Hesse-Matrix

Die quadratische Taylor-Approximation einer Funktion $f : \mathbb{R}^n \supseteq D \to \mathbb{R}$ in einem Punkt $a = (a_1, \ldots, a_n)^\mathrm{t} \in D$ lässt sich in der Form

$$\begin{aligned} f(x_1, \ldots, x_n) &= f(a) + (\operatorname{grad} f(a))^\mathrm{t}\,(x-a) \\ &\qquad + \frac{1}{2}(x-a)^t \,\mathrm{H}\, f(a)(x-a) + O(|(x-a)|^3) \end{aligned}$$

schreiben, wobei $\operatorname{grad} f(a) = (\partial_1 f(a), \ldots, \partial_n f(a))^\mathrm{t}$ der Gradient im Punkt a ist und die symmetrische Hesse-Matrix

$$\mathrm{H}\, f(a) = \begin{pmatrix} \partial_1\partial_1 f(a) & \cdots & \partial_1\partial_n f(a) \\ \vdots & & \vdots \\ \partial_n\partial_1 f(a) & \cdots & \partial_n\partial_n f(a) \end{pmatrix}$$

die zweiten Ableitungen enthält.

Bei zwei oder drei Veränderlichen werden die Variablen meist mit (x, y) bzw. (x, y, z) bezeichnet. In dieser Notatation hat der quadratische Term der Taylor-Approximation für eine bivariate Funktion im Punkt (x_0, y_0) die Form

$$\frac{1}{2}(x - x_0, y - y_0) \underbrace{\begin{pmatrix} f_{xx}(x_0, y_0) & f_{xy}(x_0, y_0) \\ f_{yx}(x_0, y_0) & f_{yy}(x_0, y_0) \end{pmatrix}}_{Hf(x_0,y_0)} \begin{pmatrix} x - x_0 \\ y - y_0 \end{pmatrix} .$$

Beweis

Umschreiben der quadratischen Terme der Taylor-Approximation für eine bivariate Funktion ($n = 2$) $\quad \rightsquigarrow$

$$
\begin{aligned}
f(x,y) &= f + f_x\,(x-x_0) + f_y\,(y-y_0) \\
&\quad + \frac{1}{2!}\,\left(f_{xx}\,(x-x_0)^2 + 2f_{xy}\,(x-x_0)(y-y_0) + f_{yy}\,(y-y_0)^2\right) \\
&\quad + R \\
&= f + f_x\,(x-x_0) + f_y\,(y-y_0) \\
&\quad + \frac{1}{2}(x-x_0, y-y_0)\begin{pmatrix} f_{xx} & f_{xy} \\ f_{xy} & f_{yy} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x-x_0 \\ y-y_0 \end{pmatrix} + R\,,
\end{aligned}
$$

wobei f und sämtliche partiellen Ableitungen im Punkt (x_0, y_0) ausgewertet werden

analoger Beweis im allgemeinen Fall ($n \geq 2$)

Beispiel

Quadratisches Taylor-Polynom der Funktion

$$f(x,y) = \ln(x + 1/y)$$

im Punkt $(0,1)$

partielle Ableitungen

$$f_x = \frac{1}{x+1/y}, \quad f_y = \frac{1}{x+1/y}\left(-\frac{1}{y^2}\right) = -\frac{1}{xy^2+y},$$
$$f_{xx} = -\frac{1}{(x+1/y)^2}, \quad f_{xy} = \frac{1}{(xy+1)^2}, \quad f_{yy} = \frac{2xy+1}{(xy^2+y)^2}$$

Gradient und Hesse-Matrix im Punkt $(0,1)$:

$$\operatorname{grad} f(0,1) = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad \mathrm{H}\, f(0,1) = \left.\begin{pmatrix} f_{xx} & f_{xy} \\ f_{yx} & f_{yy} \end{pmatrix}\right|_{(0,1)} = \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

$\rightsquigarrow$ quadratische Taylor-Approximation im Punkt $(0,1)$

$$\begin{aligned} p(x,y) &= (1,-1)\begin{pmatrix} x \\ y-1 \end{pmatrix} \\ &\qquad +\frac{1}{2}(x,y-1)\begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y-1 \end{pmatrix} \\ &= x-y+1+\frac{1}{2}(-x^2+2x(y-1)+(y-1)^2) \end{aligned}$$

Fehler der Approximation für $(x,y)=(0.1,0.9)$
exakter Wert:

$$f(0.1,0.9)=\ln(0.1+1/0.9)=0.1915\ldots$$

Näherung:

$$p(0.1,0.9)=0.1-0.9+1+\frac{1}{2}\left(-0.1^2+2(0.1)(-0.1)+(-0.1)^2\right)=0.19$$

Beispiel

Quadratische Taylor-Approximation von

$$f(x, y, z) = (xy)^z$$

im Punkt $(1, 1, 1)$

Regeln für die Differentiation von Potenzen,

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(at)^b = ab(at)^{b-1}, \quad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}a^t = \ln a\, a^t$$

$\rightsquigarrow$ partielle Ableitungen

$$\begin{aligned}
&f_x = yz(xy)^{z-1}, \quad f_z = \ln(xy)(xy)^z, \\
&f_{xx} = y^2z(z-1)(xy)^{z-2}, \quad f_{zz} = (\ln(xy))^2(xy)^z, \\
&f_{xy} = z(xy)^{z-1} + xyz(z-1)(xy)^{z-2}, \quad f_{xz} = y(xy)^{z-1} + yz\ln(xy)(xy)^{z-1}
\end{aligned}$$

Vertauschen der Variablen $\rightsquigarrow$

$$f_y = xz(xy)^{z-1}, \quad f_{yy} = x^2z(z-1)(xy)^{z-2}, \quad f_{yz} = x(xy)^{z-1} + xz\ln(xy)(xy)^{z-}$$

Gradient und Hesse-Matrix

$$\begin{aligned}
\operatorname{grad} f(1,1,1) &= (1,1,0)^{\mathrm{t}} \\
\mathrm{H}\, f(1,1,1) &= \left.\begin{pmatrix} f_{xx} & f_{xy} & f_{xz} \\ f_{yx} & f_{yy} & f_{yz} \\ f_{zx} & f_{zy} & f_{zz} \end{pmatrix}\right|_{(1,1,1)} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

$\rightsquigarrow$ quadratische Taylor-Approximation im Punkt $(1,1,1)$

$$\begin{aligned}
p(x,y,z) &= 1 + (1,1,0)\begin{pmatrix} x-1 \\ y-1 \\ z-1 \end{pmatrix} \\
&\qquad + \frac{1}{2}(x-1, y-1, z-1)\begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x-1 \\ y-1 \\ z-1 \end{pmatrix} \\
&= 1 + (x-1) + (y-1) \\
&\qquad + (x-1)(y-1) + (x-1)(z-1) + (y-1)(z-1)
\end{aligned}$$