Harjoitus 5: Symbolinen laskenta I (Mathematica)

MS-C2107 Sovelletun matematiikan tietokonetyöt 2022

Aalto University
School of Science

Systems
Analysis Laboratory

Harjoituksen aiheita

- Tutustuminen Mathematica-ohjelmistoon
- Mathematican sisäänrakennettujen funktioiden käyttö
- Yhtälöiden ratkaiseminen Mathematicalla
- Derivointi Mathematicalla
- Mathematican graafiikkatulostukset

Osaamistavoitteet

- Osaat Mathematican käytön perusteet
- Osaat derivoida lausekkeita ja ratkaista yhtälöitä Mathematicalla

Mathematica

- Laskentaohjelmat on perinteisesti jaettu numeerisiin (esim. Matlab) ja symbolisiin (esim. Mathematica) ohjelmiin.
  - Raja on kuitenkin hämärtynyt: monilla ohjelmilla voi nykyään laskea sekä symbolisesti että numeerisesti.
- Mathematica on ohjelmisto, joka pystyy sekä symboliseen että numeeriseen laskentaan.

Mathematican rakenne

- Mathematica koostuu kahdesta osasta:
  - Kernel: Laskennan suorittava osa
  - Front end: Ohjelman käyttöliittymä (vaihtelee käyttöympäristön mukaan)
- Yleisin käyttöliittymä on muistikirjapohjainen:
  - Istunnosta muodostuu tallennettava dokumentti (muistikirja).
  - Muistikirjoja voi olla avoinna useampia samanaikaisesti.
  - Muistikirjassa voidaan muokata ja ajaa syötteitä ja siihen tulostuu myös ohjelman tulokset.
  - Myös tekstin lisääminen on mahdollista: ohjelmalla voidaan tuottaa myös dokumentteja (esim. html-muotoon).
- Myös tekstipohjainen käyttöliittymä on olemassa.

Komentojen syöttäminen 1/2

- Mathematicassa syötteet kirjoitetaan joko
  - tekstipohjaisesti suoraan muistikirjaan
  - palettien avulla (graafiset ikonit): File → Palettes
- Muistikirja koostuu soluista. (Merkitty muistikirjan oikeassa laidassa olevilla hakasilla).
- Solun sisällä Enter vaihtaa rivin, jolloin voidaan syöttää useampi komento peräkkäin. Komentojen kirjoittaminen samaan soluun on hyvää tyyliä ja vähentää virheitä Mathematicassa!
- Shift+Enter ajaa kaikki solussa olevat komennot. Tämä vastaisi Matlabissa m-tiedoston ajoa.
- Kaikki ohjelman tulokset (myös grafiikka) tulostetaan syötesolun jälkeiseen soluun.
- Tulostuksen voi estää lisäämällä puolipiste (;) syötteen perään.

Komentojen syöttäminen 2/2

- Standardifunktioiden ja -vakioiden nimet alkavat isolla kirjaimella. Esim. `Solve`, `Sin`, `Pi`.
  - Sekaannuksien välttämiseksi tulee omat muuttujat nimetä eri nimisiksi kuin sisäänrakennetut funktiot ja aloittaa ne pienellä kirjaimella.
- Funktioiden argumentit tulevat hakasuluissa `[ ]`. Esim. `Sqrt[x]`
  - Jos funktiolla on vain yksi argumentti, voidaan funktio kirjoittaa myös `//` -merkkien jälkeen. Esim. `x // Sqrt`.
- Kaarisuluilla `( )` osoitetaan ainoastaan laskujärjestys.
  - Esim. `sin(x)` on muuttuja `sin` kertaa muuttuja `x`.

Opastustoiminnot

- Tietoa mistä tahansa Mathematican komennosta saat kysymysmerkillä. Esim. `?Solve`

```
In[1]:= ?Solve
Solve[expr,vars] attempts to solve the system expr of equations
or inequalities for the variables vars...
```

- Kahdella kysymysmerkillä saat tietoa myös komennon optioista
  - Esim. `??Plot`, kokeile myös `Options[Plot]`
- Kysymysmerkkiä voidaan käyttää myös muiden kuin funktioiden yhteydessä.
  - Esim. `?=` antaa tietoa sijoitusoperaattorin `=` käytöstä.
- Mathematicassa on myös kattava Help Browser (Help-valikko → Help), josta löytyy myös paljon esimerkkejä komentojen käytöstä.

Sijoitusoperaattori =

- = asettaa muuttujalle arvon.

```
In[1]:= la = x+y
Out[1]= x + y
In[2]:= la
Out[2]= x + y
In[3]:= x = 7
Out[3]= 7
In[4]:= la
Out[4]= 7 + y
In[5]:= y = k
Out[5]= k
```

```
In[6]:= la
Out[6]= 7 + k
In[7]:= x
Out[7]= 7
In[8]:= y
Out[8]= k
In[9]:= y = 3
Out[9]= 3
In[10]:= la
Out[10]= 10
```

Muuttujien poistaminen

- Muuttujan voi poistaa muistista komennolla `Clear[muuttuja]`.
  - Useamman muuttujan poistaminen: `Clear[muuttuja1,muuttuja2]`.
  - Kaikkien muuttujien poistaminen: `ClearAll["Global‘*"]`
- Monet virhetilanteet johtuvat siitä, että symbolille on jäänyt voimaan jokin määrittely, esim. ”`x=7`”, minkä seurauksena esimerkiksi seuraava yhtälön ratkaisuyritys x:n suhteen ei toimi:

```
In[37]:= Solve[x+1==0,x]
General::ivar: 7 is not a valid variable.
Out[37]= Solve[False, 7]
```

Listat

- Mathematicassa vektorit ja matriisit esitetään listoina.
- Listat muodostetaan aaltosulkuja `{ }` käyttämällä.
  - Lista on muotoa `{alkio1, alkio2, ...}`
- Listan alkio voi olla melkein mitä tahansa, vaikkapa yksittäinen luku tai lista.
  - Esim. listassa `{{7,5,9},4}` on kaksi alkiota, `{7,5,9}` ja `4`. Ensimmäinen alkio on lista, jossa on kolme alkiota: `7`, `5` ja `9`. Toinen alkio on tavallinen luku.
- Listan alkioon i viitataan notaatiolla `{...}[[i]]`.

Listaan viittaukset 1/3

```
In[92]:= a={{7,5,9},4}
Out[92]= {{7, 5, 9}, 4}
In[93]:= b=a[[1]]
Out[93]= {7, 5, 9}
In[94]:= b[[2]]
Out[94]= 5
```

- Listan alkiossa i olevan listan alkioon j voidaan viitata notaatiolla `{...}[[i,j]]`.

```
In[95]:= a={{7,5,9},4}
Out[95]= {{7, 5, 9}, 4}
In[96]:= a[[1,2]]
Out[96]= 5
```

Listaan viittaukset 2/3

- Samalla notaatiolla voidaan viitata mm. symbolien `+`, `-`, jne., sekä `->` erottamiin alkioihin:

```
Out[118]= yhtalo=-6 + x + y
In[119]:= yhtalo[[2]]
Out[119]= x
In[120]:= ratkaisu=Solve[x+y==3*z,x]
Out[120]= {{x -> -y + 3 z}}
In[121]:= ratkaisu[[1]]
Out[121]= {x -> -y + 3 z}
In[122]:= ratkaisu[[1,1]]
Out[122]= x -> -y + 3 z
In[123]:= ratkaisu[[1,1,2]]
Out[123]= -y + 3 z
```

Listaan viittaukset 3/3

- Edellinen esimerkki yksinkertaisemmin:

```
In[124]:= Solve[x+y==3*z,x][[1,1,2]]
Out[124]= -y + 3 z
```

- Huom! Symbolit `->` ja `+` eivät ole samanarvoisia erottimia, Out[124] olisi muuten ”-y”.
- ”-y”:n saa vasta komennolla `Solve[x+y==3*z,x][[1,1,2,1]]`

Korvausoperaattori `/.`

- Muuttujan arvo korvataan tilapäisesti muutossäännöllä:
  - `muuttuja-> arvo`
- Listanotaatio korvattaessa useampia muuttujia:
  - `{muuttuja1->arvo1,muuttuja2->arvo2}`

```
In[11]:= a+b
Out[11]= a + b
In[12]:= a+b /. {a->5,b->z}
Out[12]= 5 + z
In[13]:= a
Out[13]= a
In[14]:= b
Out[14]= b
In[15]:= lb = a+b
Out[15]= a + b
```

```
In[16]:= lb /. {a->6,b->k}
Out[16]= 6 + k
In[17]:= lb
Out[17]= a + b
In[18]:= lb /. {a->2,b->3}
Out[18]= 5
In[19]:= lb
Out[19]= a + b
```

Funktioiden määritteleminen

- Funktioita määritellään ja käytetään seuraavan esimerkin mukaisesti

```
In[142]:= f[x_,y_]=x^2*y+a
Out[142]= x^2*y+a
In[143]:= f[2,a]
Out[143]= 5a
```

- Funktioita käyttämällä voidaan välttää mutkikkaiden viittausten ja korvausoperaatioiden tarvetta

Derivointi ja yhtälöryhmien ratkominen

- Komennolla `D` saat (osittais)derivaatan halutun muuttujan suhteen. Voit luoda derivoitavan funktion erikseen tai kirjoittaa derivoitavan lausekkeen derivaattakomennon sisään.
- Huom! Tässä esimerkissä syötämme kaksi komentoa soluun. Ekan perässä on puolipiste, joten se ei tulostu.

```
In[1]:= f[x_]=3 x^2 + 2;
        D[f[x],x]
Out[2]= 6x
```

- Samalla komennolla saat joko derivaatan tai gradientin:

```
In[3]:=g[x_, y_]= x^2 + 2 y^2;
       D[g[x, y], y]
       D[g[x, y], {{x, y}}]
Out[4]=4y
Out[5]={2x, 4y}
```

Vertailuoperaattori (`==`) 1/2

```
In[6]:= a=3
Out[6]= 3
In[7]:= a==3
        a==4
Out[7]= True
Out[8]= False
```

- Yhtälöitä ja yhtälöryhmiä voidaan ratkaista `Solve`-komennolla. Numeerinen ratkaisu onnistuu komennolla `NSolve`.
- Esim.

```
In[58]:= Solve[{x+1==c,c==2x-2},{x,c}]
Out[58]= {{x -> 3, c -> 4}}
```

Vertailuoperaattori (==) 2/2

- Huomaa mikä sotku voi seurata yhdestä pienestä kirjoitusvirheestä ("c=2", kun pitäisi olla "c==2"):

```
In[48]:= Solve[{x+1==c,c=2},{x,c}]
General::ivar: 2 is not a valid variable.
Out[48]= Solve[{1 + x == c, 2}, {x, 2}]
In[49]:= Solve[{x+1==c,c==2},{x,c}]
General::ivar: 2 is not a valid variable.
Out[49]= Solve[{1 + x == 2, True}, {x, 2}]
In[50]:= c
Out[50]= 2
In[51]:= Clear[c]
In[52]:= Solve[{x+1==c,c==2},{x,c}]
Out[52]= {{x -> 1, c -> 2}}
```

Edellisiin tulostuksiin viittaaminen (%)

- Edelliseen tulostukseen viittaus: `%`, sitä edelliseen: `%%`, jne., tulostukseen n (Out[n]): `%n`.

```
In[85] = 13 + x - x (x - y) + 7 y
       = % /. {x->3,y->1}
Out[85]= 13 + x - x (x - y) + 7 y
Out[86]= 17
In[87]:= % + 3
Out[87]= 20
In[88]:= %85 /. {x->1,y->7}
Out[88]= 69
```

- Viittaukset ovat käteviä lähinnä solujen sisällä. Monesti on kuitenkin selvempää tallentaa tulokset muuttujiin.

Lausekkeiden muokkaaminen

- Mathematicassa on paljon eri komentoja lausekkeiden muokkaamiseen.
  - Käyttötarkoituksesta riippuu, mikä muoto on kulloinkin paras.
- Joitakin komentoja:
  - `Simplify` ja `FullSimplify`: Lausekkeen sievennys
  - `Expand` ja `ExpandAll`: Kerrotaan auki tulot ja positiiviset kokonaislukupotenssit.
  - `Factor`: Tekijöihin jako
  - `Apart`: Osamurtokehitelmä
  - `Normal`: Muuttaa lausekkeen ”tavalliseen”muotoon useista eri muodoista. Esim. virhearvion poistaminen.

Tarkat arvot ja likiarvot

- Tarkkoja esityksiä: Kokonaisluvut ja murtoluvut, sekä symbolisessa muodossa esitetyt vakiot, esim. π, $\sqrt{2}$.
- Likiarvoja: desimaaliluvut
- Mathematica esittää tulokset symbolisessa muodossa (tarkkoina arvoina), jos lausekkeen kaikki arvot ovat tarkkoja.
  - Esim. komennot `Pi/4` ja `Pi*0.25` antavat eri tuloksen!
  - Tästä syystä kannattaa aina käyttää tarkkoja arvoja ja laskea likiarvot vasta lopuksi, jos se on tarpeellista.
- Likiarvoja saadaan komennolla `N`. Esim. `N[Pi]`.

Hyödyllisiä esimerkkejä 1/2

- %-viittaus voi säästää kirjoitusvaivaa. Halutuaan ratkaista yhtälöpari ja sijoittaa ratkaisu yhtälöön `2x+c`

```
In[131]:= yhtalo = 2*x + c;
          Solve[{x+c==3,x-2c==-3},{x,c}]
          yhtalo /. %[[1]]
Out[132]= {{x -> 1, c -> 2}}
Out[133]= 4
```

- Liian pitkän rivin voi katkaista painamalla <Enter>. Toiselle riville jatkuvan tekstin tulee olla sulkujen sisällä

```
In[138]:= Plot[{Sin[x],Cos[x]},{x,-Pi,Pi},GridLines->
          Automatic, PlotLabel->"Sini ja cosini"]
Out[138]= -Graphics-
```

Hyödyllisiä esimerkkejä 2/2

- Kertolasku (huomaa: ”`xy`” on yksi symboli, ”`x y`” on sama kuin ”`x*y`”):

```
In[142]:= 4*x + 5y - x y - 3x + xy
          4*x + 5y - x y - 3x + x y
Out[142]= x + xy + 5 y - x y
Out[143]= x + 5 y
```

- Matriisien kertolasku (pistetulo) (`.`)
  - Huom! `*` operaattori kertoo matriisit alkioittain.

```
In[144]:= A.B
```

Tehtävä A: Tutustuminen Mathematicaan

Aloita komennolla `ClearAll["Global‘*"]}`, jotta alustuksen aikana tallennetut muuttujat pyyhkiytyvät. Tämän komennon ‘-hipsukan saat painamalla shift + backspacen vasemmalla puolella oleva näppäin.

Tee alusta alkaen käyttäen soluja mahdollisimman paljon.

1. Luo muutama matriisi, esim. `A={{1,2,3},{4,5,6},{7,8,9}}` ja `B={{a,b,c},{a,b,c},{a,b,c}}`. Kokeile matriisien yhteen- ja kertolaskua sekä alkioittain kertolaskua. Määrittele matriisit ja anna komennot samassa solussa.

2. Tutustu seuraaviin Mathematica-komentoihin: Clear, MatrixForm; Exp, Series, Normal, Range, N, Abs, Sqrt, Sin, Log, Simplify; D, Plot, Plot3D
   - Tutustumiseen pääset alkuun kokeilemalla näitä komentoja `?Clear`, `MatrixForm[A]`,

`?Series`, `Series[Exp[x], {x,0,5}]`,

`Normal[Series[Exp[x], {x,0,5}]]`,

`?N`, `N[Pi]`, `N[Pi,11]`

✍ Mitä tekee komento `Series[Sin[x],{x,0,3}]`? Miten tulostus muuttuu, jos `Series` laitetaan komentoon `Normal`.

✍ Kuinka saat esille piin likiarvon kahdenkymmenen merkitsevän numeron tarkkuudella?

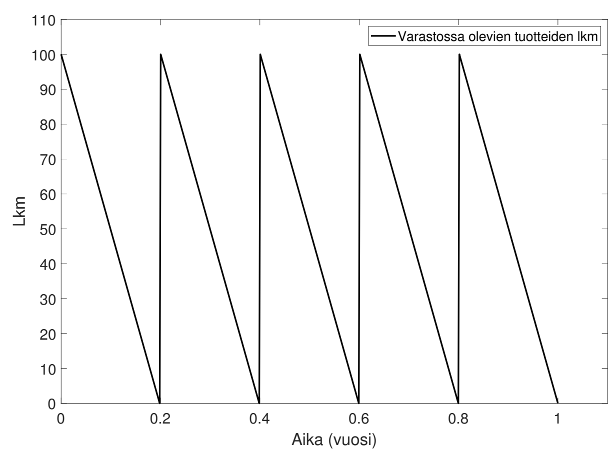
✍ Miten ratkaiset funktion $f(x) = x^2 + 3x - 5$ nollakohdan Mathematicassa?

🖩 Liitä vastauksiisi kuva, johon on piirretty sinifunktion ja sen viidennen asteen Taylor-approksimaation kuvaaja välillä $-2\pi \leq x \leq 2\pi$ sekä ruudukko. Anna kuvan otsikoksi oma nimesi.

Tehtävä B: EOQ-malli

Erään varastoitavan tuotteen kysyntä on D yksikköä vuodessa. Varastoa täydennettäessä tilauskustannus on C_1 per tilauskerta. Varastointikustannus on C_2 per varastossa oleva yksikkö per vuosi. Olkoon Q kerrallaan tilattavien yksiköiden lukumäärä.

Kuvassa esimerkki varaston toiminnasta. Siinä näkyy varastoitavan tuotteen lukumäärä varastossa ajan funktiona. Esimerkin varastolla kysyntä D on 500 ja kerralla tilattavien tuotteiden määrä Q on 100.



Tehtävä B: EOQ-malli

- ✍ Mikä funktio kuvaa kokonaiskustannuksia EOQ-mallissa?

  Vinkki: Tot. cost $= C_1 \times$ tilausten lkm. $+ C_2 \times$ kesk. varasto. Mieti mikä on tilausten lkm ja keskimääräinen varasto!

- ✍ Mikä on optimaalinen tilauskoko?
- ✍ Mikä on optimaalinen tilauskertojen lukumäärä?
- ✍ Kuinka suuret ovat tällöin kokonaiskustannukset?

Vinkki: Mistä löydät funktion ääriarvot?

Tehtävä C: Rosenbrockin banaanilaakso

Tarkastellaan funktiota

$$f(x_1, x_2) = 100 \cdot (x_2 - x_1^2)^2 + (a - x_1)^2 \tag{1}$$

missä a on vakioparametri.

✍ Millä x_1:n ja x_2:n arvoilla funktio minimoituu ja mikä on funktion arvo minimipisteessä, kun a on tuntematon vakio?

Vinkit: Luo funktio. Minimipiste löytyy gradientin nollakohdasta.

🖩 Muodosta 3D-pinta funktiosta minimipisteen läheisyydessä, kun $a = 1$. Lisää kuva palautukseesi.

Vinkki: Kuvan saat komennolla `Plot3D`.

Kotitehtävä 1: Mathematican sovelluksia

- Valitse ja katso yksi video verkkosivulta
  http://www.wolfram.com/mathematica/customer-stories/

✍ Mikä oli videolla esitetelty Mathematican sovellus? Miksi Mathematica nähtiin hyödylliseksi?

✍ Miten voit hyötyä Mathematicasta tämän kurssin ulkopuolella?

Kotitehtävä 2: Kokonaisdifferentiaalin laskeminen

Kun fysikaalinen suure F ei ole suoraan mitattavissa, mitataan suureiden $x_1, ..., x_n$ arvot ja lasketaan suureelle F arvo kaavalla $F(x_1, ..., x_n)$. Usein suureen F arvoon liittyvät virherajat lasketaan kaavalla

$$\Delta F = |\frac{\partial F}{\partial x_1}|\Delta x_1 + |\frac{\partial F}{\partial x_2}|\Delta x_2 + ... \tag{2}$$

missä Δx_i on mittauksen x_i keskivirhe ja $\frac{\partial F}{\partial x_i}$ on F:n osittaisderivaatta x_i:n suhteen.

Kotitehtävä 2: Kokonaisdifferentiaalin laskeminen

1. Laske virhearvio linssin polttovälille, kun polttoväli saadaan kaavalla $f = \frac{ab}{a+b}$, jossa a on esineen etäisyys ja b kuvan etäisyys. Ohje: Laske ensin f:n gradientti käyttämällä komentoa D. Ota vastauksesta itseisarvo. Virhearvion saat ottamalla pistetulon saadusta listasta ja parametrien a ja b keskivirheistä.

✍ Mikä on virhearvion analyyttisen lauseke?

Vinkit: Tee virhemuuttujista lista ja ota tästä listasta ja polttovälin gradientin itseisarvosta pistetulo. Käytä `Simpilfy` -komentoa tuloksen sieventämiseksi.

✍ Sijoita lausekkeen mittaustulokset $a = 85 \pm 1$ mm ja $b = 196 \pm 2$ mm. Mitä saat polttoväliksi ja sen virherajoiksi?

⌨ Liitä laatimasi Mathematica-koodi vastauksiin.

Kotitehtävä 2: Kokonaisdifferentiaalin laskeminen

2. Haluat seuraavaksi mitata ympyräsektorin muotoisen tontin pinta-alan $A(r,\phi) = \frac{\phi}{2\pi}\pi r^2$, siten että virheen suuruus on korkeintaan 0,5m^2. Pystyt mittaamaan kulman teodoliitillä tarkkuudella ± 0.01 astetta. Kuinka tarkasti tontin säde on pystyttävä mittaamaan, jotta virhe pysyy annetuissa rajoissa? Ohje: Laske kokonaisdifferentiaali r:n ja ϕ:n suhteen ja ratkaise virhearvion lauseke. Ratkaise Solve-komentoa käyttämällä lausekkesta Δr:n.

✍ Mikä on Δr:n analyyttinen lauseke?

Huom! älä sijoita mitään arvoja analyyttistä lauseketta ratkaistessasi.

✍ Tiedetään, että $r \approx 50$m, $\phi \approx 2\pi/3$ ja pinta-alan virhe ΔA saa olla enintään 0.5m^2. Kuinka suuri Δr saa suurimmillaan olla?

Huomioi, että tehtävänannosta löytyy sekä radiaaneja, että asteita. Käytä samaa yksikköä arvoja sijoittaessasi ja ole tarkkana, että dimensiot menevät muutenkin oikein. Yksinkertaisinta lienee käyttää radiaaneja.

Liitä vastauksiin käyttämäsi Mathematica-koodi.