MS-A0207 Differentiaali- ja integraalilaskenta 2 (Chem)
Esimerkkejä ym., osa II

G. Gripenberg

Aalto-yliopisto

9. helmikuuta 2016

💡: Esimerkki: Implisiittinen lineaarinen approksimointi

Funktio $z = z(x, y)$ *määräytyy yhtälöstä* $xz + y^2z^2 + (x + y)z^3 = 4$ *siten, että* $z(-1, -1) = -1$. *Jos nyt* $|y + 1| \le 0.003$ *niin meidän pitää määrittää (implisiittistä derivointia käyttäen) approksimatiivinen yläraja lausekkeelle* $|x + 1|$ *siten, että lineaarisella approksimoinnilla saamme tulokseksi* $|z(x, y) + 1| \le 0.003$.
Merkitään $f(x, y, z) = xz + y^2z^2 + (x + y)z^3 - 4$. *Nyt* $f(-1, -1, -1) = 1 + 1 + (-2)(-1) - 4 = 0$ *ja jos* $z = z(x, y)$ *niin määritelmän mukaan* $f(x, y, z) = 0$ *joten lineaarinen approksimaatio antaa*

$$\begin{aligned} 0 = f(x, y, z) - f(-1, -1, -1) &\approx f_x(-1, -1, -1)(x - (-1)) \\ &\quad + f_y(-1, -1, -1)(y - (-1)) + f_z(-1, -1, -1)(z - (-1)), \end{aligned}$$

eli

$$f_z(-1, -1, -1)(z + 1) \approx -f_x(-1, -1, -1)(x + 1) - f_y(-1, -1, -1)(y + 1).$$

💡: Esimerkki: Implisiittinen lineaarinen approksimointi, jatk.

Nyt

$$\begin{aligned} f_x(x, y, z) &= z + z^3, & \Rightarrow \quad & f_x(-1, -1, -1) = -2, \\ f_y(x, y, z) &= 2yz^2 + z^3 & \Rightarrow \quad & f_y(-1, -1, -1) = -3, \\ f_z(x, y, z) &= x + 2y^2z + 3(x + y)z^2 & \Rightarrow \quad & f_z(-1, -1, -1) = -9. \end{aligned}$$

Tästä seuraa, että

$$9|z(x, y) + 1| \lesssim 2|x + 1| + 3|y + 1| \quad \textit{eli} \quad |z(x, y) + 1| \lesssim \tfrac{2}{9}|x + 1| + \tfrac{1}{3}|y + 1|$$

Jos nyt haluamme, että $|z(x, y) + 1| \le 0.003$ *niin on meidän pitää, koska* $|y + 1| \le 0.003$, *vaatia, että*

$$\tfrac{2}{9}|x + 1| + \tfrac{1}{3} \cdot 0.003 \le 0.003,$$

josta seuraa, että

$$|x + 1| \le \tfrac{9}{2}\left(0.003 - \tfrac{1}{3} \cdot 0.003\right) = 0.009.$$

Eulerin ketjusääntö

Oleta, että funktio F on sellainen, että yhtälöstä $F(x, y, z) = 0$ voimme ratkaista x muuttujien y ja z funktiona, eli $x = x(y, z)$ mutta myös y muuttujien x ja z funktiona, eli $y = y(x, z)$ sekä z muuttujien x ja y funktiona, eli $z = z(x, y)$.
Jos $x = x(y, z)$ niin saamme kun derivoimme yhtälön $F(x(y, z), y, z) = 0$ molemmat puolet muutujan y suhteen

$$F_x(x(y, z), y, z)\frac{\partial x(y, z)}{\partial y} + F_y(x(y, z), y, z) = 0.$$

Tästä seuraa, että kun kirjoitamme $x(y, z)$:n sijasta x niin

$$\frac{\partial x(y, z)}{\partial y} = -\frac{F_y(x, y, z)}{F_x(x, y, z)}.$$

Samanlaisilla laskuilla saamme

$$\frac{\partial y(x, z)}{\partial z} = -\frac{F_z(x, y, z)}{F_y(x, y, z)},$$

Eulerin ketjusääntö, jatk.

ja

$$\frac{\partial z(x, y)}{\partial x} = -\frac{F_x(x, y, z)}{F_z(x, y, z)}.$$

Tästä seuraa nyt, että

$$\frac{\partial x(y, z)}{\partial y}\frac{\partial y(x, z)}{\partial z}\frac{\partial z(x, y)}{\partial x} = (-1)^3\frac{F_y(x, y, z)}{F_x(x, y, z)}\frac{F_z(x, y, z)}{F_y(x, y, z)}\frac{F_x(x, y, z)}{F_z(x, y, z)} = -1.$$

Toisella tavalla esitettynä tämä kaava on

$$\left(\frac{\partial x}{\partial y}\right)_z \left(\frac{\partial y}{\partial z}\right)_x \left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)_y = -1.$$

Esimerkki: Implisiittinen lineaarinen approksimointi

Karttapaperi on venynyt niin, että origosta pisteestä (x, y) kulkevan janan pituus on kasvanut 2 % ja ja tämän janan ja x-akselin välinen kulma, joka alunperin oli 45°, on pienentynyt 1 %. Nyt meidän pitää laskea paljonko paperi on venynyt x-akselin suunnassa ja paljonko y-akselin suunnassa. Jos janan pituus on L ja kulma on φ niin pätee tietenkin

$$L = \sqrt{x^2 + y^2},$$
$$\varphi = \arctan\left(\frac{y}{x}\right).$$

Jos merkitsemme $\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}$ *ja* $\mathbf{u} = \begin{bmatrix} L \\ \varphi \end{bmatrix}$, *niin voimme kirjoitta nämä yhtälöt muodossa*

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = \begin{bmatrix} \sqrt{x^2 + y^2} - L \\ \arctan(\frac{y}{x}) - \varphi \end{bmatrix} = \mathbf{0} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Esimerkki: Implisiittinen lineaarinen approksimointi, jatk.

Kun karttapaperi muuttuu niin x ja y muuttuvat pisteiksi $x + \Delta x$ ja $y + \Delta y$ ja etäisyydeksi sekä kulmaksi tulee $L + \Delta L$ ja $\varphi + \Delta\varphi$ jolloin yhtälöksi tulee

$$\mathbf{f}(\mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}, \mathbf{u} + \Delta\mathbf{u}) = \mathbf{0}.$$

Lineaarisella approksimoinnilla saamme nyt

$$\mathbf{0} = \mathbf{f}(\mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}, \mathbf{u} + \Delta\mathbf{u}) - \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{u}) \approx \mathbf{f}_\mathbf{x}(\mathbf{x}, \mathbf{u})\Delta\mathbf{x} + \mathbf{f}_\mathbf{u}(\mathbf{x}, \mathbf{u})\Delta\mathbf{u}.$$

Yksinkertaisella laskulla toteamme, että

$$\mathbf{f}_\mathbf{x}(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = \begin{bmatrix} \frac{x}{\sqrt{x^2+y^2}} & \frac{y}{\sqrt{x^2+y^2}} \\ -\frac{y}{x^2+y^2} & \frac{x}{x^2+y^2} \end{bmatrix} \quad \textit{ja} \quad \mathbf{f}_\mathbf{u}(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix},$$

jolloin yhtälösysteemiksi tulee

$$\begin{bmatrix} \frac{x}{\sqrt{x^2+y^2}} & \frac{y}{\sqrt{x^2+y^2}} \\ -\frac{y}{x^2+y^2} & \frac{x}{x^2+y^2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta x \\ \Delta y \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} \Delta L \\ \Delta\varphi \end{bmatrix}.$$

Esimerkki: Implisiittinen lineaarinen approksimointi, jatk.

Koska

$$\mathbf{f_x}(\mathbf{x},\mathbf{u})^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{x}{\sqrt{x^2+y^2}} & \frac{y}{\sqrt{x^2+y^2}} \\ -\frac{y}{x^2+y^2} & \frac{x}{x^2+y^2} \end{bmatrix}^{-1} = \sqrt{x^2+y^2}\begin{bmatrix} \frac{x}{x^2+y^2} & -\frac{y}{\sqrt{x^2+y^2}} \\ \frac{y}{x^2+y^2} & \frac{x}{\sqrt{x^2+y^2}} \end{bmatrix}.$$

niin

$$\begin{bmatrix} \Delta x \\ \Delta y \end{bmatrix} = \sqrt{x^2+y^2}\begin{bmatrix} \frac{x}{x^2+y^2} & -\frac{y}{\sqrt{x^2+y^2}} \\ \frac{y}{x^2+y^2} & \frac{x}{\sqrt{x^2+y^2}} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \Delta L \\ \Delta\varphi \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{x}{\sqrt{x^2+y^2}}\Delta L - y\Delta\varphi \\ \frac{y}{\sqrt{x^2+y^2}}\Delta L + x\Delta\varphi \end{bmatrix}$$

Oletuksen mukaan $\Delta L = 0.02L = 0.02\sqrt{x^2+y^2}$ *ja* $\Delta\varphi = -0.01\varphi = -0.01\arctan(\frac{y}{x})$ *jolloin*

$$\frac{\Delta x}{x} \approx 0.02 + 0.01\cdot\frac{y}{x}\varphi,$$
$$\frac{\Delta y}{y} \approx 0.02 - 0.01\cdot\frac{x}{y}\varphi.$$

Esimerkki: Implisiittinen lineaarinen approksimointi, jatk.

Koska oletimme, että $\varphi = \frac{\pi}{4}$ *niin* $\frac{y}{x} = 1$ *ja saamme*

$$\frac{\Delta x}{x} \approx \frac{2}{100} + \frac{\pi}{400} \approx 0.028,$$
$$\frac{\Delta y}{y} \approx \frac{2}{100} - \frac{\pi}{400} \approx -0.012$$

Paperi on siis venynyt noin 2.8% x-akselin suunnassa ja kutistunut 1.2% y-akselin suunnassa.

Esimerkki: Ääriarvo

Jos meidän pitää määrittää funktion $f(x,y) = -2x^4 - e^{4y} + 4x^2e^y$ *paikalliset ääriarvot niin laskemme ensin funktion derivaatan joka on* $f'(x,y) = [-8x^3 + 8xe^y, -4e^{4y} + 4x^2e^y]$. *Tämä derivaatta eli gradientti on nollavektori kun*

$$\begin{aligned} -8x^3 + 8xe^y &= 0, \\ -4e^{4y} + 4x^2e^y &= 0. \end{aligned}$$

Jos $x = 0$ *niin* $-4e^{4y} + 4x^2e^y = -4e^{4y} < 0$ *joten* $x \neq 0$ *ja ensimmäisestä yhtälöstä seuraa, että* $e^y = x^2$ *jolloin jälkimmäisestä seuraa, että* $x^8 = x^4$ *eli* $x = \pm 1$ *koska* x *on reaalinen ja* $\neq 0$. *Silloin* $e^y = 1$ *eli* $y = 0$ *ja kriittiset piseet ovat* $(\pm 1, 0)$.
Näiden kriittisten pisteiden luonteen selvittämiseksi meidän pitää laskea funktion toinen derivaatta ja se on

$$f''(x,y) = \begin{bmatrix} (-24x^2 + 8e^y) & 8xe^y \\ 8xe^y & (-16e^{4y} + 4x^2e^y) \end{bmatrix}.$$

Esimerkki, jatk.

Näin ollen $f''(\pm 1, 0) = \begin{bmatrix} -16 & \pm 8 \\ \pm 8 & -12 \end{bmatrix}$. *Näiden matriisien determinantti on* $(-16) \cdot (-12) - 64 = 128 > 0$ *joten ominaisarvot ovat samanmerkkiset ja koska lävistäjäalkiot ovat negatiiviset niin ominaisarvotkin ovat negatiiviset ja* $(1,0)$ *ja* $(-1,0)$ *ovat kaksi paikallista maksimipistettä.* *Yhden muuttujan derivoituvalla funktiolla ei voi olla täsmälleen kaksi kriittistä pistettä, jotka molemmat ovat maksimipisteitä.*

- *Funktio* $f(x,y) = -2x^4 - e^{4y} + 4x^2e^y$ *ei saavuta pienintä arvoa joukossa* $\mathbb{R}^2$ *koska* $\lim_{x\to\infty} f(x,0) \lim_{x\to\infty}(-2x^4 - 1 + 4x^2) = -\infty$.
- *Suurin arvo 1 saavutetaan pisteissä* $(\pm 1, 0)$ *ja tämän osoittamiseksi riittää osoittaa (mikä tässä nyt jää tekemättä), että* $f(x,y) < \frac{1}{3}$ *kun* $(x,y) \notin \Omega = \{\, (x,y) : |x| < 3, |y| < \ln(3) \,\}$. *Tämä seuraa siitä, että funktio saavuttaa suurimman arvonsa suljetussa joukossa* $\Omega \cup \partial\Omega$ *mutta jos pystymme osoittamaan että suurin arvo joukon* Ω *ulkopuolella (mukaanlukien reuna) on korkeintaan* $\frac{1}{3}$ *niin suurin arvo joukossa* Ω *ja samoin joukossa* $\mathbb{R}^2$ *saavutetaan jossain kriittisessä pisteessä, eli pisteissä* $(\pm 1, 0)$ *missä funktion arvo on* 1.

Esimerkki: Suurin ja pienin arvo

Jos meidän pitää määrittää funktion $f(x,y) = x^2 + y^2 - 4x - 2y + 7$ *suurin ja pienin arvo joukossa* $\Omega = \{ (x,y) : x \geq 0, y \geq 0, x+y \leq 5 \}$ *niin laskemme ensin gradientin* $\nabla f = (2x-4)\mathbf{i} + (2y-2)\mathbf{j}$ *nollakohdat, ja näemme, että ainoa nollakohta on pisteessä* $(2,1)$*, joka kuuluu kyseiseen joukkoon.*
Seuraavaksi tutkimme ko. alueen reunaa joka koostuu kolmesta osasta:

$$
\begin{aligned}
A_1 &= \{ (x,0) : 0 \leq x \leq 5 \}, \\
A_2 &= \{ (0,y) : 0 \leq y \leq 5 \}, \\
A_3 &= \{ (x,y) : x+y = 5,\ 0 \leq x \leq 5 \}.
\end{aligned}
$$

- *Joukossa* A_1 *funktio on* $g(x) = f(x,0) = x^2 - 4x + 7$ *ja koska* $g'(2) = 0$ *niin näemme että mahdolliset ääriarvopisteet ovat* $(0,0)$, $(2,0)$ *ja* $(5,0)$.

Esimerkki: Suurin ja pienin arvo, jatk.

- *Joukossa* A_2 *funktio on* $h(y) = f(0,y) = y^2 - 2y + 7$ *ja koska* $h'(1) = 0$ *niin näemme että mahdolliset ääriarvopisteet ovat* $(0,0)$, $(0,1)$ *ja* $(0,5)$.
- *Joukossa* A_3 *funktio on* $k(x) = f(x, 5-x) = x^2 + (5-x)^2 - 4x - 2(5-x) + 7 = 2x^2 - 12x + 22$ *ja koska* $k'(3) = 0$ *niin näemme että mahdolliset ääriarvopisteet ovat* $(5,0)$, $(3,2)$ *ja* $(0,5)$.

Koska

$$
\begin{array}{lll}
f(2,1) = 2, & f(0,0) = 7 & f(2,0) = 3 \\
f(5,0) = 12, & f(0,1) = 6, & f(0,5) = 22 \\
f(3,2) = 4, & &
\end{array}
$$

niin päättelemme, että pienin arvo on $f(2,1) = 2$ *ja suurin* $f(0,5) = 22$.

Esimerkki: Taylorin polynomi

Jos

$$f(x,y) = \frac{e^{x+y}-1}{x+y}\ln(1+x-y),$$

missä $\frac{e^0-1}{0} = 1$ *ja oletamme, että* $1+x-y>0$ *niin voimme määrittää funktion* f *2. asteen Taylorin polynomin pisteessä* $(0,0)$ *käyttäen hyväksi Taylorin polynomin yksikäsitteisyyttä ja kehitelmiä* $\frac{e^t-1}{t} = 1+\frac{1}{2}t+\frac{1}{6}t^2+\frac{1}{24}t^3+\ldots$ *ja* $\ln(1+t) = t-\frac{1}{2}t+\frac{1}{3}t^3+\ldots$ *seuraavalla tavalla: Sijoitamme näihin kehitelmiin lausekkeet* $x+y$ *sekä* $x-y$ *ja otamme mukaan vain ne termit joista tulee korkeintaan astetta 2 olevia termiä. Näin saamme*

$$f(x,y) = \left(1+\frac{1}{2}(x+y)+\frac{1}{6}(x+y)^2+\ldots\right)\left((x-y)-\frac{1}{2}(x-y)^2+\ldots\right)$$
$$= x-y-\frac{1}{2}(x-y)^2+\frac{1}{2}(x+y)(x-y)+\ldots = x-y+xy-y^2+\ldots$$

Näin ollen Taylorin polynomiksi tulee

$$x-y+xy-y^2.$$

Taylorin 2. asteen polynomi ja ääriarvot

Oletamme, että $f:\mathbb{R}^d\to\mathbb{R}$ *on kaksi kertaa jatkuvasti derivoituva ainakin pisteen* $\mathbf{x}_0$ *läheisyydessä. Merkitsemme* $\mathbf{h}=\mathbf{x}-\mathbf{x}_0$ *ja määrittelemme* $g(t)=f(\mathbf{x}_0+t\,\mathbf{h})$*. Silloin*

$$g(1) = g(0)+\int_0^1 g'(t)\,dt = g(0)-\Big/_0^1(1-t)g'(t)\,dt+\int_0^1(1-t)g''(t)\,dt$$
$$= g(0)+g'(0)+\int_0^1(1-t)g''(0)+\int_0^1(1-t)(g''(t)-g''(0))\,dt$$
$$= g(0)+g'(0)+\frac{1}{2}g''(0)+\int_0^1(1-t)(g''(t)-g''(0))\,dt.$$

Ketjusäännön nojalla $g'(t)=f'(\mathbf{x}+t\,\mathbf{h})\mathbf{h}=\mathbf{h}^{\mathsf{T}}f'(\mathbf{x}+t\,\mathbf{h})^{\mathsf{T}}$ *josta seuraa, että* $g''(t)=\mathbf{h}^{\mathsf{T}}f''(\mathbf{x}+t\,\mathbf{h})\mathbf{h}$ *joten*

$$f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}_0)+f'(\mathbf{x})(\mathbf{x}-\mathbf{x}_0)+\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\mathbf{x}_0)^{\mathsf{T}}f''(\mathbf{x}_0)(\mathbf{x}-\mathbf{x}_0)+\eta(\mathbf{x}),$$

missä

Taylorin 2. asteen polynomi ja ääriarvot, jatk.

$$\eta(\mathbf{x}) = \int_0^1 (1-t)(\mathbf{x}-\mathbf{x}_0)^{\mathsf{T}}\big(f''(\mathbf{x}_0 + t\,(\mathbf{x}-\mathbf{x}_0)) - f''(\mathbf{x}_0)\big)(\mathbf{x}-\mathbf{x}_0)\,\mathrm{d}t.$$

Nyt $\max_{t\in[0,1]}\|f''(\mathbf{x}_0 + t\,(\mathbf{x}-\mathbf{x}_0)) - f''(\mathbf{x}_0)\| \to 0$ *kun* $\mathbf{x} \to \mathbf{x}_0$ *koska oletamme, että* f'' *on jatkuva ja siitä seuraa, että* $\lim_{\mathbf{x}\to\mathbf{x}_0} \frac{\eta(\mathbf{x})}{\|\mathbf{x}-\mathbf{x}_0\|^2} = 0$.
Jos A *on mikä tahansa* $d \times d$*-matriisi, joka on symmetrinen ja reaalinen (kuten* $f''(\mathbf{x}_0)$*) niin*

$$\lambda_{\min}\|\mathbf{h}\|^2 \le \mathbf{h}^{\mathsf{T}} A\mathbf{h} \le \lambda_{\max}\|\mathbf{h}\|^2.$$

Jos siis $f'(\mathbf{x}_0) = \mathbf{0}$ *ja kaikki* $f''(\mathbf{x}_0)$*:n ominaisarvot ovat positiiviset, niin silloin pienin niistä* $\lambda_{\min}$ *on myös positiivinen ja*

$$f(\mathbf{x}) \ge f(\mathbf{x}_0) + \left(\frac{1}{2}\lambda_{\min} + \frac{\eta(\mathbf{x})}{\|\mathbf{x}-\mathbf{x}_0\|^2}\right)\|\mathbf{x}-\mathbf{x}_0\|^2 \ge f(\mathbf{x}_0),$$

kun $\|\mathbf{x}-\mathbf{x}_0\|$ *on niin pieni, että* $\frac{\eta(\mathbf{x})}{\|\mathbf{x}-\mathbf{x}_0\|^2} > -\frac{1}{2}\lambda_{\min}$.

Miksi $C = (A^{\mathsf{T}}A)^{-1}A^{\mathsf{T}}Y$ on neliösumman $C \mapsto \|AC - Y\|^2$ minimipiste ?

Voimme kirjoittaa minimoitavan funktion muodossa

$$\begin{aligned} F(C) = (AC-Y)^{\mathsf{T}}(AC-Y) &= C^{\mathsf{T}}A^{\mathsf{T}}AC - C^{\mathsf{T}}A^{\mathsf{T}}Y - Y^{\mathsf{T}}AC + Y^{\mathsf{T}}Y \\ &= C^{\mathsf{T}}A^{\mathsf{T}}AC - 2Y^{\mathsf{T}}AC + Y^{\mathsf{T}}Y, \end{aligned}$$

jolloin derivaatta on

$$F'(C) = C^{\mathsf{T}}(A^{\mathsf{T}}A + (A^{\mathsf{T}}A)^{\mathsf{T}}) - 2Y^{\mathsf{T}}A.$$

Koska $(A^{\mathsf{T}}A)^{\mathsf{T}} = A^{\mathsf{T}}A$ *niin voimme kirjoittaa yhtälön* $F'(C) = \mathbf{0}$ *muodossa*

$$C^{\mathsf{T}}A^{\mathsf{T}}A = Y^{\mathsf{T}}A \quad \Rightarrow \quad A^{\mathsf{T}}AC = A^{\mathsf{T}}Y \quad \Rightarrow \quad C = (A^{\mathsf{T}}A)^{-1}A^{\mathsf{T}}Y.$$

Toisella tavalla: Jos määrittelemme $P = A(A^{\mathsf{T}}A)^{-1}A^{\mathsf{T}}$ *niin* $P^2 = P$ *eli* P *on projektio ja* $P^{\mathsf{T}}A = PA = A$ *josta seuraa, että jos kirjoitamme* $C = \tilde{C} + (A^{\mathsf{T}}A)^{-1}A^{\mathsf{T}}Y$ *niin* $AC = A\tilde{C} + PY$ *ja*

$$F(C) = \|A\tilde{C} - (Y - PY)\|^2 = \|A\tilde{C}\|^2 - 2(Y-PY)^{\mathsf{T}}A\tilde{C} + \|PY - Y\|^2$$
$$= \|A\tilde{C}\|^2 - 2Y^{\mathsf{T}}(A - P^{\mathsf{T}}A)\tilde{C} + \|PY-Y\|^2 = \|A\tilde{C}\|^2 + \|PY-Y\|^2 \ge \|PY-Y\|^2.$$

Esimerkki: Linaarinen regressio

Meillä on seuraavat havainnot muuttujista x ja y:

x	96	110	103	127	60	54	43	36	20	11	22
y	76	74	76	87	66	59	63	60	55	52	46

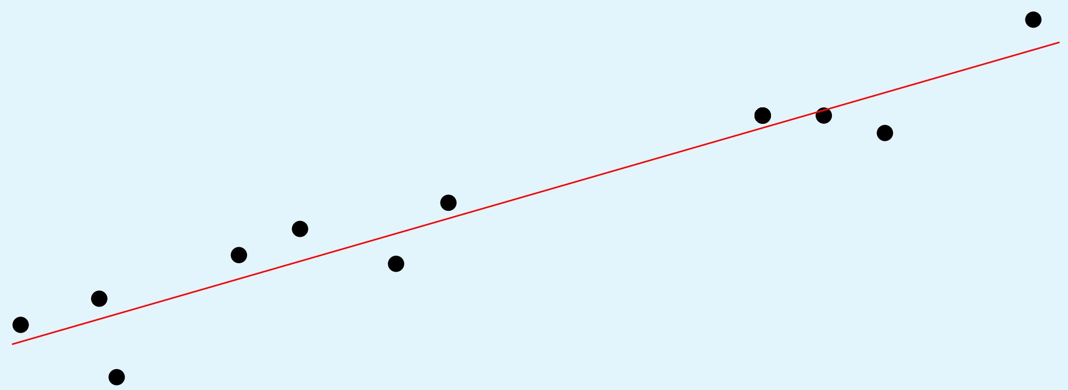
Jos haluamme määrittää luvut a ja b siten, että $y \approx a + bx$ minimoimolla neliösummaa $\sum_{j=1}^{11}(a + bx_j - y_j)^2$ niin määrittelemme 11×2 matriisin A siten, että $A(j,1) = 1$, $A(j,2) = x_j$ ja 11×1 pystyvektorin Y siten, että $Y(j,1) = y_j$. Silloin vektori $(A^T A)^{-1} A^T Y$ sisältää optimaaliset kertoimet a ja b.

Matlab/Octavessa lasku menee seuraavalla tavalla:

```
A=[1, 96; 1, 110; 1, 103; 1, 127; 1, 60; 1, 54; 1,43; 1,36;
1,20; 1, 11; 1,22]
Y=[76; 74; 76; 87; 66; 59; 63; 60; 55; 52; 46]
C=inv(A'*A)*A'*Y
```

jolloin saamme tulokseksi $a = C(1) = 47.014$ ja $b = C(2) = 0.28863$.

Esimerkki: Linaarinen regressio, jatk.



Voimme myös laskea $\overline{x} = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n} x_j$ ja $\overline{y} = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n} y_j$ jolloin

$$b = \frac{\sum_{j=1}^{n}(x_j - \overline{x})(y_j - \overline{y})}{\sum_{j=1}^{n}(x_j - \overline{x})^2}$$

ja $a = \overline{y} - b\overline{x}$. Nämä laskut voimme suorittaa komennoilla

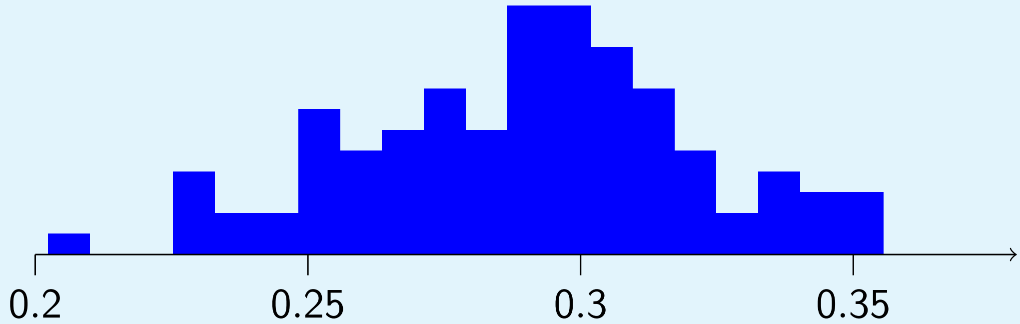
```
x=[96, 110, 103, 127, 60, 54, 43, 36, 20, 11, 22];
y=[76, 74, 76, 87, 66, 59, 63, 60, 55, 52, 46];
b=cov(x,y)/var(x), a=mean(y)-b*mean(x)
```

Esimerkki: Linaarinen regressio, jatk.

Jos nyt haluaisimme arvioida miten luotettavia numeroarvot $a = 47.014$ *ja* $b = 0.28863$ *ovat niin voimme joko käyttää perustilastotieteen standardioletuksia riippumattomuudesta ja normaalijakautuneisuudesta tai sitten menetellä seuraavalla tavalla: Valitsemme satunnaisesti (takaisinpanolla) 11 pistettä* (x, y) *joukosta* $\{ (x_j, y_j) : 1 \leq j \leq 11 \}$ *ja laskemme näillä arvoilla lineaariset regressiokertoimet a ja b ja tämän toistamme kunnes olemme saaneet riittävän monta arvoa. Laskut voimme tehdä näillä komennoilla (missä* `A` *on edellä määritelty matriisi):*

```
for k=1:100, jj=floor(11*rand(11,1))+1;
C(:,k)=(A(jj,:)'*A(jj,:))\A(jj,:)'*Y(jj);end
```

Silloin esimerkiksi b:n jakauma on seuraavanlainen:



Esimerkki: Pienimmän neliösumman menetelmä

Meillä on pisteet (x_j, y_j), $j = 1, \ldots, n$,

`x=[0.24 0.42 0.63 0.83 1.28 1.74 2.12 2.7 2.89 3.14]`

`y=[0.24 0.41 0.59 0.74 0.96 0.99 0.85 0.43 0.25 0]`

oletamme, että $y \approx c_1 + c_2 x + c_3 x^2$ *ja haluamme määrittää kertoimet* c_1, c_2 *ja* c_3 *annettujen pisteiden perusteella.*

Yhtä ainoata oikeata vastausta ei (tietenkään) ole olemassa joten on tärkeätä, että teemme selväksi miten määritämme kertoimet.

Yksinkertaisinta on valita c_j, $j = 1, 2, 3$ *siten, että neliösumma*

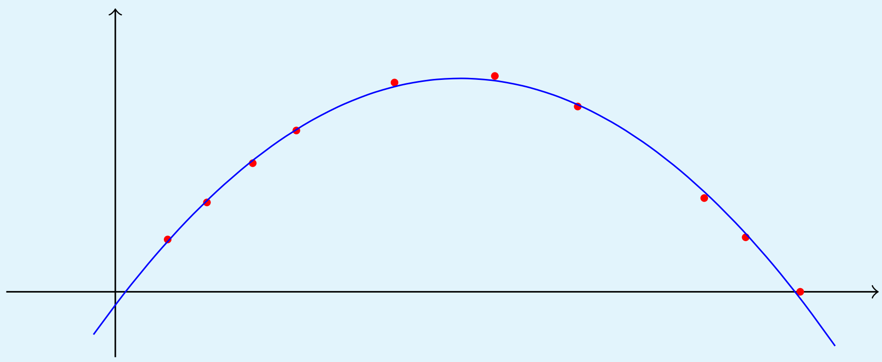
$$\sum_{j=1}^{n} \left(c_1 + c_2 x_j + c_3 x_j^2 - y_j \right)^2$$

on mahdollisimman pieni. (Tässä tapauksessa saisimme melkein saman tuloksen jos neliön paikalla olisi itseisarvo.) Voimme derivoida lausekkeen muuttujien c_1, c_2 *ja* c_3 *suhteen, ja hakea piste missä derivaatat ovat* 0.

Tehokkas tapa laskujen suorittamiseksi on kirjoittaa yhtälösysteemi $c_1 + c_2 x_j + c_3 x_j^2 - y_j \approx 0$ *muodossa* $AC - Y \approx 0$ *missä* $A(j, k) = x_j^{k-1}$, $C(k, 1) = c_k$ *ja* $Y(j, 1) = y_j$.

Esimerkki: Pienimmän neliösumman menetelmä, jatk.

Funktion $C \mapsto \|AC - Y\|^2 = C^T A^T AC - 2Y^T AC + Y^T Y$ *derivaatta on* $2C^T A^T A - 2Y^T A$ *ja tämä on* $\mathbf{0}$ *kun* $C = (A^T A)^{-1} A^T Y$.
Matlab/Octavessa voimme kirjoittaa tämän seuraavalla tavalla
```
A=[(1+0*x'), x', x'.^2]; Y=y';
```
ja sitten laskemme
```
C= (A'*A)\A'*Y
```
Tästä saamme $C = \begin{bmatrix} -0.060453 \\ 1.314680 \\ -0.415687 \end{bmatrix}$. *Pisteet ja käyrä näyttävät seurvaavanlaisilta:*



Esimerkki: Lagrangen kerroin

Jos haluamme määrittää lyhimmän etäisyyden jostain paraabelin $y = x^2$ *pisteestä pisteeseen* $(3, 0)$ *niin voimme käyttää Lagrangen kerrointa seuraavalla tavalla:*
Minimoimme etäisyyden neliötä eli funktiota $f(x, y) = (x-3)^2 + y^2$ *kun* $g(x, y) = x^2 - y = 0$ *ja muodostamme Lagrangen funktion*

$$F(x, y, \lambda) = (x-3)^2 + y^2 + \lambda(x^2 - y).$$

Ehto, että F*:n gradientti on* 0 *antaa yhtälösysteemin*

$$\begin{aligned} F_x(x, y, \lambda) &= 2(x-3) + 2\lambda x = 0, \\ F_y(x, y, \lambda) &= 2y - \lambda = 0, \\ F_\lambda(x, y, \lambda) &= x^2 - y = 0. \end{aligned}$$

Esimerkki: Lagrangen kerroin

Kolmannen yhtälön (eli rajoitusehdon) nojalla $y = x^2$ *ja kun sijoitamme tämän toiseen yhtälöön saamme* $\lambda = 2x^2$ *jolloin ensimmäisen yhtälön nojalla näemme, että* $x + 2x^3 = 3$. *Nyt huomaamme, että* $x = 1$ *on tämän yhtälön ratkaisu ja muita ei ole koska funktio* $x \mapsto x + 2x^3$ *on aidosti kasvava. Silloin* $y = 1$ *ja* $f(1,1) = 5$.
Funkio f *on jatkuva ja* $\lim_{x^2+y^2\to\infty} f(x,y) = \infty$ *joten funktion* f *minimiarvo saavutetaan jossain pisteessä. Koska funktiot* f *ja* g *ovat jatkuvasti derivoituvia ja* g*:n derivaatta* $2x\,\mathbf{i} - \mathbf{j} \neq \mathbf{0}$ *niin minimipiste saavutetaan pistessä (joka yhdessä* λ*:n kanssa) on Lagrangen funktion kriittinen piste. Näin ollen voimme olla varmoja siitä, että* $(1,1)$ *todella on minimipiste ja etäisyys on* $\sqrt{5}$.

Huom!

Edellisessä esimerkissä Lagrangen kertoimen käyttö ei oikeastaan tarjonnut mitään suurta etua verrattuna muihin mahdollisuuksiin mutta Lagrangen menetelmän vahvuudet tulevat esille kun ratkaistava ongelma on vaikeampi.

Mitä Lagrangen kerroin "kertoo"?

Oleta, että funktion $f(\mathbf{x})$ *suurin (tai pienin) arvo kun* $g(\mathbf{x}) + c = 0$ *saavutetaan pisteessä* $\mathbf{x}(c)$ *ja että tämä piste (yhdessä* $\lambda(c)$*:n kanssa) on Lagrangen funktion* $L(\mathbf{x}, \lambda) = f(\mathbf{x}) + \lambda(g(\mathbf{x}) + c)$ *derivaatan nollakohta eli*

$$\begin{aligned} f'(\mathbf{x}(c)) + \lambda(c)g'(\mathbf{x}(c)) &= \mathbf{0}, \\ g(\mathbf{x}(c)) + c &= 0. \end{aligned}$$

Jos nyt $h(c) = f(\mathbf{x}(c))$ *on maksimiarvo (tai minimiarvo) niin ensimmäisestä yhtälöstä seuraa, että*

$$h'(c) = f'(\mathbf{x}(c))\mathbf{x}'(c) = -\lambda(c)g'(\mathbf{x}(c))\mathbf{x}'(c).$$

Koska $g(\mathbf{x}(c)) = -c$ *niin pätee* $g'(\mathbf{x}(c))\mathbf{x}'(c) = -1$ *ja silloin myös*

$$h'(c) = \lambda(c).$$

Lagrangen kerroin siis kertoo miten maksimi- tai minimiarvo riippuu muutoksista rajoitusehdossa.

Miksi Lagrangen menetelmä toimii?

Oleta, että f *ja* $g : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}$ *ovat jatkuvasti derivoituvia,* $g(x_0, y_0, z_0) = 0$ *ja* $f(x, y, z) \geq f(x_0, y_0, z_0)$ *kaikilla* $(x, y, z) \in \mathbb{R}^3$ *joilla* $g(x, y, z) = 0$ *ja että* $g'(x_0, y_0, z_0) \neq \mathbf{0}$. *Voimmeko tästä päätellä, että on olemassa luku* λ_0 *siten, että* $(x_0, y_0, z_0, \lambda_0)$ *on funktion* $L(x, y, z, \lambda) = f(x, y, z) + \lambda g(x, y, z)$ *kriittinen piste eli derivaatan nollakohta?*

Koska $g'(x_0, y_0, z_0) \neq \mathbf{0}$ *niin ainakin yksi komponentti ei ole* 0 *ja oletamme, että esimerkiksi* $g_z(x_0, y_0, z_0) \neq 0$. *Implisiittifunktiolauseen nojalla tiedämme, että on olemassa funktio* $h(x, y)$ *siten, että* $h(x_0, y_0) = z_0$ *ja* $g(x, y, h(x, y)) = 0$ *kun* $\|(x, y) - (x_0, y_0)\|$ *on riittävän pieni. Mutta silloin* $f(x, y, h(x, y)) \geq f(x_0, y_0, h(x_0, y_0))$ *ja funktion* $(x, y) \mapsto f(x, y, h(x, y))$ *derivaatta pisteessä* (x_0, y_0) *on* $\mathbf{0}$, *eli*

$$
\begin{aligned}
f_x(x_0, y_0, h(x_0, y_0)) + f_z(x_0, y_0, h(x_0, y_0))h_x(x_0, y_0) &= 0, \\
f_y(x_0, y_0, h(x_0, y_0)) + f_z(x_0, y_0, h(x_0, y_0))h_y(x_0, y_0) &= 0.
\end{aligned}
$$

Miksi Lagrangen menetelmä toimii? jatk.

Derivoimalla yhtälön $g(x, y, h(x, y)) = 0$ *molemmat puolet saamme*

$$
\begin{aligned}
g_x(x_0, y_0, h(x_0, y_0)) + g_z(x_0, y_0, h(x_0, y_0))h_x(x_0, y_0) &= 0, \\
g_y(x_0, y_0, h(x_0, y_0)) + g_z(x_0, y_0, h(x_0, y_0))h_y(x_0, y_0) &= 0.
\end{aligned}
$$

josta seuraa, että kun ratkaisemme $h_x(x_0, y_0)$ *ja* $h_y(x_0, y_0)$ *näistä yhtälöistä ja muistamme, että* $z_0 = h(x_0, y_0)$ *niin saamme*

$$
\begin{aligned}
f_x(x_0, y_0, z_0) - \frac{f_z(x_0, y_0, z_0)}{g_z(x_0, y_0, z_0)} g_x(x_0, y_0, z_0) &= 0, \\
f_y(x_0, y_0, z_0) - \frac{f_z(x_0, y_0, z_0)}{g_z(x_0, y_0, z_0)} g_y(x_0, y_0, z_0) &= 0.
\end{aligned}
$$

Jos nyt valitsemme $\lambda_0 = -\frac{f_z(x_0, y_0, z_0)}{g_z(x_0, y_0, z_0)}$ *niin pätee* $L'(x_0, y_0, z_0, \lambda_0) = 0$.

Esimerkki: Regressiosuora ja Lagrangen kerroin

Meillä on pisteet (x_j, y_j), $j = 1, \dots, n$ *ja haluamme määrittää suoran* $ax + by + c = 0$ *siten, että etäisyyksien neliöiden summa pisteista* (x_j, y_j) *suoraan* $ax + by + c = 0$ *on mahdollisimman pieni. Näin ollen meidän pitää minimoida lauseketta*

$$F(a, b, c) = \sum_{j=1}^{n} \frac{(ax_j + by_j + c)^2}{a^2 + b^2}.$$

Derivoimalla tätä funktiota muuttujan c *suhteen saamme* $F_c(a, b, c) = \frac{2}{a^2+b^2} \sum_{j=1}^{n} (ax_j + by_j + c)$ *ja ehdosta* $F_c = 0$ *seuraa* $a\overline{x} + b\overline{y} + c = 0$ *eli suora kulkee pisteen* $(\overline{x}, \overline{y}) = (\frac{1}{n} \sum_{j=1}^{n} x_j, \frac{1}{n} \sum_{j=1}^{n} y_j)$ *kautta. Näin ollen voimme, kun korvaamme pisteet* (x_j, y_j) *pisteillä* $(x_j - \overline{x}, y - \overline{y})$ *olettaa, että* $\overline{x} = \overline{y} = 0$ *jolloin* $c = 0$ *ja suoran yhtälö on* $ax + by = 0$.
Koska meidän täytyy vaatia, että $(a, b) \neq (0, 0)$ *voimme yhtä hyvin vaatia, että* $a^2 + b^2 = 1$ *jolloin meidän täytyy löytää funktion* $(a, b) \mapsto \sum_{j=1}^{n} (ax_j + by_j)^2$ *pienin arvo kun* $a^2 + b^2 = 1$.

Esimerkki: Regressiosuora ja Lagrangen kerroin, jatk.

Jos määrittelemme $X = \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}$ *ja* $M = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & \dots & x_n \\ y_1 & y_2 & \dots & y_n \end{bmatrix}$ *niin*

$$\sum_{j=1}^{n} (ax_j + by_j)^2 = \|M^T X\|^2 = (M^T X)^T (M^T X) = X^T M M^T X,$$

ja rajoitusehto on $X^T X = 1$.
Tästä syystä muodostamme Lagrangen funktion

$$L(X, \lambda) = X^T M M^T X + \lambda (X^T X - 1).$$

Haemme tämän funktion derivaatan nollakohdat ja se on seuraavan yhtälösysteemin ratkaisu:

$$\begin{aligned} L_X &= X^T (M M^T + (M M^T)^T) + 2\lambda X^T = 0, \\ L_\lambda &= X^T X - 1 = 0. \end{aligned}$$

Esimerkki: Regressiosuora ja Lagrangen kerroin, jatk.

Koska $(MM^{\mathsf{T}})^{\mathsf{T}} = MM^{\mathsf{T}}$ *niin saamme transponoimalla*

$$MM^{\mathsf{T}}X = -\lambda X,$$

eli $-\lambda$ *on matriisin* MM^{T} *ominaisarvo ja* X *on vastaava ominaisvektori.*
Minimoitavan funktion arvo on

$$X^{\mathsf{T}}MM^{\mathsf{T}}X = -\lambda X^{\mathsf{T}}X = -\lambda,$$

joten meidän pitää valita vektoriksi X *matriisin* MM^{T} *pienempään ominaisarvoon liittyvä ominaisvektori.*
Jos laskemme matriisin M *singulaarihajotelman* $M = USV^{\mathsf{T}}$ *niin matriisin* U *toinen sarake* $U(:,2)$ *on hakemamme ratkaisu* $\begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix}$ *ja suoran suuntavektori on ensimmäinen sarake* $U(:,1)$.
Jos meillä on vaakavektorit `x` *ja* `y` *niin voimme suorittaa nämä laskut Matlab/Octavessa komennoilla:*

```
M = [x-mean(x);y-mean(y)]; [u,s,v] = svd(M);
```

jolloin `a=u(1,2)`, `b=u(2,2)` *ja* `c = -a*mean(x)-b*mean(y)`

Esimerkki: Boltzmannin jakauma

Kaasussa on N *molekyyliä ja jokainen niistä voi olla tilassa* j *jolloin sen energia on* E_j *missä* $j = 1, \ldots, M$, $(1 \le M \le \infty)$. *Jos molekyyleistä* N_j *ovat tilassa* j *niin* $\sum_{j=1}^{M} N_j = N$ *ja jos niiden yhteenlaskettu energia on* E, *niin pätee* $\sum_{j=1}^{M} N_j E_j = E$.
On olemassa

$$\frac{N!}{N_1!\,N_2!\,\ldots\,N_M!},$$

erilaista tapaa millä N *molekyyliä voivat sijoittua eri energialuokkiin siten, että luokassa* j *on* N_j *molekyyliä. Nyt meidän pitää määrittää osuudet* $\frac{N_j}{N}$ *siten, että tämä luku, tai yhtäpitävästi sen logaritmi, on suurimmillaan kun* $\sum_{j=1}^{M} N_j = N$ *ja* $\sum_{j=1}^{M} N_j E_j = E$.
Niin sanotun Stirlingin kaavan mukaan
$\ln(k!) \approx (k + \frac{1}{2})\ln(k) - k + \frac{1}{2}\ln(2\pi)$ *joten me haemme lausekkeen* $(N + \frac{1}{2})\ln(N) - N - \sum_{j=1}^{M}(N_j + \frac{1}{2})\ln(N_j) + \sum_{j=1}^{M} N_j$ *suurinta arvoa emmekä välitä vaatimuksesta, että lukujen* N_j *pitäisi olla kokonaislukuja.*

Esimerkki: Boltzmannin jakauma, jatk.

Lagrangen funktioksi tulee

$$L(N_1,\ldots,N_M,\lambda,\mu) = (N+\tfrac{1}{2})\ln(N) - \sum_{j=1}^{M}(N_j+\tfrac{1}{2})\ln(N_j) + \lambda\left(\sum_{j=1}^{M} N_j - N\right) + \mu\left(\sum_{j=1}^{M} N_j E_j - E\right).$$

Derivaatan nollakohdat toteuttavat yhtälösysteemin

$$\frac{\partial L}{\partial N_j} = -\ln(N_j) - 1 - \frac{1}{2N_j} + \lambda + \mu E_j = 0, \quad j = 1,\ldots,M,$$

$$\frac{\partial L}{\partial \lambda} = \sum_{j=1}^{M} N_j - N = 0,$$

$$\frac{\partial L}{\partial \mu} = \sum_{j=1}^{M} N_j E_j - E = 0.$$

Esimerkki: Boltzmannin jakauma, jatk.

Ensimmäisistä yhtälöistä saamme ratkaisuiksi

$$N_j = \mathrm{e}^{-1-\frac{1}{2N_j}+\lambda}\mathrm{e}^{\mu E_j} \approx \mathrm{e}^{\lambda-1}\mathrm{e}^{\mu E_j}$$

ja laskemalla yhteen saamme

$$N \approx \mathrm{e}^{\lambda-1}\sum_{j=1}^{M}\mathrm{e}^{\mu E_j}, \quad j = 1,\ldots,M.$$

Näin ollen

$$\frac{N_j}{N} \approx \frac{\mathrm{e}^{\mu E_j}}{\sum_{j=1}^{M}\mathrm{e}^{\mu E_j}},$$

ja μ määräytyy ehdosta

$$\frac{E}{N} \approx \frac{\sum_{j=1}^{M} E_j \mathrm{e}^{\mu E_j}}{\sum_{j=1}^{M}\mathrm{e}^{\mu E_j}}.$$

Tavallisesti kirjoitetaan $\mu = -\frac{1}{kT}$ missä k on Boltzmannin vakio.

Gradientti- ja konjugaatti-gradientti-menetelmä

Gradientti-menetelmä funktion f minimin löytämiseksi toimii seuraavalla tavalla: Aloitetaan jostain pisteestä $\mathbf{x}_0$ ja kun algoritmi on tullut pisteeseen $\mathbf{x}_n$ niin valitaan suunta $\mathbf{s}_n = -f'(\mathbf{x}_0)^\mathsf{T}$ (kun oletetaan, että $f'(\mathbf{x}_n)$ on rivivektori jolloin $\mathbf{s}_n$ on pystyvektori kuten $\mathbf{x}_n$) ja seuraavaksi pisteeksi valitaan $\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{x}_n + t_n\mathbf{s}_n$ missä t_n määräytyy ehdosta $f(\mathbf{x}_n + t_n\mathbf{s}_n) = \min_{t\in\mathbb{R}} f(\mathbf{x}_n + t\mathbf{s}_n)$ (tai ainakin niin että löydetään paikallinen minimipiste).
Konjugaatti-gradientti-menetelmä toimii periaatteessa samalla tavalla mutta ainostaan kun $n = 0$ valitaan $\mathbf{s}_0 = -f'(\mathbf{x}_0)^\mathsf{T}$ ja muuten kun on löydetty piste $\mathbf{x}_{n+1}$ niin valitaan uudeksi suunnaksi

$$\mathbf{s}_{n+1} = -f'(\mathbf{x}_{n+1})^\mathsf{T} + \frac{\|f'(\mathbf{x}_{n+1})\|^2}{\|f'(\mathbf{x}_n)\|^2}\mathbf{s}_n.$$

Seuraavaksi tutkimme miten nämä menetelmät toimivat kun $f(x,y) = x^2 + 1.96xy + y^2 = 0.02\,x^2 + 0.02\,y^2 + 0.98(x+y)^2$ *eli* $f(X) = X^\mathsf{T}BX$ *missä* $B = \begin{bmatrix} 1 & 0.98 \\ 0.98 & 1 \end{bmatrix}$ *ja* $X = \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}$.

Gradientti- ja konjugaatti-gradientti-menetelmä, jatk.

Funktion $t \mapsto f(X + tS)$ derivaatta on $2S^\mathsf{T}BX + 2tS^\mathsf{T}BS$ joten tämä funktio saavuttaa pienimmän arvonsa pisteessä

$$X - \frac{S^\mathsf{T}BX}{S^\mathsf{T}BS}S.$$

Käyttämällä tätä tulosta hyväksi saamme gradienttimenetelmällä esimerkiksi seuraavat pisteet:

$$X_0 = \begin{bmatrix} -0.98000 \\ 1.00000 \end{bmatrix}, \quad X_1 = \begin{bmatrix} -0.98000 \\ 0.96040 \end{bmatrix}, \quad X_2 = \begin{bmatrix} -0.94119 \\ 0.96040 \end{bmatrix},$$
$$X_3 = \begin{bmatrix} -0.94119 \\ 0.92237 \end{bmatrix}, \quad X_4 = \begin{bmatrix} -0.90392 \\ 0.92237 \end{bmatrix}, \quad X_5 = \begin{bmatrix} -0.90392 \\ 0.88584 \end{bmatrix}$$

Syy siihen, ettei gradienttimenetelmä toimi tätä paremmin, on että matriisin B ominaisarvot $\lambda_1 = 0.02$ ja $\lambda_2 = 1.98$ ovat niin erisuuret ja tässä esimerkissä alkuarvo X_0 oli valittu erityisen epäedullisella tavalla.

Gradientti- ja konjugaatti-gradientti-menetelmä, jatk.

Konjugaatti-gradientti-menetelmällä saamme samalla alkuarvolla $X_0 = \begin{bmatrix} -0.98 \\ 1 \end{bmatrix}$ *ensin saman pisteen* $X_1 = \begin{bmatrix} -0.98000 \\ 0.96040 \end{bmatrix}$ *kuin gradienttimenetelmällä mutta uusi suunta on (koska* $f'(X)^T = -2BX$*)*

$$S_1 = -2BX_1 + \frac{X_1^T BBX_1}{X_0^T BBX_0}(-2BX_0) = \begin{bmatrix} 0.077616 \\ -0.076064 \end{bmatrix},$$

jolloin saamme

$$X_2 = X_1 - \frac{S_1^T BX_1}{S_1^T BS_1} S_1 = \begin{bmatrix} 0.0000e+00 \\ -4.7740e-15 \end{bmatrix},$$

ja tarkka lasku olisi antanut vastaukseksi origon.
Voidaan osoittaa, että jos $f(X) = X^T BX + CX$ *missä* B *on* $d \times d$*-matriisi joka on reaalinen, symmetrinen ja jonka ominaisarvot ovat positiiviset ja* C *on* $1 \times d$*-rivivektori niin konjugaatti-gradientti-menetelmä tarvitsee (korkeintaan, jos lasketaan tarkasti)* d *askelta minimipisteen löytämiseksi. Käytännössä minimoitavat funktiot eivät tietenkään ole tätä muotoa mutta minimipisteen läheisyydessä ne voivat olla melkein tällaisia.*

Esimerkki: Lineaarinen optimointi

Jos meidän pitää ratkaista seuraava lineaarinen optimointiprobleema

$$\max 5x_1 + 3x_2 + 2x_3$$

$$x_1,\ x_2,\ x_3 \geq 0$$

$$\begin{array}{ccccccc} 4x_1 & + & 5x_2 & + & 2x_3 & \leq & 20 \\ 3x_1 & + & 4x_2 & - & x_3 & \leq & 30 \end{array}$$

niin voimme menetellä seuraavalla tavalla: Ensin lisäämme ylijäämämuuttujat s_1 *ja* s_2 *rajoitusehtoihin eli kirjoitamme* $4x_1 + 5x_2 + 2x_3 + s_1 = 20$ *ja* $3x_1 + 4x_2 - x_3 + s_2 = 30$ *jolloin epäyhtälöt muuttuvat ehdoiksi* $s_1 \geq 0$ *ja* $s_2 \geq 0$*. Maksimoitavan funktion kirjoitamme yhtälönä muodossa* $q - 5x_1 - 3x_2 - 2x_3 = 0$*. Nyt voimme kirjoittaa nämä yhtälöt seuraavana taulukkona*

q	x_1	x_2	x_3	s_1	s_2	$=$
0	4	5	2	$\boxed{1}$	0	20
0	3	4	-1	0	$\boxed{1}$	30
1	-5	-3	-2	0	0	0

Esimerkki: Lineaarinen optimointi

Yhtälösysteemin ratkaisuksi otamme nyt $s_1 = 20$, $s_2 = 40$ *ja* $q = 0$ *ja silloin* $x_1 = x_2 = x_3 = 0$ *koska niiden sarakkeissa ei ole tukialkoita* $\boxed{1}$. *Kantamuuttujat ovat siis nyt* $\{s_1, s_2\}$ *(jos q:ta ei lasketa sellaiseksi). Seuraavassa vaiheessa valitsemme uudeksi kantamuuttujaksi* x_1*:n koska sen kerroin viimeisellä rivillä on negatiivisistä kertoimista itseisarvoltaan suurin. Kantamuuttujien joukosta poistamme muuttujan* s_1 *jonka tukialkio on rivillä* 1 *koska* $\frac{20}{4} < \frac{30}{3}$. *(Jos poistaisimme muuttujan* s_2 *niin* s_1 *saisi negatiivisen arvon.) Gaussin eliminaatiomenetelmän rivioperaatioiden avulla saamme nyt yhtälösysteemiksi*

q	x_1	x_2	x_3	s_1	s_2	$=$
0	$\boxed{1}$	1.25	0.5	0.25	0	5
0	0	0.25	-2.5	-0.75	$\boxed{1}$	15
1	0	3.25	0.5	1.25	0	25

Nyt kantamuuttujat ovat $\{x_1, s_2\}$ *ja optimaalinen ratkaisu on* $x_1 = 5$, $x_2 = x_3 = 0$ *koska kolmannella rivillä ei ole yhtään negatiivista lukua jolloin emme pysty kasvattamaan q:n arvoa vaihtamalla kantamuuttjia.*

Esimerkki: Integroimisjärjestystä ei voi aina vaihtaa

Funktio $(x, y) \mapsto \frac{x^2-y^2}{(x^2+y^2)^2}$ *on origoa lukuunottamatta jatkuva kaikissa pisteissä (ja integraalien kannalta on yhdentekevää miten se määritellään origossa). Erityisesti pätee silloin, että integraali* $\int_0^1 \frac{x^2-y^2}{(x^2+y^2)^2}\,\mathrm{d}x$ *on kaikin puolin hyvin määritelty kun* $y > 0$.
Tämän integraalin laskemiseksi toteamme, että funktio $t \mapsto \int_0^t \frac{x^2-y^2}{(x^2+y^2)^2}\,\mathrm{d}x$ *saa arvon* 0 *origossa ja sen derivaatta on* $\frac{t^2-y^2}{(t^2+y^2)^2}$. *Mutta myös funktio* $t \mapsto -\frac{t}{t^2+y^2}$ *saa arvon* 0 *kun* $t = 0$ *ja sen derivaatta on*

$$-\frac{(t^2+y^2) - t \cdot 2t}{(t^2+y^2)^2} = \frac{t^2-y^2}{(t^2+y^2)^2}.$$

Näin ollen $\int_0^t \frac{x^2-y^2}{(x^2+y^2)^2}\,\mathrm{d}x = -\frac{t}{t^2+y^2}$ *kaikilla t ja erityisesti*

$$\int_0^1 \frac{x^2-y^2}{(x^2+y^2)^2}\,\mathrm{d}x = -\frac{1}{1+y^2}.$$

Esimerkki: Integroimisjärjestystä ei voi aina vaihtaa, jatk.

Funktio $y \mapsto -\frac{1}{1+y^2}$ *on jatkuva ja koska* $\frac{d}{dy}\arctan(y) = \frac{1}{1+y^2}$ *niin*

$$\int_0^1 \left(\int_0^1 \frac{x^2-y^2}{(x^2+y^2)^2}\, dx \right) dy = -\int_0^1 \frac{1}{1+y^2}\, dy = -\Big/_0^1 \arctan(y) = -\frac{\pi}{4}.$$

Koska $\frac{x^2-y^2}{(x^2+y^2)^2} = -\frac{y^2-x^2}{(y^2+x^2)^2}$ *niin sama päättely kuin edellä osoittaa, että*

$$\int_0^1 \left(\int_0^1 \frac{x^2-y^2}{(x^2+y^2)^2}\, dy \right) dx = \frac{\pi}{4} \neq -\frac{\pi}{4} = \int_0^1 \left(\int_0^1 \frac{x^2-y^2}{(x^2+y^2)^2}\, dx \right) dy.$$

Fubinin lauseen nojalla voimme silloin myös vetää johtopäätöksen, että

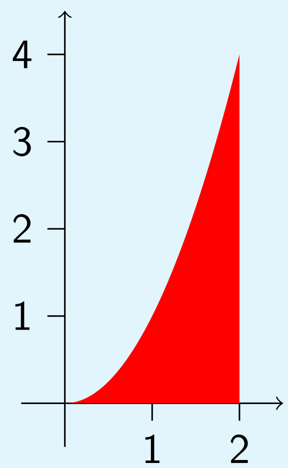
$$\iint_{[0,1]\times[0,1]} \left| \frac{x^2-y^2}{(x^2+y^2)^2} \right| dA = \int_0^1 \left(\int_0^1 \left| \frac{x^2-y^2}{(x^2+y^2)^2} \right| dx \right) dy$$
$$= \int_0^1 \left(\int_0^1 \left| \frac{x^2-y^2}{(x^2+y^2)^2} \right| dy \right) dx = \infty.$$

Esimerkki: Integroimisjärjestyksen vaihto

Jos haluamme vaihtaa integroimisjärjestyksen integraaleissa

$$(a) \quad \int_0^4 \int_{\sqrt{y}}^2 y\, dx\, dy, \qquad (b) \quad \int_0^4 \int_{\sqrt{y}}^4 y\, dx\, dy,$$

niin voimme menetellä seuraavalla tavalla:
(a) Integroimisalue näyttää seuraavanlaiselta:



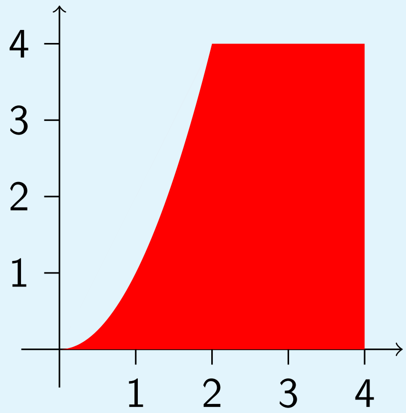
Esimerkki: Integroimisjärjestyksen vaihto, jatk.

Koska $x = \sqrt{y}$ *kun* $y = x^2$ *ja* $x \geq 0$ *niin voimme kuvion perusteella päätellä, että* $0 \leq x \leq 2$ *ja* $0 \leq y \leq x^2$. *Tästä seuraa, että att*

$$\int_0^4 \int_{\sqrt{y}}^2 y \,\mathrm{d}x \,\mathrm{d}y = \int_0^4 \left(\int_{\sqrt{y}}^2 y \,\mathrm{d}x \right) \mathrm{d}y = \int_0^2 \left(\int_0^{x^2} y \,\mathrm{d}y \right) \mathrm{d}x$$

$$= \int_0^2 \left(\Big/_0^{x^2} \tfrac{1}{2} y^2 \right) \mathrm{d}x = \int_0^2 \tfrac{1}{2} x^4 \,\mathrm{d}x = \Big/_0^2 \tfrac{1}{10} x^5 = \frac{16}{5}.$$

(b) Integroimisalue näyttää seuraavanlaiselta:



Esimerkki: Integroimisjärjestyksen vaihto, jatk.

Tässä tapauksessa $0 \leq x \leq 4$, $0 \leq y \leq x^2$ *ja* $y \leq 4$ *joten kun* $0 \leq x \leq 2$ *niin pätee* $0 \leq y \leq x^2$ *ja kun* $2 \leq x \leq 4$ *niin pätee* $0 \leq y \leq 4$. *Näin ollen saamme (a)-kohdan nojalla*

$$\int_0^4 \int_{\sqrt{y}}^4 y \,\mathrm{d}x \,\mathrm{d}y = \int_0^2 \left(\int_0^{x^2} y \,\mathrm{d}y \right) \mathrm{d}x + \int_2^4 \left(\int_0^4 y \,\mathrm{d}y \right) \mathrm{d}x$$

$$= \frac{16}{5} + \int_2^4 \left(\Big/_0^4 \tfrac{1}{2} y^2 \right) \mathrm{d}x = \frac{16}{5} + \int_2^4 8 \,\mathrm{d}x = \frac{16}{5} + 8(4-2) = \frac{96}{5}.$$

Matlab/Octavessa voimme numeerisesti laskea tällaiset integraalit määrittelemällä integroitavaa funktiota komennolla

```
f=@(x,y) y.*(y< x.^2)
```

jolloin siis $f(x,y) = 0$ *kun* $y \geq x^2$ *ja sitten (a)-tapauksessa laskea*

```
dblquad(f,0,2,0,4)
```

ja (b)-tapauksessa

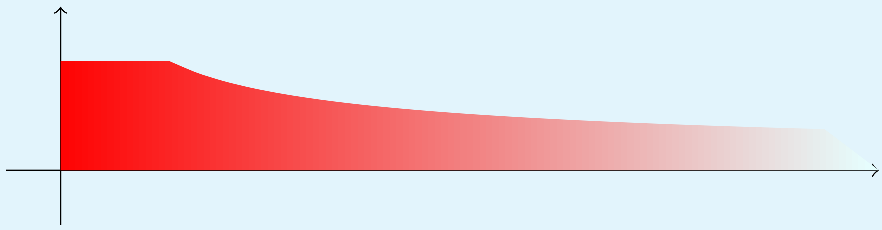
```
dblquad(f,0,4,0,4).
```

Integroimisjärjestyksen vaihto

Jos haluamme vaihtaa integroimisjärjestystä integraalissa $\int_0^1 \int_0^{\frac{1}{y^2}} \frac{yx}{1+x^2}\,dx\,dy$ *niin meidän pitää ensin todeta, että integroimisalueessa pätee* $0 < y < 1$ *ja* $0 < x < \frac{1}{y^2}$ *jolloin* $0 < x < \infty$ *ja* $y^2 < \frac{1}{x}$ *josta seuraa, että* $0 < y < \min(\frac{1}{\sqrt{x}}, 1)$. *Tästä seuraa, että* $0 < y < 1$ *kun* $0 < x < 1$ *ja* $0 < y < \frac{1}{\sqrt{x}}$ *kun* $1 \le x < \infty$. *Näin ollen saamme*

$$\int_0^1 \int_0^{\frac{1}{y^2}} \frac{xy}{1+x^2}\,dx\,dy = \int_0^1 \int_0^1 \frac{xy}{1+x^2}\,dy\,dx + \int_1^\infty \int_0^{\frac{1}{\sqrt{x}}} \frac{xy}{1+x^2}\,dy\,dx.$$

Integroimisalue näyttää suunnilleen seuraavanlaiselta:



Integroimisjärjestyksen vaihto

Jos lisäksi haluamme laskea integraalin, niin saamme

$$\int_0^1 \int_0^1 \frac{xy}{1+x^2}\,dy\,dx + \int_1^\infty \int_0^{\frac{1}{\sqrt{x}}} \frac{xy}{1+x^2}\,dy\,dx$$

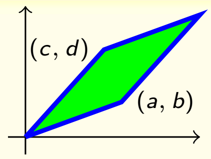
$$= \int_0^1 \Big/_0^1 \frac{1}{2}\frac{xy^2}{1+x^2}\,dx + \int_1^\infty \Big/_0^{\frac{1}{\sqrt{x}}} \frac{1}{2}\frac{xy^2}{1+x^2}\,dx = \int_0^1 \frac{1}{2}\frac{x}{1+x^2}\,dx$$

$$+ \int_1^\infty \frac{1}{2}\frac{1}{1+x^2}\,dx = \Big/_0^1 \frac{1}{4}\ln(1+x^2) + \Big/_1^\infty \frac{1}{2}\arctan(x)$$

$$= \frac{1}{4}(\ln(2) - \ln(1)) + \frac{1}{2}\left(\lim_{x\to\infty} \arctan(x) - \arctan(1)\right)$$

$$= \frac{1}{4}\ln(2) + \frac{1}{2}\left(\frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right) = \frac{1}{4}\ln(2) + \frac{\pi}{8} \approx 0{,}5659858770.$$

Muuttujien vaihto



Oletamme, että D on suunnikas, jonka kulmapisteet ovat $(0,0)$, (a,b), (c,d) ja $(a+c, b+d)$.
Jos $x = as + ct$ ja $y = bs + dt$ niin

$$x\,\mathbf{i}+y\,\mathbf{j} = s(a\,\mathbf{i}+b\,\mathbf{j})+t(c\,\mathbf{i}+d\,\mathbf{j}) \quad \textit{eli} \quad \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a & c \\ b & d \end{bmatrix} \begin{bmatrix} s \\ t \end{bmatrix} = s \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} + t \begin{bmatrix} c \\ d \end{bmatrix},$$

ja tämä on suunnikkaan sivujen $a\,\mathbf{i} + b\,\mathbf{j} = \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix}$ ja $c\,\mathbf{i} + d\,\mathbf{j} = \begin{bmatrix} c \\ d \end{bmatrix}$ lineaarikombinaatio. Tällä tavalla saamme kaikki sunnikkaan pisteet kun s ja $t \in [0,1]$ eli $(x,y) \in D$ missä $x = as + ct$ ja $y = bs + dt$ jos ja vain jos $(s,t) \in D_* = [0,1] \times [0,1]$.
Suunnikkaan pinta-ala on
$\|(a\,\mathbf{i} + b\,\mathbf{j}) \times (c\,\mathbf{i} + d\,\mathbf{j})\| = \left| \det\left(\begin{bmatrix} a & c \\ b & d \end{bmatrix} \right) \right| = |ad - bc|$ *ja neliön D_* pinta-ala on tietenkin 1.*

Muuttujien vaihto, jatk.

Jos nyt määrittelemme

$$\frac{\partial(x,y)}{\partial(s,t)} = \det\left(\begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial s} & \frac{\partial x}{\partial t} \\ \frac{\partial y}{\partial s} & \frac{\partial y}{\partial t} \end{bmatrix} \right) = \det\left(\begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} \right) = ad - bc,$$

niin näemme, että jos f on vakio niin

$$\iint_D f\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y = \iint_{D_*} f \left| \frac{\partial(x,y)}{\partial(s,t)} \right| \mathrm{d}s\,\mathrm{d}t.$$

Jos teemme (mielivaltaisen) muuttujien vaihdon $x = x(s,t)$, $y = y(s,t)$ niin saamme lineaarisella approksimoinnilla

$$x \approx x(s_0,t_0) + x_s(t_0,s_0)(s-s_0) + x_t(s_0,t_0)(t-t_0),$$
$$y \approx y(s_0,t_0) + y_s(t_0,s_0)(s-s_0) + y_t(s_0,t_0)(t-t_0),$$

josta seuraa, että kun $(s,t) \in [s_0, s_0 + \Delta s] \times [t_0, t_0 + \Delta t]$ niin saamme alueen, joka on melkein suunnikas. Sitten meidän pitää yleisessä tapauksessa laskea yhteen integraalit "suunnikkaiden" yli ja tarkistaa, että virheiden summa pysyy mielivaltaisen pienenä.

Esimerkki: Muuttujien vaihto ja $\int_0^\infty e^{-x^2}\,dx$

Olkoon $E = \int_0^\infty e^{-x^2}\,dx$. *Silloin*

$$E^2 = \left(\int_0^\infty e^{-x^2}\,dx\right)\left(\int_0^\infty e^{-x^2}\,dx\right) = \left(\int_0^\infty e^{-x^2}\,dx\right)\left(\int_0^\infty e^{-y^2}\,dy\right)$$
$$= \int_0^\infty \int_0^\infty e^{-x^2}e^{-y^2}\,dx\,dy = \int_0^\infty \int_0^\infty e^{-(x^2+y^2)}\,dx\,dy.$$

Nyt teemme muuttujien vaihdon $x = r\cos(\theta)$ *ja* $y = r\sin(\theta)$ *ja toteamme, että* $(x,y) \in (0,\infty)\times(0,\infty)$ *jos ja vain jos* $r > 0$ *ja* $\theta \in (0, \frac{1}{2}\pi)$. *Lisäksi pätee* $dx\,dy = r\,dr\,d\theta$ *ja* $x^2 + y^2 = r^2$ *joten*

$$E^2 = \int_0^{\frac{1}{2}\pi}\int_0^\infty e^{-r^2} r\,dr\,d\theta = \left(\int_0^{\frac{1}{2}\pi} 1\,d\theta\right) \Big/_0^\infty \left(-\tfrac{1}{2}e^{-r^2}\right)$$
$$= \tfrac{1}{2}\pi\tfrac{1}{2}(0-(-1)) = \tfrac{1}{4}\pi,$$

josta seuraa, että $E = \int_0^\infty e^{-x^2}\,dx = \frac{1}{2}\sqrt{\pi}$.

Pyörähdyskappaleet I

Kun käyrä $y = f(x)$, $a \le x \le b$ *tai* $\{\,(t, f(t)) : t \in [a,b]\,\}$ *pyörähtää x-akselin ympäri syntyy pyörähdyskappale joka sisältää kaikki pisteet* (x,y,z), *joille pätee että niiden etäisyys x-akselista eli* $\sqrt{y^2+z^2}$ *on korkeintaan* $|f(x)|$ *ja* $a \le x \le b$. *Voimme laskea tämän kappaleen tilavuuden sylinterikoordinaattien avulla seuraavalla tavalla:*

$$\begin{aligned} x &= x,\\ y &= r\cos(\theta),\\ z &= r\sin(\theta). \end{aligned}$$

Silloin $dx\,dy\,dz = r\,dx dr\,d\theta$ *ja integroimisrajat ovat* $a \le x \le b$, $0 \le r \le |f(x)|$, $0 \le \theta \le 2\pi$. *Näin ollen tilavuus on*

$$\int_a^b \left(\int_0^{2\pi}\left(\int_0^{|f(x)|} r dr\right) d\theta\right) dx$$
$$= \left(\int_0^{2\pi} d\theta\right)\int_a^b \left(\Big/_0^{|f(x)|} \frac{1}{2}r^2\right) dx = 2\pi\frac{1}{2}\int_a^b |f(x)|^2\,dx = \pi\int_a^b f(x)^2\,dx.$$

Pyörähdyskappaleet II

Kun x-akselin, suorien $x = a$ ja $x = b$ sekä funktion $y = f(x)$ kuvaajan rajoittama alue, missä $0 \le a \le x \le b$ ja $f(x) \ge 0$, pyörähtää y-akselin ympyrä niin syntyy pyörähdyskappale

$$\Omega = \{\, (x, y, z) : 0 \le y \le f(\sqrt{x^2 + z^2}), \quad a^2 \le x^2 + z^2 \le b^2 \,\}.$$

Tämän kappaleen tilavuuden voimme laskea seuraavanlaisten sylinterikoordinaattien avulla:

$$\begin{aligned} x &= r\cos(\theta), \\ y &= y, \\ z &= r\sin(\theta), \end{aligned}$$

jolloin $\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z = r\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}y$ *ja integroimisrajat ovat* $a \le r \le b$, $0 \le y \le f(r)$, $0 \le \theta \le 2\pi$. *Tilavuus tulee siten oleman*

$$\begin{aligned} V(\Omega) = \int_0^{2\pi} \left(\int_a^b \left(\int_0^{f(r)} r\,\mathrm{d}y \right) \mathrm{d}r\,\mathrm{d}\theta \right) &= \left(\int_0^{2\pi} \mathrm{d}\theta \right) \int_a^b rf(r)\,\mathrm{d}r \\ &= 2\pi \int_a^b xf(x)\,\mathrm{d}x. \end{aligned}$$