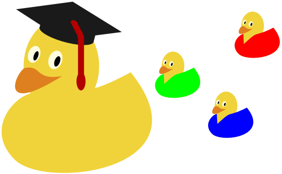
17. predavanje: Uvjetni ekstremi. Metoda najmanjih kvadrata.

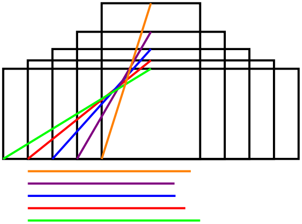
Franka Miriam Brückler

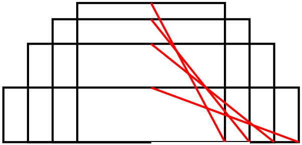


Uvjetni ekstremi

Keplerov problem bačve

Godine 1613., Johannes Kepler se u Linzu po drugi puta ženio. Za svadbu je nabavio bačvu vina, no pri kupnji mu se čudnom učinila metoda kojom je trgovac određivao cijenu vina ... Ako pretpostavimo da su bačve valjkastog oblika, koji je omjer promjera i duljine bačve koja uz istu cijenu ima najveći volumen? .





Zadatak

Riješite Keplerov problem bačve!

Problem uvjetnog ekstrema je zadatak određivanje minimuma ili maksimuma skarne funkcije $f(x, y, \ldots)$ uz jedan ili više uvjeta[1] oblika $g(x, y, \ldots) = 0$.
Jedna metoda rješavanja problema uvjetnog ekstrema je supstitucija iz uvjeta, sve dok ne eliminiramo sve uvjete i svedemo zadatak na određivanje lokalnog ekstrema funkcije s manje varijabli.

Zadatak

Nađite maksimum funkcije $f(x, y, z) = x\,y^2\,z^3$ *uz uvjet* $x + y + z = 12$ *(unutar prvog oktanta koordinatnog sustava).*

[1] Uvjeti moraju biti takvi da je ∇g različit od nulvektora za sve točke koje zadovoljavaju uvjet.

Metoda Lagrangeovih multiplikatora

Lagrangeova funkcija problema uvjetnog ekstrema

$$f(x, y, \dots) \to \min / \max$$

$$g(x, y, \dots) = 0, \dots$$

je

$$F(x, y, \dots, \lambda, \dots) = f(x, y, \dots) - \lambda \cdot g(x, y, \dots) - \dots$$

Metoda Lagrangeovih multiplikatora

Lagrangeova funkcija problema uvjetnog ekstrema

$$f(x, y, \ldots) \to \min / \max$$
$$g(x, y, \ldots) = 0, \ldots$$

je

$$F(x, y, \ldots, \lambda, \ldots) = f(x, y, \ldots) - \lambda \cdot g(x, y, \ldots) - \ldots$$

Teorem

Ako problem uvjetnog ekstrema ima rješenje u nekoj točki $(x_0, y_0, \ldots)$, onda postoje Lagrangeovi multiplikatori $\lambda_0, \ldots$ takvo da je $(x_0, y_0, \ldots, \lambda_0, \ldots)$ stacionarna točka za F.

Metoda Lagrangeovih multiplikatora

Lagrangeova funkcija problema uvjetnog ekstrema

$$f(x, y, \dots) \to \min / \max$$

$$g(x, y, \dots) = 0, \dots$$

je

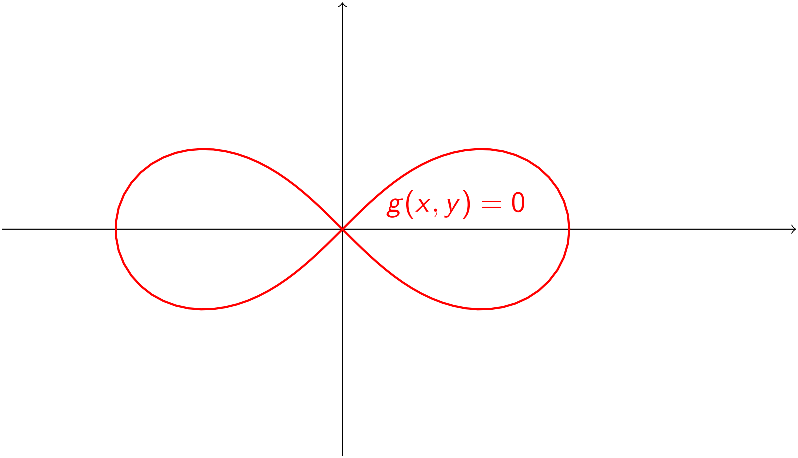
$$F(x, y, \dots, \lambda, \dots) = f(x, y, \dots) - \lambda \cdot g(x, y, \dots) - \dots$$

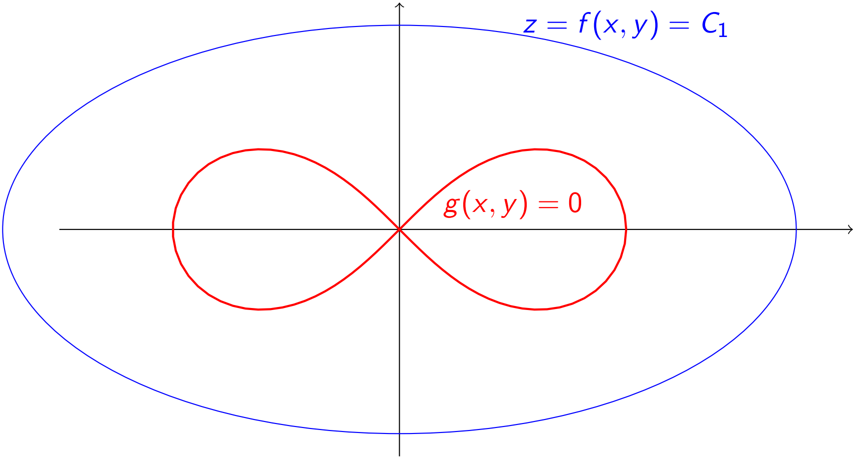
Teorem

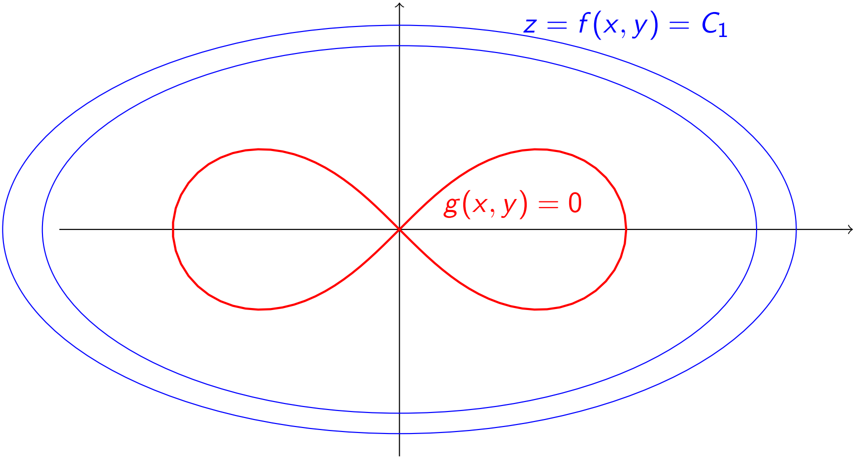
Ako problem uvjetnog ekstrema ima rješenje u nekoj točki $(x_0, y_0, \dots)$, *onda postoje Lagrangeovi multiplikatori* $\lambda_0, \dots$ *takvo da je* $(x_0, y_0, \dots, \lambda_0, \dots)$ *stacionarna točka za* F.

Zadatak

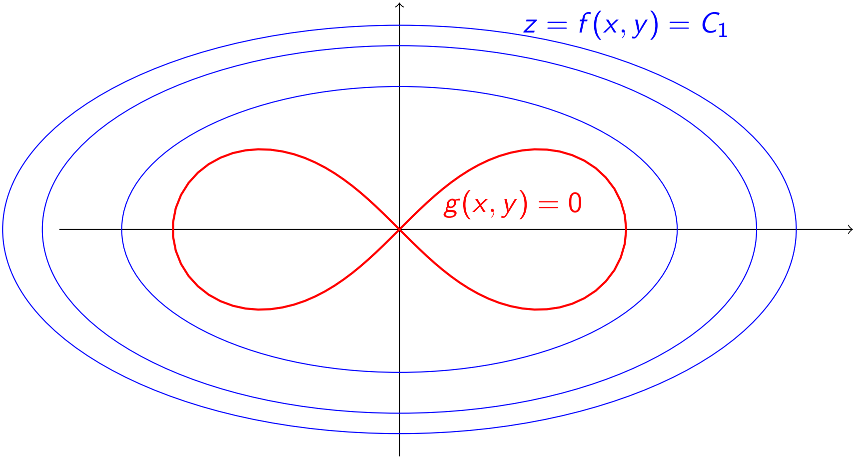
Riješite Keplerov problem bačve i ovom metodom!

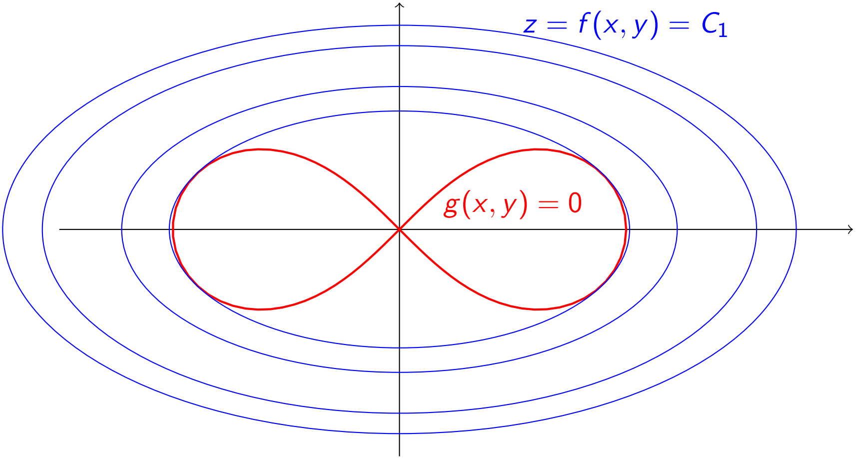

$g(x, y) = 0$


$z = f(x, y) = C_1$
$g(x, y) = 0$

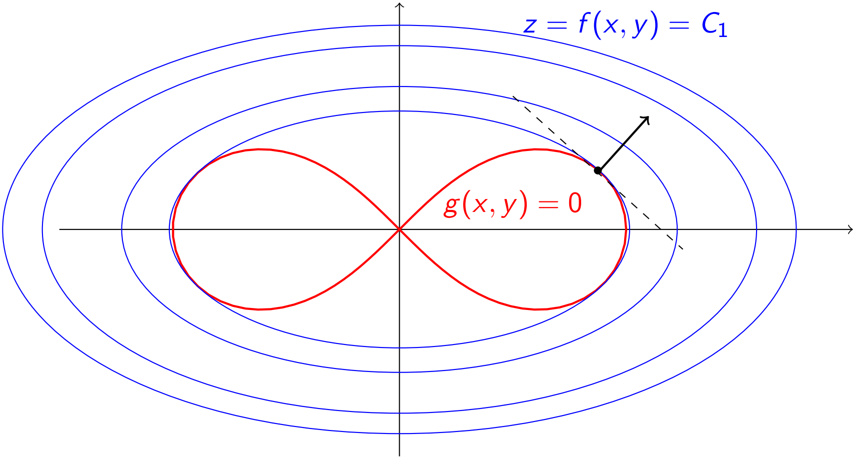


$z = f(x, y) = C_1$
$g(x, y) = 0$


$z = f(x, y) = C_1$
$g(x, y) = 0$



$z = f(x, y) = C_1$
$g(x, y) = 0$


$z = f(x,y) = C_1$
$g(x,y) = 0$

Primjer (Sekularne jednadžbe)

U fizici i fizikalnoj kemiji, primjerice Hückelovoj metodi za određivanje molekulskih orbitala, se često određuju ekstremi funkcija tipa $f(x_1, \ldots, x_n) = \sum_{i,j} c_{ij} x_i x_j$ *(kvadratne forme), uz „energetski" uvjet tipa* $\sum_i x_i^2 = 1$. *Jednadžbe koje odgovaraju određivanju stacionarne točke odgovarajuće Lagrangeove funkcije tad se nazivaju sekularnim jednadžbama.*

Zadatak

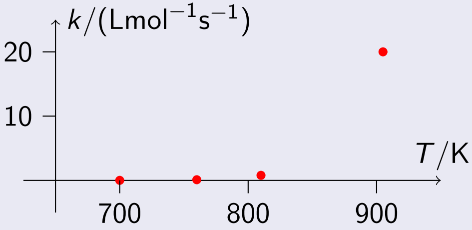
Među svim ravninama nađite jednadžbu one ravnine koja prolazi kroz točku $(3, 2, 1)$ *(u Kartezijevom koordinatnom sustavu) takvu da je volumen tetraedra omeđenog s njome i koordinatnim ravninama najmanji mogući.*

Metoda najmanjih kvadrata

Arrheniusova jednadžba

$$k = A \exp\left(-\frac{E_a}{R\,T}\right)$$

T/K	$k/(\mathrm{L}/(\mathrm{mol\,s}))$
700	0,0110
760	0,105
810	0,789
910	20,0



Koliko iznose predeskponencijalni faktor i energija aktivacije za tu reakciju? Koliko iznosi koeficijent brzine te reakcije pri temperaturi 800 K?

Problem 1: Za dani niz parova brojeva (x_i, y_i), $i = 1, \ldots, n$, traži se funkcija $y = f(x)$ (pretpostavljene vrste) takva da je ukupna greška aproksimacije što manja.

Problem 1: Za dani niz parova brojeva (x_i, y_i), $i = 1, \ldots, n$, traži se funkcija $y = f(x)$ (pretpostavljene vrste) takva da je ukupna greška aproksimacije što manja.
Problem 2: Kako za danu funkciju $y = f(x)$ opisati ukupnu grešku s obzirom na zadane parove (x_i, y_i), $i = 1, \ldots, n$?

Problem 1: Za dani niz parova brojeva (x_i, y_i), $i = 1, \ldots, n$, traži se funkcija $y = f(x)$ (pretpostavljene vrste) takva da je ukupna greška aproksimacije što manja.
Problem 2: Kako za danu funkciju $y = f(x)$ opisati ukupnu grešku s obzirom na zadane parove (x_i, y_i), $i = 1, \ldots, n$?
Ukupna greška aproksimacije:

$$E = \sum_{i=1}^{n} E_i = \sum_{i=1}^{n} (f(x_i) - y_i)^2 \to \min$$

Problem 1: Za dani niz parova brojeva (x_i, y_i), $i = 1, \dots, n$, traži se funkcija $y = f(x)$ (pretpostavljene vrste) takva da je ukupna greška aproksimacije što manja.

Problem 2: Kako za danu funkciju $y = f(x)$ opisati ukupnu grešku s obzirom na zadane parove (x_i, y_i), $i = 1, \dots, n$?

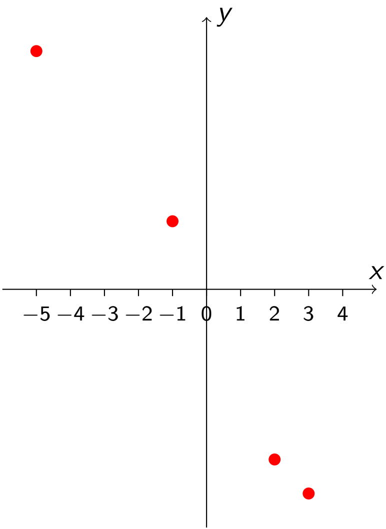
Ukupna greška aproksimacije:

$$E = \sum_{i=1}^{n} E_i = \sum_{i=1}^{n} (f(x_i) - y_i)^2 \to \min$$

Problem 3: Ako smo pretpostavili vrstu funkcije f, s nepoznatim parametrima a, b, c, ..., kako minimizirati E?

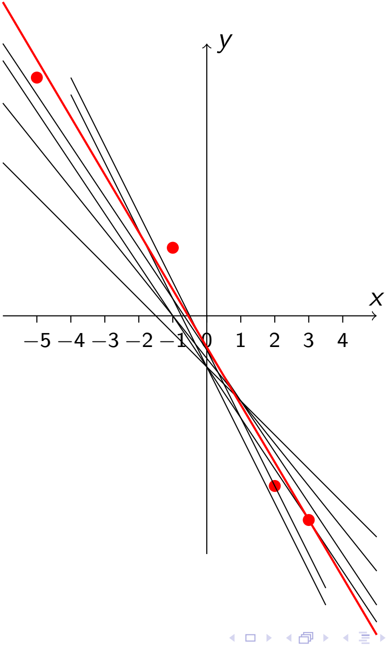
Zadatak

Odredite pravac koji najbolje aproksimira točke $(-5, 7)$, $(-1, 2)$, $(2, -5)$, $(3, -6)$.



Zadatak

Odredite pravac koji najbolje aproksimira točke $(-5, 7)$, $(-1, 2)$, $(2, -5)$, $(3, -6)$.



MNK: Aproksimacija afinom funkcijom

$$E(a, b) = \sum_{i=1}^{n} (ax_i + b - y_i)^2$$

MNK: Aproksimacija afinom funkcijom

$$E(a,b) = \sum_{i=1}^{n} (ax_i + b - y_i)^2$$

$$\frac{\partial E}{\partial a} = 2\sum_{i=1}^{n}(ax_i + b - y_i)x_i = 2\sum_{i=1}^{n} x_i^2 a + 2\sum_{i=1}^{n} x_i b - 2\sum_{i=1}^{n} x_i y_i = 0,$$

$$\frac{\partial E}{\partial b} = 2\sum_{i=1}^{n}(ax_i + b - y_i) = 2\sum_{i=1}^{n} x_i a + 2nb - 2\sum_{i=1}^{n} y_i = 0.$$

MNK: Aproksimacija afinom funkcijom

$$E(a,b) = \sum_{i=1}^{n} (ax_i + b - y_i)^2$$

$$\frac{\partial E}{\partial a} = 2\sum_{i=1}^{n}(ax_i + b - y_i)x_i = 2\sum_{i=1}^{n} x_i^2 a + 2\sum_{i=1}^{n} x_i b - 2\sum_{i=1}^{n} x_i y_i = 0,$$

$$\frac{\partial E}{\partial b} = 2\sum_{i=1}^{n}(ax_i + b - y_i) = 2\sum_{i=1}^{n} x_i a + 2nb - 2\sum_{i=1}^{n} y_i = 0.$$

$$s_{x^2} = \sum_{i=1}^{n} x_i^2; \quad s_x = \sum_{i=1}^{n} x_i$$

$$s_{xy} = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i; \quad s_y = \sum_{i=1}^{n} y_i$$

$$s_{x^2} \cdot a + s_x \cdot b = s_{xy}$$

$$s_x \cdot a + n \cdot b = s_y$$

$$s_{x^2}\cdot a + s_x \cdot b = s_{xy}$$

$$s_x \cdot a + n \cdot b = s_y$$

$$a = \frac{ns_{xy} - s_x s_y}{ns_{x^2} - s_x^2}, \quad b = \frac{s_{x^2} s_y - s_x s_{xy}}{ns_{x^2} - s_x^2}.$$

x_i	y_i	x_i^2	$x_i y_i$
$s_x =$	$s_y =$	$s_{x^2} =$	$s_{xy} =$

Ima li smisla podatke iz uvodnog primjera s Arrheniusovom jednadžbom aproksimirati pravcem?

Ima li smisla podatke iz uvodnog primjera s Arrheniusovom jednadžbom aproksimirati pravcem?

$$y = \ln \frac{A}{\mathrm{L}/(\mathrm{mol\,s})}, \quad x = \frac{1}{T}, \quad a = -\frac{E_\mathrm{a}}{R}, \quad b = \ln \frac{A}{\mathrm{L}/(\mathrm{mol\,s})}$$

Ima li smisla podatke iz uvodnog primjera s Arrheniusovom jednadžbom aproksimirati pravcem?

$$y = \ln \frac{A}{\mathrm{L/(mol\,s)}}, \quad x = \frac{1}{T}, \quad a = -\frac{E_\mathrm{a}}{R}, \quad b = \ln \frac{A}{\mathrm{L/(mol\,s)}}$$

x_i	y_i	x_i^2	$x_i y_i$
$1{,}42857 \cdot 10^{-3}$	$-4{,}50986$	$2{,}04082 \cdot 10^{-6}$	$-6{,}44266 \cdot 10^{-3}$
$1{,}31579 \cdot 10^{-3}$	$-2{,}25379$	$1{,}73130 \cdot 10^{-6}$	$-2{,}96552 \cdot 10^{-3}$
$1{,}23457 \cdot 10^{-3}$	$-0{,}23699$	$1{,}52416 \cdot 10^{-6}$	$-0{,}29258 \cdot 10^{-3}$
$1{,}09890 \cdot 10^{-3}$	$2{,}99573$	$1{,}20758 \cdot 10^{-6}$	$3{,}29201 \cdot 10^{-3}$
$s_x = 5{,}07783 \cdot 10^{-3}$	$s_y = -4{,}00482$	$s_{x^2} = 6{,}50386 \cdot 10^{-6}$	$s_{xy} = -6{,}40875 \cdot 10^{-3}$

Ima li smisla podatke iz uvodnog primjera s Arrheniusovom jednadžbom aproksimirati pravcem?

$$y = \ln \frac{A}{\mathrm{L/(mol\,s)}}, \quad x = \frac{1}{T}, \quad a = -\frac{E_\mathrm{a}}{R}, \quad b = \ln \frac{A}{\mathrm{L/(mol\,s)}}$$

x_i	y_i	x_i^2	$x_i y_i$
$1{,}42857 \cdot 10^{-3}$	$-4{,}50986$	$2{,}04082 \cdot 10^{-6}$	$-6{,}44266 \cdot 10^{-3}$
$1{,}31579 \cdot 10^{-3}$	$-2{,}25379$	$1{,}73130 \cdot 10^{-6}$	$-2{,}96552 \cdot 10^{-3}$
$1{,}23457 \cdot 10^{-3}$	$-0{,}23699$	$1{,}52416 \cdot 10^{-6}$	$-0{,}29258 \cdot 10^{-3}$
$1{,}09890 \cdot 10^{-3}$	$2{,}99573$	$1{,}20758 \cdot 10^{-6}$	$3{,}29201 \cdot 10^{-3}$
$s_x = 5{,}07783 \cdot 10^{-3}$	$s_y = -4{,}00482$	$s_{x^2} = 6{,}50386 \cdot 10^{-6}$	$s_{xy} = -6{,}40875 \cdot 10^{-3}$

$$\Delta = n s_{x^2} - s_x^2 = 2{,}31082 \cdot 10^{-7},$$

Ima li smisla podatke iz uvodnog primjera s Arrheniusovom jednadžbom aproksimirati pravcem?

$$y = \ln \frac{A}{\mathrm{L/(mol\,s)}}, \quad x = \frac{1}{T}, \quad a = -\frac{E_\mathrm{a}}{R}, \quad b = \ln \frac{A}{\mathrm{L/(mol\,s)}}$$

x_i	y_i	x_i^2	$x_i y_i$
$1{,}42857 \cdot 10^{-3}$	$-4{,}50986$	$2{,}04082 \cdot 10^{-6}$	$-6{,}44266 \cdot 10^{-3}$
$1{,}31579 \cdot 10^{-3}$	$-2{,}25379$	$1{,}73130 \cdot 10^{-6}$	$-2{,}96552 \cdot 10^{-3}$
$1{,}23457 \cdot 10^{-3}$	$-0{,}23699$	$1{,}52416 \cdot 10^{-6}$	$-0{,}29258 \cdot 10^{-3}$
$1{,}09890 \cdot 10^{-3}$	$2{,}99573$	$1{,}20758 \cdot 10^{-6}$	$3{,}29201 \cdot 10^{-3}$
$s_x = 5{,}07783 \cdot 10^{-3}$	$s_y = -4{,}00482$	$s_{x^2} = 6{,}50386 \cdot 10^{-6}$	$s_{xy} = -6{,}40875 \cdot 10^{-3}$

$$\Delta = n s_{x^2} - s_x^2 = 2{,}31082 \cdot 10^{-7},$$

$$a = \frac{n s_{xy} - s_x s_y}{\Delta} = -22932{,}14036, \quad b = \frac{s_{x^2} s_y - s_x s_{xy}}{\Delta} = 28{,}1101045$$

Ima li smisla podatke iz uvodnog primjera s Arrheniusovom jednadžbom aproksimirati pravcem?

$$y = \ln \frac{A}{\mathrm{L/(mol\,s)}}, \quad x = \frac{1}{T}, \quad a = -\frac{E_\mathrm{a}}{R}, \quad b = \ln \frac{A}{\mathrm{L/(mol\,s)}}$$

x_i	y_i	x_i^2	$x_i y_i$
$1{,}42857 \cdot 10^{-3}$	$-4{,}50986$	$2{,}04082 \cdot 10^{-6}$	$-6{,}44266 \cdot 10^{-3}$
$1{,}31579 \cdot 10^{-3}$	$-2{,}25379$	$1{,}73130 \cdot 10^{-6}$	$-2{,}96552 \cdot 10^{-3}$
$1{,}23457 \cdot 10^{-3}$	$-0{,}23699$	$1{,}52416 \cdot 10^{-6}$	$-0{,}29258 \cdot 10^{-3}$
$1{,}09890 \cdot 10^{-3}$	$2{,}99573$	$1{,}20758 \cdot 10^{-6}$	$3{,}29201 \cdot 10^{-3}$
$s_x = 5{,}07783 \cdot 10^{-3}$	$s_y = -4{,}00482$	$s_{x^2} = 6{,}50386 \cdot 10^{-6}$	$s_{xy} = -6{,}40875 \cdot 10^{-3}$

$$\Delta = n s_{x^2} - s_x^2 = 2{,}31082 \cdot 10^{-7},$$

$$a = \frac{n s_{xy} - s_x s_y}{\Delta} = -22932{,}14036, \quad b = \frac{s_{x^2} s_y - s_x s_{xy}}{\Delta} = 28{,}1101045$$

$$E_\mathrm{a} = -R\,a = 1{,}91 \cdot 10^5 \,\frac{\mathrm{J}}{\mathrm{mol}}, \quad A = 1{,}61 \cdot 10^{12} \,\frac{\mathrm{L}}{\mathrm{mol\,s}}$$