MS-A0201
Differentiaali- ja integraalilaskenta 2 (TFM)
Luento 7: Lagrangen kertojat. Pienimmän neliösumman menetelmä.

Harri Hakula

Matematiikan ja systeemianalyysin laitos[1]
Aalto-yliopisto

Kevät 2021

[1] Perustuu Antti Rasilan luentomonisteeseen vuodelta 2015 sekä Jarmo Malisen versioon vuodelta 2017.

Lagrangen kertojat 1/3

Usein optimointitehtävissä halutaan asettaa rajoitusehtoja optimoitaville muuttujille.

- Tyypillinen esimerkki tällaisesta tehtävästä on peltipurkin muodon optimointi: Halutaan minimoida purkin pinta-ala (eli käytetty materiaali) $A(h,r) = 2\pi rh + 2\pi r^2$ niin, että tilavuus $V(r,h) = \pi r^2 h$ on vakio.
- Duaalitehtävä: Halutaan maksimoida purkin tilavuus $V(r,h)$ siten, että pinta-ala $A(h,r)$ on vakio.
- Primaali- ja duaalitehtävillä on sama ratkaisu. Tämän sanoo maalaisjärkikin, mutta itse asiassa ratkaisuun johtavat yhtälötkin ovat (olennaisesti) samoja.

Lagrangen kertojat 2/3

"Minimoi $f(x,y)$ ehdolla $g(x,y)=0$."

- Havaitaan, että mikäli ongelmalla on ratkaisu, niin ratkaisupisteessä (a,b) vektorien ∇f ja ∇g on oltava joko yhdensuuntaisia tai vastakkaissuuntaisia (mikäli $\nabla g(a,b) \neq 0$).
- Miksi? Koska muussa tapauksessa funktiolla f olisi nollasta poikkeva suunnattu derivaatta käyrän $g(x,y)=0$ tangentin suuntaan pisteessä (a,b), ja siis minimi ei voi olla pisteessä (a,b).
- Entä jos tehtävänä olisi maksimoida $f(x,y)$ ehdolla $g(x,y)=0$?
- Entä jos tehtävänä olisi maksimoida $g(x,y)$ ehdolla $f(x,y)=c$?

Lagrangen kertojat 3/3

- Mikäli optimipiste on olemassa, se on Lagrangen funktion

$$L(x, y, \lambda) = f(x, y) + \lambda g(x, y)$$

  kriittinen piste (eli gradientin nollakohta).

- Menetelmä yleistyy myös useammalle muuttujalle. Esimerkiksi kolmen muuttujan tapauksessa Lagrangen funktio on

$$L(x, y, z, \lambda, \mu) = f(x, y, z) + \lambda g(x, y, z) + \mu h(x, y, z),$$

  missä f on minimoitava funktio ja rajoite-ehdot ovat $g(x, y, z) = 0$ sekä $h(x, y, z) = 0$.

Esimerkki 1 1/2

Minimoidaan funktio $f(x, y) = x^2 + y^2$ ehdolla $g(x, y) = x^2 y - 16 = 0$.

- Muodostetaan Lagrangen funktio

$$L(x, y, \lambda) = x^2 + y^2 + \lambda(x^2 y - 16).$$

- Yhtälöt kriittisille pisteille ovat

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial L}{\partial x} = 2x(1 + \lambda y), \\ 0 &= \frac{\partial L}{\partial y} = 2y + \lambda x^2, \\ 0 &= \frac{\partial L}{\partial \lambda} = x^2 y - 16, \end{aligned}$$

joista viimeinen on aina itse rajoitusehto.

Esimerkki 1 2/2

- Ensimmäisestä yhtälöstä saadaan $x = 0$ tai $\lambda y = -1$, mutta $x = 0$ on ristiriidassa kolmannen yhtälön kanssa.
- Siten toisesta yhtälöstä

$$0 = 2y^2 + \lambda y x^2 = 2y^2 - x^2.$$

- Tästä saadaan edelleen $x = \pm\sqrt{2}y$, ja $2y^3 = 16$ eli $y = 2$.
- Ääriarvoja (mahdollisia minimejä) on siis kaksi $(x, y) = (\pm 2\sqrt{2}, 2)$. Pitää selvittää muilla keinoin, ovatko minimejä vai maksimeja.

Esimerkki 2

Yritetään etsiä Lagrangen kertojien menetelmällä funktion $f(x,y) = y$ minimi ehdolla $g(x,y) = y^3 - x^2 = 0$.

- Selvästi nähdään, että minimi $f(x,y) = 0$ saavutetaan pisteessä $(0,0)$.
- Muodostetaan Lagrangen funktio

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

- Saadaan yhtälöt

$$-2\lambda x = 0, \quad 1 + 3\lambda y^2 = 0, \text{ ja } y^3 - x^2 = 0.$$

- Nämä yhtälöt ovat keskenään ristiriidassa, joten ratkaisua niille ei ole.
- Huomaa, että $\nabla g(0,0) = \mathbf{0}$ minimipisteessä.
- Tästä nähdään, Lagrangen kertojat näkevät ääriarvoja vain pisteissä, joissa $\nabla g(0,0) \neq \mathbf{0}$.

Esimerkki 3 1/4

Etsitään ääriarvot funktiolle $f(x, y, z) = xy + 2z$ ehdoilla $x + y + z = 0$ ja $x^2 + y^2 + z^2 = 24$.

- Koska f on jatkuva ja annettujen leikkausjoukkojen leikkaus on ympyräviiva (eli rajoitettu ja suljettu joukko), niin ääriarvot ovat olemassa.
- Muodostetaan Lagrangen funktio

$$L(x, y, z, \lambda, \mu) = xy + 2z + \lambda(x + y + z) + \mu(x^2 + y^2 + z^2 - 24).$$

Esimerkki 3 2/4

- Lagrangen funktion osittaisderivaatoista saadaan yhtälöt

$$
\begin{aligned}
y + \lambda + 2\mu x &= 0, \\
x + \lambda + 2\mu y &= 0, \\
2 + \lambda + 2\mu z &= 0, \\
x + y + z &= 0, \ \text{ja} \\
x^2 + y^2 + z^2 - 24 &= 0.
\end{aligned}
$$

- Kahden ensimmäisen yhtälön erotus johtaa yhtälöön $(x - y)(1 - 2\mu) = 0$, joten joko $\mu = 1/2$ tai $x = y$. Tutkitaan molemmat tapaukset.

Esimerkki 3 3/4

- **Tapaus I** ($\mu = 1/2$): Toisen ja kolmannen yhtälön perusteella

$$x + \lambda + y = 0 \text{ ja } 2 + \lambda + z = 0, \text{ siis } x + y = 2 + z.$$

- Neljännestä yhtälöstä saadaan $z = -1$ ja $x + y = 1$. Viimeisen yhtälön perusteella $x^2 + y^2 = 24 - z^2 = 23$.
- Koska $x^2 + y^2 + 2xy = (x + y)^2 = 1$, saadaan $2xy = 1 - 23 = -22$ ja $xy = -11$.
- Nyt $(x - y)^2 = x^2 + y^2 - 2xy = 23 + 22 = 45$, joten $x - y = \pm 3\sqrt{5}$.
- Yhdessä yhtälön $x + y = 1$ tästä saadaan kaksi kriittistä pistettä

$$P_1 = \big((1+3\sqrt{5})/2, (1-3\sqrt{5})/2, -1\big) \text{ ja } P_2 = \big((1-3\sqrt{5})/2, (1+3\sqrt{5})/2, -1\big).$$

- Kummassakin pisteessä $f(x, y, z) = -11 - 2 = -13$.

Esimerkki 3 4/4

- **Tapaus II** ($x = y$): Neljännestä yhtälöstä nähdään, että $z = -2x$, ja viimeisen yhtälön perusteella $6x^2 = 24$ eli $x = \pm 2$.
- Näin ollen, kriittiset pisteet ovat

$$P_3 = (2, 2, -4) \text{ ja } P_4 = (-2, -2, 4).$$

- Saadaan

$$f(2, 2, -4) = 4 - 8 = -4 \text{ ja } f(-2, -2, 4) = 4 + 8 = 12.$$

- Siten funktion f maksimi on 12 ja minimi -13.

Regressio-ongelma

- Regressioanalyysissa pyritään valitsemaan parametrin β arvo siten, että käyrä
$$y = f(x; \beta)$$
kulkisi mahdollisimman läheltä jokaista havaintopistettä
$$(x_j, y_j) \in \mathbb{R}^2,\ j = 1, 2, \ldots, n.$$
- Tällaista optimaalisesti valittua käyrää kutsutaan *regressiomalliksi* $y = f(x; \beta)$, jossa funktion f muoto on valittu tilanteen ja harkinnan mukaan.
- Kunhan f valittu, niin eräs ratkaisu käyränsovitusongelmaan on *pienimmän neliösumman menetelmä*.

Pienimmän neliösumman menetelmä

- Pienimmän neliösumman menetelmässä pyritään minimoimaan regressiomallin virhetermien ε_j

$$\varepsilon_j = y_j - f(x_j; \beta), \quad j = 1, 2, \ldots, n$$

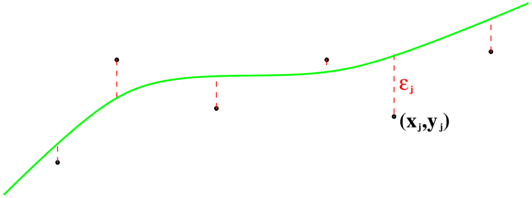
neliösummaa eli funktiota

$$F(\beta) = \sum_{j=1}^{n} \varepsilon_j^2 = \sum_{j=1}^{n} \big(y_j - f(x_j; \beta)\big)^2.$$

muuttamalla parametrivektorin $\beta = (\beta_0, \beta_1, \ldots, \beta_m)$ arvoa.

- Optimaalinen β:n arvo on parametrin β *pienimmän neliösumman estimaatti* eli *PNS-estimaatti*.
- **Kysymys:** Miksi ei minimoitaisi lauseketta $\sum_{j=1}^{n} |y_j - f(x_j; \beta)|$ neliösumman sijasta?

PNS-sovitus



Kuvassa vihreällä parametreista $\beta = (\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_m)$ riippuva sovitettava funktio $f(x;\beta)$ eräällä kiinteällä parametrin arvolla.

Datapisteet (x_j, y_j) ja vastaavat virhetermit ε_j, kun $j = 1, \dots, n$.

Lineaarinen regressio 1/2

Lineaarisessa regressiossa $f(x;\beta) = \beta_0 - \beta_1 x$ jossa $\beta = (\beta_0, \beta_1)$ ja neliösumma on

$$F(\beta_0, \beta_1) = \sum_i (y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i)^2.$$

Etsitään piste (β_0, β_1) siten, että $\nabla F(\beta_0, \beta_1) = 0$.

- Lasketaan osittaisderivaatta

$$\frac{\partial}{\partial \beta_0} F(\beta_0, \beta_1) = 2\big(\beta_1 \sum_i x_i + n\beta_0 - \sum_i y_i\big).$$

- Ratkaistaan nollakohta

$$\beta_0 = \frac{1}{n}\sum_i y_i - \frac{\beta_1}{n}\sum_i x_i = \bar{\mathbf{y}} - \beta_1 \bar{\mathbf{x}}$$

missä $\bar{\mathbf{x}}$ on datavektorin $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_n)$ komponenttien aritmeettinen keskiarvo.

Lineaarinen regressio 2/2

- Lasketaan seuraavaksi osittaisderivaatta

$$\frac{\partial}{\partial \beta_1} F(\beta_0, \beta_1) = 2\big(\beta_0 \sum_i x_i + \beta_1 \sum_i x_i^2 - \sum_i x_i y_i\big).$$

- Sijoittamalla β_0:n lauseke, saadaan

$$n\bar{\mathbf{x}}\bar{\mathbf{y}} - n\beta_1\bar{\mathbf{x}}^2 + \beta_1 \sum_i x_i^2 - \sum_i x_i y_i = 0.$$

- Ratkaistaan nollakohta

$$\beta_1 = \frac{n\bar{\mathbf{x}}\bar{\mathbf{y}} - \sum_i x_i y_i}{n\bar{\mathbf{x}}^2 - \sum_i x_i^2} = \frac{\sum_i (x_i - \bar{\mathbf{x}})(y_i - \bar{\mathbf{y}})}{\sum_i (x_i - \bar{\mathbf{x}})^2}.$$

Tarkista jälkimmäinen yhtälö!

Esimerkki 4

Sovita PNS-suora dataan

x_i	0.0	1.0	2.0	3.0	4.0
y_i	2.10	1.92	1.84	1.71	1.64

Estimoi (ekstrapoloi) y kun $x = 5$.

- Saadaan $\bar{\mathbf{x}} = 2.0$, $\bar{\mathbf{y}} = 1.842$, ja

$$\beta_1 = \frac{-1.13}{10.0} = -0.113.$$

- Siten $\beta_0 = 1.842 + 0.113 \cdot 2.0 = 2.068$.
- Näin ollen $y = -0.113x + 2.068$, ja haluttu estimaatti pisteessä $x = 5$ on $y = -0.113 \cdot 5 + 2.068 = 1.503$.

Esimerkki 5: Toisen asteen sovitus 1/2

Tutkitaan lisäaineen määrän x vaikutusta kuivumisaikaan y. Eri lisäaineen määrillä x_i (grammaa) saatiin kuivumisajat y_i (tuntia), $i = 1, \ldots, 9$:

x_i	0.0	1.0	2.0	3.0	4.0	5.0	6.0	7.0	8.0
y_i	11.0	9.4	9.1	7.0	6.2	7.1	6.6	7.5	8.2

- Huomataan, että kuivumisajan riippuvuus lisäaineen määrästä on epälineaarista. Minimikohdan estimoimiseksi sovitetaan havaintoihin paraabeli $y = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 x^2$.
- Pienimmän neliösumman yhtälöryhmä mallille on

$$\frac{\partial}{\partial \beta_k} \sum (y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i - \beta_2 x_i^2)^2 = 0, \qquad k = 0, 1, 2.$$

Esimerkki 5: Toisen asteen sovitus 2/2

- Näistä saadaan yhtälöryhmä

$$\begin{cases} n\beta_0 + \beta_1 \sum x_i + \beta_2 \sum x_i^2 & = & \sum y_i, \\ \beta_0 \sum x_i + \beta_1 \sum x_i^2 + \beta_2 \sum x_i^3 & = & \sum x_i y_i \\ \beta_0 \sum x_i^2 + \beta_1 \sum x_i^3 + \beta_2 \sum x_i^4 & = & \sum x_i^2 y_i. \end{cases}$$

- Laskemalla yhtälöryhmän kertoimet havainnoista saadaan

$$\begin{cases} 9\beta_0 + 36\beta_1 + 204\beta_2 & = & 72.1 \\ 36\beta_0 + 204\beta_1 + 1296\beta_2 & = & 266.6 \\ 204\beta_0 + 1296\beta_1 + 8772\beta_2 & = & 1515.4 \end{cases}$$

- Ratkaisuna ovat $\beta_0 = 11.15$, $\beta_1 = -1.806$ ja $\beta_2 = 0.1803$. Pienimmän neliösumman mielessä parhaiten havaintoihin liittyvä paraabeli on siis

$$y = 11.15 - 1.806x + 0.1803x^2.$$