπικό ελάχιστο

Σημείο x^* με την ιδιότητα $f(x^*) \leq f(x)$, $\forall x \in R$ τέτοιο ώστε $|x - x^*| < \varepsilon$ για οσοδήποτε μικρό ε



Ισχυρό τοπικό ελάχιστο:

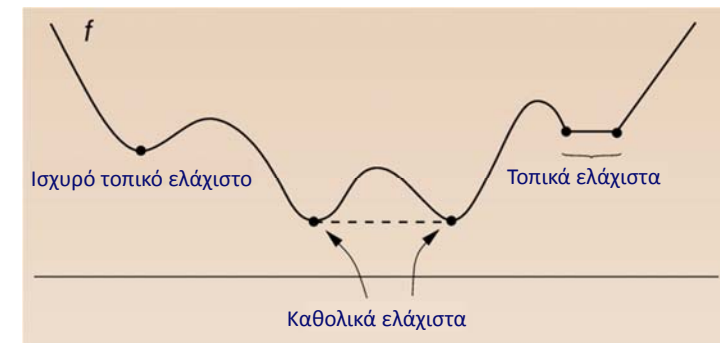
Σημείο x^* με την ιδιότητα $f(x^*) < f(x)$, $\forall x \in R$ τέτοιο ώστε $|x - x^*| < \varepsilon$ για οσοδήποτε μικρό ε



Ολικό ελάχιστο:

Σημείο x^* με την ιδιότητα $f(x^*) < f(x)$, $\forall x \in R$

Τι είναι ελάχιστο



Αναγκαίες και ικανές συνθήκες

Για μονοδιάστατη συνάρτηση (υπενθύμιση)

Αναγκαίες συνθήκες:

$$\text{Πρώτης τάξης: } f'(x^*) = 0$$

$$\text{Δεύτερης τάξης: } f''(x^*) \geq 0$$

Ικανές συνθήκες:

$$\text{Πρώτης τάξης: } f'(x^*) = 0$$

$$\text{Δεύτερης τάξης: } f''(x^*) > 0$$

Αναγκαίες και ικανές συνθήκες

Για πολυδιάστατη συνάρτηση

Αναγκαίες συνθήκες:

$$\text{Πρώτης τάξης: } \nabla f(x^*) = 0$$

$$\text{Δεύτερης τάξης: } s^T G(x^*) s \geq 0 \quad \forall s$$

Ικανές συνθήκες:

$$\text{Πρώτης τάξης: } \nabla f(x^*) = 0$$

$$\text{Δεύτερης τάξης: } s^T G(x^*) s > 0 \quad \forall s \neq 0$$

Η συνθήκη δεύτερης τάξης στην ανωτέρω μορφή δεν μπορεί να ελεγχθεί υπολογιστικά. Διατυπώνεται με ισοδύναμο τρόπο ώστε ο έλεγχός της να είναι υπολογιστικά εφικτός:

Ικανή συνθήκη δεύτερης τάξης:

Όλες οι ιδιοτιμές του πίνακα $G(x^*)$ είναι θετικές.

Υπενθύμιση: Πράξεις μεταξύ πινάκων και διανυσμάτων

$$\text{Αν έχουμε: } \mathbf{a} = \begin{bmatrix} \square \\ \square \\ \square \end{bmatrix} \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} \square \\ \square \\ \square \end{bmatrix} \quad \mathbf{A} = \begin{bmatrix} \square & \square & \square \\ \square & \square & \square \\ \square & \square & \square \end{bmatrix}$$

Πολλαπλασιασμός διανυσμάτων

$$\mathbf{a}^T \mathbf{b} = [\square \quad \square \quad \square] \begin{bmatrix} \square \\ \square \\ \square \end{bmatrix} = \text{αριθμός}$$

$$\mathbf{a} \mathbf{b}^T = \begin{bmatrix} \square \\ \square \\ \square \end{bmatrix} [\square \quad \square \quad \square] = \begin{bmatrix} \square & \square & \square \\ \square & \square & \square \\ \square & \square & \square \end{bmatrix} = \text{πίνακας}$$

Πολλαπλασιασμός πίνακα με διάνυσμα

$$\mathbf{A} \mathbf{b} = \begin{bmatrix} \square & \square & \square \\ \square & \square & \square \\ \square & \square & \square \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \square \\ \square \\ \square \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \square \\ \square \\ \square \end{bmatrix} = \text{διάνυσμα στήλη}$$

$$\mathbf{b}^T \mathbf{A} = [\square \quad \square \quad \square] \begin{bmatrix} \square & \square & \square \\ \square & \square & \square \\ \square & \square & \square \end{bmatrix} = [\square \quad \square \quad \square] = \text{διάνυσμα γραμμή}$$

Υπενθύμιση: Πράξεις μεταξύ πινάκων και διανυσμάτων

Ανάστροφοι αθροισμάτων

$$(\mathbf{a} + \mathbf{b})^T = \mathbf{a}^T + \mathbf{b}^T$$

$$(\mathbf{A} + \mathbf{B})^T = \mathbf{A}^T + \mathbf{B}^T$$

Ανάστροφοι γινομένων

$$(\mathbf{a}^T \mathbf{b})^T = \mathbf{b}^T \mathbf{a}$$

$$(\mathbf{A} \mathbf{B})^T = \mathbf{B}^T \mathbf{A}^T$$

$$(\mathbf{a}^T \mathbf{A} \mathbf{b})^T = \mathbf{b}^T \mathbf{A}^T \mathbf{a}$$

Πρώτες παράγωγοι

$$\nabla(\mathbf{a}^T \mathbf{x}) = \nabla(\mathbf{x}^T \mathbf{a}) = \mathbf{a}$$

Για συμμετρικό πίνακα \mathbf{A}

$$\nabla(\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x}) = 2\mathbf{A} \mathbf{x}$$

$$\nabla^2(\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x}) = 2\mathbf{A}$$

Ιδιοτιμές πίνακα

Θεωρήστε ένα πίνακα A με N γραμμές και N στήλες.

Πρόβλημα ιδιοτιμών

Να βρεθεί αριθμός λ και διάνυσμα \mathbf{w} που να ικανοποιεί την εξίσωση:

$$A\mathbf{w} = \lambda\mathbf{w}$$

Ο αριθμός λ λέγεται ιδιοτιμή του πίνακα.

Το διάνυσμα \mathbf{w} λέγεται ιδιοδιάνυσμα του πίνακα.

Ένας πίνακας $N \times N$ έχει N ιδιοτιμές και N ιδιοδιανύσματα

Ο πίνακας A λέγεται:

- **Θετικά ορισμένος** όταν όλες οι ιδιοτιμές λ_i είναι θετικές.
- **Αρνητικά ορισμένος** όταν όλες οι ιδιοτιμές λ_i είναι αρνητικές.

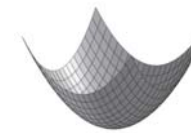
Στάσιμα σημεία

Τα σημεία της συνάρτησης που ικανοποιούν τη συνθήκη πρώτης τάξης

$$\nabla f(\mathbf{x}^*) = 0$$

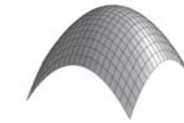
ονομάζονται **στάσιμα σημεία**.

Τύποι στάσιμων σημείων



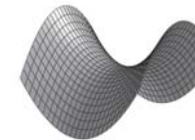
Ελάχιστο:

Όλες οι ιδιοτιμές του πίνακα G είναι θετικές



Μέγιστο:

Όλες οι ιδιοτιμές του πίνακα G είναι αρνητικές



Σαγματικό σημείο:

Κάποιες ιδιοτιμές του πίνακα G είναι θετικές και κάποιες αρνητικές.

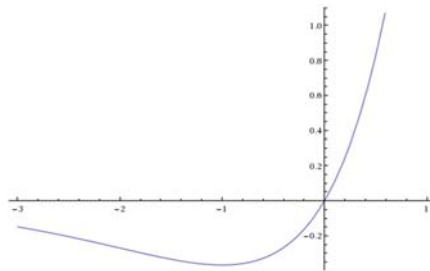
Παράδειγμα εύρεσης ελαχίστου (αναλυτικά) #1

Μονοδιάστατη συνάρτηση (υπενθύμιση)

Θεωρήστε τη συνάρτηση

$$f(x) = xe^x \quad x \in \mathbb{R}$$

Να βρεθεί το ελάχιστο x^* και η τιμή της συνάρτησης στο ελάχιστο $f^* = f(x^*)$



Παράδειγμα εύρεσης ελαχίστου (αναλυτικά) #1

$$f(x) = xe^x$$

Η πρώτη παράγωγος είναι:

$$f'(x) = e^x + xe^x$$

Βρίσκουμε το σημείο που μηδενίζεται η πρώτη παράγωγος:

$$f'(x) = 0 \Rightarrow$$

$$e^x + xe^x = 0 \Rightarrow$$

$$e^x(1+x) = 0 \Rightarrow$$

$$1+x = 0 \Rightarrow$$

$$x = -1$$

Παρατήρηση: πρέπει να λύσουμε μια μη γραμμική εξίσωση.

Η δεύτερη παράγωγος είναι:

$$f''(x) = e^x + e^x + xe^x = e^x(x+2)$$

Η δεύτερη παράγωγος στο ελάχιστο είναι:

$$f''(-1) =$$

$$e^{-1}(-1+2) =$$

$$\frac{1}{e} > 0$$

Συνεπώς στο σημείο $x = -1$ έχουμε ελάχιστο.

Η τιμή της συνάρτησης στο ελάχιστο είναι:

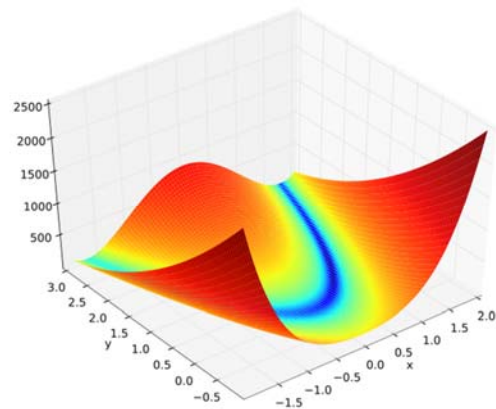
$$f^* = f(-1) = -e^{-1} = -\frac{1}{e} \approx -0.37$$

Παράδειγμα εύρεσης ελαχίστου (αναλυτικά) #2

Διδιάστατη συνάρτηση

Βρείτε το ελάχιστο της συνάρτησης Rosenbrock:

$$f(x, y) = 100(y - x^2)^2 + (1 - x)^2$$



Παράδειγμα εύρεσης ελαχίστου (αναλυτικά) #2

$$f(x, y) = 100(y - x^2)^2 + (1 - x)^2$$

Οι πρώτες παράγωγοι είναι:

$$\frac{\partial f}{\partial x} = -400x(y - x^2) - 2(1 - x)$$

$$\frac{\partial f}{\partial y} = 200(y - x^2)$$

Πρέπει να βρούμε το σημείο x, y που μηδενίζονται οι πρώτες παράγωγοι:

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial f}{\partial y} &= 0 \end{aligned} \right\} \Rightarrow$$

$$-400x(y - x^2) - 2(1 - x) = 0 \quad (1)$$

$$200(y - x^2) = 0 \quad (2)$$

Πρέπει να λύσουμε ένα μη γραμμικό σύστημα 2 εξισώσεων με 2 αγνώστους.

$$(2) \Rightarrow (y - x^2) = 0$$

Αντικαθιστώ στην (1)

$$2(1 - x) = 0 \Rightarrow$$

$$x = 1$$

Αντικαθιστώ το $x = 1$ στην (2)

$$200(y - 1^2) = 0 \Rightarrow$$

$$y = 1$$

Για $x = 1, y = 1$ έχουμε στάσιμο σημείο.

Παράδειγμα εύρεσης ελαχίστου (αναλυτικά) #2

Υπολογίζουμε τον πίνακα των δευτέρων παραγώγων:

$$\mathbf{G}(x, y) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x} & \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \end{bmatrix}$$

Βρήκαμε τις πρώτες παραγώγους:

$$\frac{\partial f}{\partial x} = -400x(y - x^2) - 2(1 - x)$$

$$\frac{\partial f}{\partial y} = 200(y - x^2)$$

Τα στοιχεία του πίνακα \mathbf{G} είναι:

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = -400(y - 3x^2) + 2$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial y^2} = 200$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} = -400x$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x} = -400x$$

Στο σημείο $x = 1, y = 1$ ο πίνακας είναι:

$$\mathbf{G}(1, 1) = \begin{bmatrix} 802 & -400 \\ -400 & 200 \end{bmatrix}$$

Πρέπει να εξετάσουμε τις ιδιοτιμές του πίνακα \mathbf{G} για να διαπιστώσουμε αν έχουμε ελάχιστο.

Παράδειγμα εύρεσης ελαχίστου (αναλυτικά) #2

Βρίσκουμε τις ιδιοτιμές του πίνακα των δευτέρων παραγώγων:

$$\mathbf{G}\mathbf{w} = \lambda\mathbf{w} \Rightarrow$$

$$\mathbf{G}\mathbf{w} - \lambda\mathbf{w}\mathbf{I} = 0 \Rightarrow$$

$$(\mathbf{G} - \lambda\mathbf{I})\mathbf{w} = 0 \Rightarrow$$

$$\left(\begin{bmatrix} 802 & -400 \\ -400 & 200 \end{bmatrix} - \lambda \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \right) \mathbf{w} = 0 \Rightarrow$$

$$\begin{bmatrix} 802 - \lambda & -400 \\ -400 & 200 - \lambda \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = 0 \Rightarrow$$

$$\begin{cases} (802 - \lambda)x - 400y = 0 \\ -400x + (200 - \lambda)y = 0 \end{cases}$$

Ομογενές γραμμικό σύστημα 2 εξισώσεων με 2 αγνώστους

Για να έχει λύση πρέπει η ορίζουσα των συντελεστών να είναι ίση με μηδέν

$$\begin{vmatrix} 802 - \lambda & -400 \\ -400 & 200 - \lambda \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow$$

$$(802 - \lambda)(200 - \lambda) - 160000 = 0 \Rightarrow$$

$$\lambda^2 - 1002\lambda + 400 = 0 \Rightarrow$$

$$\begin{cases} \lambda_1 \approx 0.3994 \\ \lambda_2 \approx 1001.6 \end{cases}$$

Οι ιδιοτιμές είναι θετικές, οπότε το σημείο $x = 1, y = 1$ είναι ελάχιστο.