Bölüm 5

Optimizasyonun Teorisi ve Matematiksel Kavramlar

Amaç fonksiyon

(1) F fonksiyonun sürekliliği

(2) İç Bükey, Dış Dükey

(3) Durağan noktalar (gerekli koşul)

(4) ikinci dereceden polinom yada doğrusal polinom

$$\frac{\partial f}{\partial X_i} = 0$$

(5) Yeterli koşul (min)

$$\frac{d^2 f}{dX^2} > 0 \qquad \underline{\underline{H}} \text{ hesien matrisi tanıtan}$$

$$\text{tüm öz değeğerle } \underline{\underline{\mathrm{H}}} > 0$$

Fonksiyonlarda süreklilik

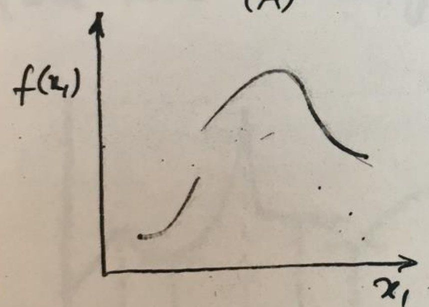
Tek bir değişkenli fonksiyonun şu koşullarda sürekli sayılır.

(i) $f(x_0)$ varsa

(ii) $\lim_{x \to x_0} f(x)$ varsa

(iii) $\lim_{x \to x_0} f(x) = f(x_0)$

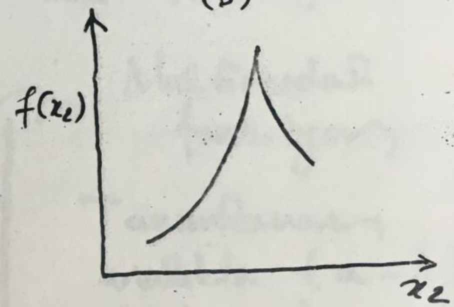
(A)



- Sürekli değil

⇒ Opt. aranırken süreksizliğe rastlanabilir !

(B)



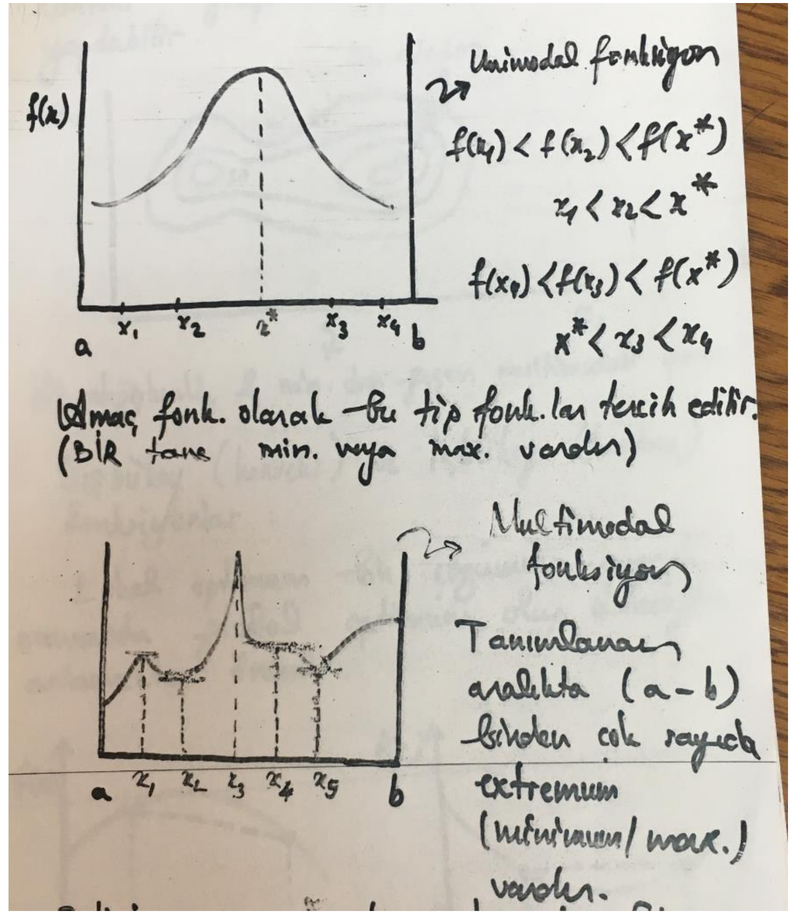
- Sürekli, ama
- Sürekli diferansiyellenemez

$\frac{df(x)}{dx}$ sürekli değil

⇒ Opt. aranırken türev kullanılmamalı...
Süreksizlik noktasında küçük Δx için büyük sorun. (Bu noktanın iki tarafında türevin değerleri çok farklı)

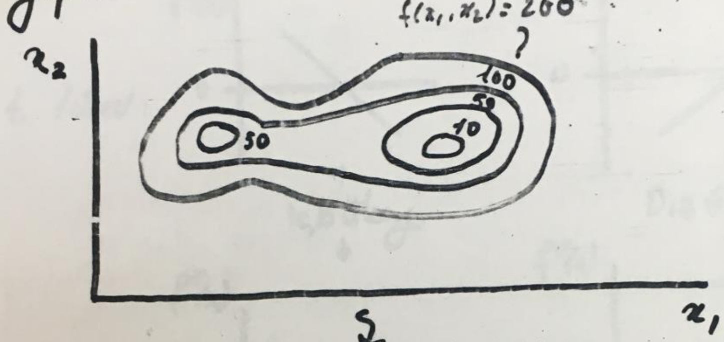
[1] Edgar T.F., Himmelblau D.M.,. Lasdon L.S. Optimization of chemical processes New York: McGraw-Hill, 2001

Multimodel foksiyonlar:



[1] Edgar T.F., Himmelblau D.M.,. Lasdon L.S. Optimization of chemical processes New York: McGraw-Hill, 2001

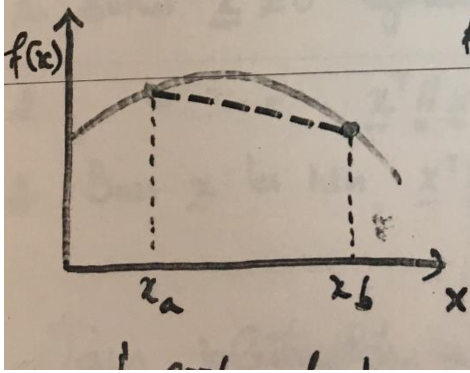
Çok değişkenli fonksiyonlarda ...
“contour” grafikleri çizmek suretiyle yapılabilir.

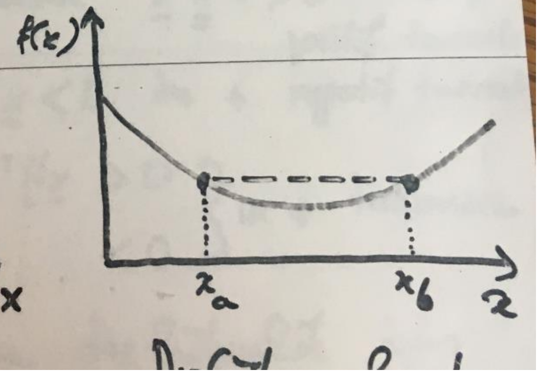


İki değişkenli, 2 min.'dan geçen multimodal fonk.

Dışbükey (konveks) ve İçbükey (konkav) fonksiyonlar :

Lokal optimum bir çözümün aynı zamanda global optimum olup olmadığını anlamakta önemli.



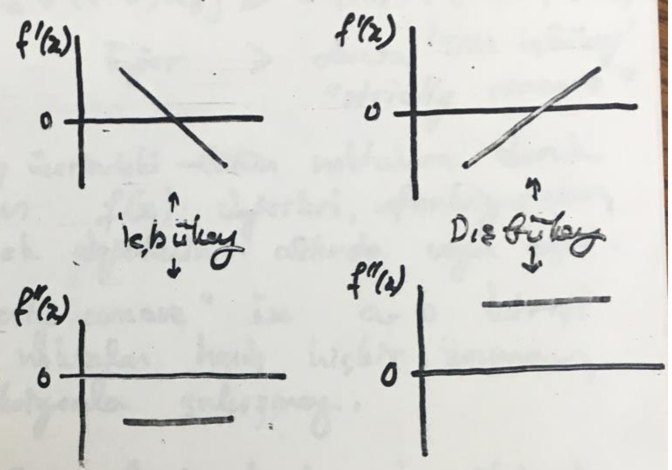


[1] Edgar T.F., Himmelblau D.M.,. Lasdon L.S. Optimization of chemical processes New York: McGraw-Hill, 2001

Quadratic bir fonksiyonun 1. ve 2. türevleri

1. türev:

2. türev:



Çok değişkenli fonksiyonlarda $f(x)$'in özellikleri Hessian matrisiyle anlaşılır.

Matrislerin bazı özelliklerine göre;

1. Bütün $\underline{x} \neq 0$ değerlerinde $\underline{x}^T \underline{\underline{H}} x > 0$ ise ⇒ pozitif tanım

2. " " $\underline{x}^T \underline{\underline{H}} \underline{x} < 0$ ise ⇒ negatif tanı

3. Bazı $\underline{x}$'ler için $\underline{x}^T \underline{\underline{H}} \underline{x} > 0$
   " " " < 0 } ise ⇒ tanımsı

Tam içbükeylik ve dışbükeylik için Hessian'da şu koşullar aranır:

[1] Edgar T.F., Himmelblau D.M.,. Lasdon L.S. Optimization of chemical processes New York: McGraw-Hill, 2001

İçbükeylik şartı :

$$f[\theta x_a + (1-\theta)x_b] \geq \theta f(x_a) + (1-\theta) f(x_b)$$

Eğer $>$ olursa 'TAM içbükey' "strictly concave"

⇒ Kiriş üzerindeki bütün noktalara denk gelen $f(x)$ değerleri, fonksiyonun gerçek değerlerinin altında veya eşit.

"Strictly concave" ise a-b kirişi uç noktalar hariç hiçbir zaman fonksiyonla çakışmaz.

İçbükeyliği test etmek için ikinci türevden yararlanılır.

Hessian matrisi $\underline{\underline{H}}(\underline{x}) = \nabla^2 f(\underline{x})$

Örneğin; $f(\underline{x}) = h_{11} x_1^2 + h_{12} x_1 x_2 + h_{22} x_2^2$

$$\underline{\underline{H}}(\underline{x}) = \nabla^2 f(x) = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1^2} & \dfrac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1 \partial x_2} \\[2ex] \dfrac{\partial^2 f(x)}{\partial x_2 \partial x_1} & \dfrac{\partial^2 f(x)}{\partial x_2^2} \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} 2h_{11} & h_{12} \\ \ldots & \ldots \end{bmatrix}$$

[1] Edgar T.F., Himmelblau D.M.,. Lasdon L.S. Optimization of chemical processes New York: McGraw-Hill, 2001

Tam içbükeylik koşulu (iki alternatif)

(i) $\underline{\underline{H}}(x)$ 'in ~~bütün~~ bütün özdeğerleri negatif (eigenvalues)

veya

(ii) Bütün köşegen elemanları negatif ve

$$\left.\begin{array}{l} \det(\underline{\underline{H}}) > 0 \\ \det\{M_i(\underline{\underline{H}})\} > 0 \end{array}\right\} \quad i = 2, 4, 6, \ldots$$

$$\left.\begin{array}{l} \det(\underline{\underline{H}}) < 0 \\ \det\{M_i(\underline{\underline{H}})\} < 0 \end{array}\right\} \quad i = 1, 3, 5, \ldots$$

Tam dışbükeylik koşulu (iki alternatif)

(i) $\underline{\underline{H}}(x)$ 'in bütün özdeğerleri pozitif

veya

(ii) Bütün köşegen elemanları pozitif ve

$$\det(\underline{\underline{H}}) > 0$$

$$\det\{M_i(\underline{\underline{H}})\} > 0$$

M_i : i yinci mertebeden "principal minor submatrix"

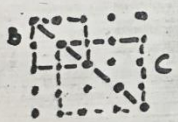
$f(x)$ ve $H(x)$ arasındaki ilişki tablosu

$f(x)$	$H(x)$	$H(x)$'in özdeğerleri	"Leading principal minors", $H^*(\Delta_i)$
Tam dışbükey	Pozitif tanımlı	>0	$\Delta_1 > 0,\ \Delta_2 > 0, \ldots$
Dışbükey	Pozitif yarı-tanımlı	≥ 0	$\Delta_1 \geq 0,\ \Delta_2 \geq 0, \ldots$
İçbükey	Negatif yarı-tanımlı	≤ 0	$\Delta_1 \leq 0,\ \Delta_2 \geq 0,\ \Delta_3 \leq 0$ (≤ ve ≥ işaretleri sırayla
Tam içbükey	Negatif tanımlı	<0	$\Delta_1 < 0,\ \Delta_2 > 0,\ \Delta_3 < 0$ (< ve > işaretleri sırayla

[1] Edgar T.F., Himmelblau D.M.,. Lasdon L.S. Optimization of chemical processes New York: McGraw-Hill, 2001

MATRİSLER Hk. Hatırlatma:

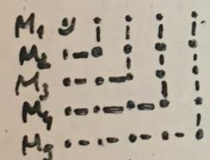
- "Principal submatrix": Bir kare A matrisinin köşegeninin bir kısmını köşegen olarak alan herhangi bir kare alt matris (M)



B : 3. mertebe alt matris
C : 4. " " "
(Yeni A ile köşegenlerin ortaklığına dikkat ediniz!)

Eğer bu alt matrisler sol üst köşeden 1. mertebe diye başlayıp 2, 3, 4 ... mertebelerde aşağı doğru inerlerse: "leading principal submatrix" olur.

- Bu alt matrislerin determinantı: "MINOR"



det M_1, M_2, M_3, M_4, M_5
1. 2. 3. 4. 5. mertebeden "leading principal minor" olur.

- Özdeğerler: A bir kare matris olsun.

$$\underline{\underline{A}}\,\underline{X} = \lambda \underline{X}$$ (λ parametre)

$\Rightarrow (A-\lambda I)X = 0$ yazılabilir.

A matrisinin Karakteristik denklemi: $|A-\lambda I| = 0$

Bunun kökleri $\lambda_{1,2,\ldots,n} \Rightarrow$ özdeğerler (eigenvalues)

[1] Edgar T.F., Himmelblau D.M.,. Lasdon L.S. Optimization of chemical processes New York: McGraw-Hill, 2001

Örnek

- **Bir reaktörde organik bir bileşikten Q ürünü ısıtma ile C katkısının (mol kesri x) varlığında üretiliyor. C katkısı reactöre enjekte edilirken, buhar reaktör içersindeki serpartinlerden ısıtma amacıyla gönderilmektedir. C katkısı olmadanda Q dönüşümü elde edilmek mümkündür. Ürün ,Q, satış fiyatı lb mol besleme başına 50$ dır. 1 mol besleme başına katkı maddesinin fiyatı mol kesrine bağlı olarak Eşitlik 1 ile verilmiştir. Buharın fiyatı eşitlik 2 ile verilmiştir. 1 lb mol besleme başına elde edilen ürünün lb mol miktarı 3 eşitliği ile verilmektedir.**

- **$2+10x+20x^2$ Eş(1)**
- **$2+0.003*S+2*10^{-6}S^2$ (S=lb mol buhar/lb mol besleme) Eş(2)**
- **$0.1+0.3x+0.001S+0.0001x*S$ Eq(3)**

Kar a dayanan amaç fonksiyonunu (x ve S ye bağlı) tanımlayınız.

Maksimum karı hesaplayınız, Sonuçu yorumlayınız

Amaç fonksiyonu iç bükeymi dış bükeymi

Temel: 1 mol besleme:

yp=0.1+0.3 x+0.001S+0.0001 x*S

yp=lbmol ürün/lb mol besleme

Gelir : 50(0.1+0.3 x_A+0.001S+0.0001 x_{A*}S) $=5 +15 x_A +0.05S+0.005 x_{A*}S

Harcamalar:
Katkı : 2+10 x_A + 20$x_A{}^2$
Buhar: 2+0.003S+2*$10^{-6}$$S^2$
Amaç fonksiyon: 1+5x -20x ^{2} +0.047S-2*$10^{-6}$$S^2$+0.005 x_*S

$$\nabla f = \begin{bmatrix} 5 - 40x + 0.005S \\ 0.047 - 4*10^{-6}S + 0.005x \end{bmatrix}$$

$$\nabla^2 f = \nabla f = \begin{bmatrix} -40 & 0.005 \\ 0.005 & -4*10^{-6} \end{bmatrix}$$

H negatife tanımlı dış bükey concave, maksimum noktalar