Gradijent, plohe i lokalni ekstremi

Franka Miriam Brückler

8. svibnja 2024.

Gradijent skalarne funkcije

$$f(x,y) = y \ln x$$
$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{y}{x}, \quad \frac{\partial f}{\partial y} = \ln x.$$

Gradijent skalarne funkcije

$$f(x,y) = y\ln x$$
$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{y}{x}, \quad \frac{\partial f}{\partial y} = \ln x.$$

Dakle, za svaki uređeni par $X = (x, y)$ u domeni od f dobili smo pripadni uređeni par parcijalnih derivacija:

$$(x,y) \mapsto \left(\frac{y}{x}, \ln x\right)$$

Taj par nazivamo gradijentom od f u točki X:

$$\nabla f(x,y) = \left(\frac{y}{x}, \ln x\right).$$

Gradijent skalarne funkcije

$$f(x,y) = y \ln x$$
$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{y}{x}, \quad \frac{\partial f}{\partial y} = \ln x.$$

Dakle, za svaki uređeni par $X = (x,y)$ u domeni od f dobili smo pripadni uređeni par parcijalnih derivacija:

$$(x,y) \mapsto \left(\frac{y}{x}, \ln x\right)$$

Taj par nazivamo gradijentom od f u točki X:

$$\nabla f(x,y) = \left(\frac{y}{x}, \ln x\right).$$

$\nabla f(1,1) = (1,0)$, $\nabla f(e, e^2) = (e, 1)$, $\ldots$

Gradijent skalarne funkcije

$$f(x,y) = y \ln x$$
$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{y}{x}, \quad \frac{\partial f}{\partial y} = \ln x.$$

Dakle, za svaki uređeni par $X = (x, y)$ u domeni od f dobili smo pripadni uređeni par parcijalnih derivacija:

$$(x,y) \mapsto \left(\frac{y}{x}, \ln x\right)$$

Taj par nazivamo gradijentom od f u točki X:

$$\nabla f(x,y) = \left(\frac{y}{x}, \ln x\right).$$

$\nabla f(1,1) = (1,0)$, $\nabla f(e, e^2) = (e, 1)$, ...
Elemente domene X u ovom je slučaju uobičajeno interpretirati kao točke, a njima pridružene gradijente kao geometrijske vektore koji počinju u X.

Definicija

Gradijent *skalarne funkcije* f *u nekoj točki* X *njene domene je vektor* $\nabla f(X)$ *prvih parcijalnih derivacija od* f *izračunatih u toj točki:*

$$\nabla f(X) = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}(X), \frac{\partial f}{\partial x_2}(X), \ldots \right).$$

Definicija

Gradijent *skalarne funkcije f u nekoj točki X njene domene je vektor $\nabla f(X)$ prvih parcijalnih derivacija od f izračunatih u toj točki:*

$$\nabla f(X) = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}(X), \frac{\partial f}{\partial x_2}(X), \ldots\right).$$

Primjer

Nivo-krivulje za
$f(x, y) = 4x^2 + 9y^2$ *su*

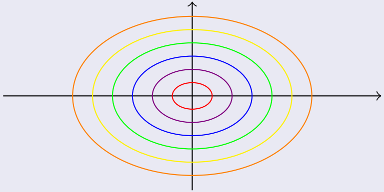
Definicija

Gradijent *skalarne funkcije f u nekoj točki X njene domene je vektor $\nabla f(X)$ prvih parcijalnih derivacija od f izračunatih u toj točki:*

$$\nabla f(X) = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}(X), \frac{\partial f}{\partial x_2}(X), \dots\right).$$

Primjer

Nivo-krivulje za $f(x,y) = 4x^2 + 9y^2$ su



Odaberite nivo-krivulju koja odgovara vrijednosti $z = 1$ i skicirajte ∇f duž te krivulje. Je li taj gradijent igdje nulvektor? Kako tangente leže u odnosu na gradijente u istim točkama?

Krivulje u ravnini

Ako je krivulja u ravnini (točnije, unutar domene od f) zadana jednadžbom $f(x,y)=a$ (dakle, ako je zadana kao nivo-krivulja neke skalarne funkcije dviju varijabli), onda je u svakoj točki (x,y) te krivulje $\nabla f(x,y)\neq(0,0)$ vektor okomit na tangentu u toj točki.
Krivulja u ravnini može se definirati kao nivo-krivulja skalarne funkcije dvije varijabli, $f(x,y)=a$, uz uvjet da je $\nabla f(x,y)\neq(0,0)$ za sve (x,y) na krivulji.
Koeficijent smjera tangente u točki (x,y) na krivulji $f(x,y)=a$ je

$$-\frac{\frac{\partial f}{\partial x}(x,y)}{\frac{\partial f}{\partial y}(x,y)}.$$

Plohe u prostoru

Definicija (Ploha u $\mathbb{R}^3$)

Za zadanu konstantu C, ploha je skup

$$S = \{(x, y, z) \in D : f(x, y, z) = a\} \subseteq D,$$

uz uvjet da je $f : D \subseteq \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}$ i

$$\nabla f(x, y, z) \neq (0, 0, 0)$$

za svaku točku $(x, y, z) \in S$.

Vidimo: Plohe su podskupovi domena skalarnih funkcija triju varijabli i radi se o nivo-plohama, tj. sastoje se od onih točaka domene u kojima ta funkcija ima istu vrijednost.

Zadatak

Dokažite da su sljedeći skupovi plohe u prostoru:

- *sfera* $x^2 + y^2 + z^2 = r^2$;
- *svaka ravnina;*
- *graf svake derivabilne funkcije dviju varijabli.*

Zadatak

Dokažite da su sljedeći skupovi plohe u prostoru:

- *sfera* $x^2 + y^2 + z^2 = r^2$;
- *svaka ravnina;*
- *graf svake derivabilne funkcije dviju varijabli.*

Kako su ležali vektori koji odgovaraju gradijentu funkcije $f(x, y) = 4x^2 + 9y^2$ u odnosu na njezinu nivo-krivulju koja odgovara vrijednosti 1? Usporedite to s gradijentom na nivo-krivuljama iste funkcije koje odgovaraju vrijednostima 4 i 9!

Zadatak

Dokažite da su sljedeći skupovi plohe u prostoru:

- *sfera* $x^2 + y^2 + z^2 = r^2$*;*
- *svaka ravnina;*
- *graf svake derivabilne funkcije dviju varijabli.*

Kako su ležali vektori koji odgovaraju gradijentu funkcije $f(x, y) = 4x^2 + 9y^2$ u odnosu na njezinu nivo-krivulju koja odgovara vrijednosti 1? Usporedite to s gradijentom na nivo-krivuljama iste funkcije koje odgovaraju vrijednostima 4 i 9! A kako leže vektori koji odgovaraju gradijentu funkcije $f(x, y, z) = x^2 + y^2 + z^2$ u odnosu na plohe zadane s $f(x, y, z) = r^2$ za $r = 1, 2, 3$?

Zadatak

Dokažite da su sljedeći skupovi plohe u prostoru:

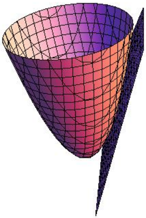
- *sfera* $x^2 + y^2 + z^2 = r^2$*;*
- *svaka ravnina;*
- *graf svake derivabilne funkcije dviju varijabli.*

Kako su ležali vektori koji odgovaraju gradijentu funkcije $f(x, y) = 4x^2 + 9y^2$ u odnosu na njezinu nivo-krivulju koja odgovara vrijednosti 1? Usporedite to s gradijentom na nivo-krivuljama iste funkcije koje odgovaraju vrijednostima 4 i 9! A kako leže vektori koji odgovaraju gradijentu funkcije $f(x, y, z) = x^2 + y^2 + z^2$ u odnosu na plohe zadane s $f(x, y, z) = r^2$ za $r = 1, 2, 3$?

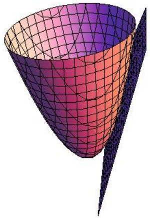
Gradijent (njegov smjer i orijentacija) u točki nivo-krivulje odnosno nivo-plohe pokazuje smjer pomakom u kojem dolazi do najvećeg porasta vrijednosti funkcije koja zadaje krivulju odnosno plohu.

Ima li smisla govoriti o tangenti na sferu ili neku drugu plohu? Zašto?

Ima li smisla govoriti o tangenti na sferu ili neku drugu plohu? Zašto?



Ima li smisla govoriti o tangenti na sferu ili neku drugu plohu? Zašto?

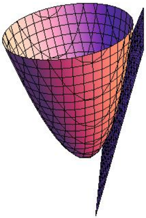


Definicija (Tangencijalna ravnina na plohu)

Tangencijalna ravnina na plohu $f(x, y, z) = a$ u nekoj njenoj točki $X = (x_0, y_0, z_0)$ je ravnina kroz tu točku kojoj je $\nabla f(X)$ vektor normale.

Kako onda glasi jednadžba tangencijalne ravnine na plohu u nekoj njenoj točki?

Ima li smisla govoriti o tangenti na sferu ili neku drugu plohu? Zašto?

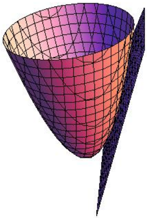


Definicija (Tangencijalna ravnina na plohu)

Tangencijalna ravnina na plohu $f(x,y,z)=a$ *u nekoj njenoj točki* $X=(x_0,y_0,z_0)$ *je ravnina kroz tu točku kojoj je* $\nabla f(X)$ *vektor normale.*

Kako onda glasi jednadžba tangencijalne ravnine na plohu u nekoj njenoj točki? A jednadžba normale?

Ima li smisla govoriti o tangenti na sferu ili neku drugu plohu? Zašto?



Definicija (Tangencijalna ravnina na plohu)

Tangencijalna ravnina na plohu $f(x, y, z) = a$ *u nekoj njenoj točki* $X = (x_0, y_0, z_0)$ *je ravnina kroz tu točku kojoj je* $\nabla f(X)$ *vektor normale.*

Kako onda glasi jednadžba tangencijalne ravnine na plohu u nekoj njenoj točki? A jednadžba normale? Može li tangencijalna ravnina na graf skalarne funkcije dviju varijabli biti paralelna sa z-osi?

Ekstremi skalarnih funkcija

Definicija (Lokalni i globalni ekstremi skalarnih funkcija)

Za skalarnu funkciju $f : D \to \mathbb{R}$ točku $X_0 \in D$ zovemo

- *točkom lokalnog minimuma odnosno maksimuma funkcije f ako za sve $X \in D$ iz neke okoline od X_0 vrijedi $f(X) \geq f(X_0)$ odnosno $f(X) \leq f(X_0)$;*
- *točkom globalnog minimuma odnosno maksimuma funkcije f ako za sve $X \in D$ vrijedi $f(X) \geq f(X_0)$ odnosno $f(X) \leq f(X_0)$.*

Stacionarna točka skalarne funkcije je nultočka njenog gradijenta, tj. element domene u kojemu su sve parcijalne derivacije prvog reda jednake nuli. Ako se radi o funkciji dviju varijabli, u stacionarnoj je točki tangencijalna ravnina na graf paralelna s ravninom domene ((x, y)-ravninom).

Hesseova matrica

Kako za stacionarnu točku realne funkcije jedne varijable provjeravamo je li točka ekstrema?

Hesseova matrica

Kako za stacionarnu točku realne funkcije jedne varijable provjeravamo je li točka ekstrema?

Definicija (Hesseova matrica)

Za skalarnu funkciju f od n varijabli koja posjeduje sve parcijalne derivacije drugog reda (u točki X iz svoje domene) njena Hesseova matrica (u toj točki) je matrica $H = H(f)(X)$ koja na poziciji (i, j) ima iznos $\frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j}(X)$.

Zbog Schwarzovog teorema, za funkcije s neprekidnim parcijalnim derivacijama drugog reda (a to su gotovo sve koje se mogu susresti u primjenama) Hesseova matrica je simetrična.

Definicija (Minore kvadratne matrice)

Za kvadratnu matricu $A \in M_n$ njene (glavne) minore su determinante kvadratnih matrica $A_1, A_2, \ldots, A_{n-1}, A_n = A$, gdje je A_k matrica koja se iz A dobije tako da uzmemo njenih prvih k redaka i k stupaca (tj. $A_i = (a_{ij}) \in M_k$).

Funkcija f u stacionarnoj točki X_0 ima

- lokalni minimum ako su sve minore Hesseove matrice $H(f)(X_0)$ pozitivne.
- lokalni maksimum ako predznaci minora Hesseove matrice $H(f)(X_0)$ alterniraju počevši s negativnim.

Definicija (Minore kvadratne matrice)

Za kvadratnu matricu $A \in M_n$ njene (glavne) minore su determinante kvadratnih matrica $A_1, A_2, \dots, A_{n-1}, A_n = A$, gdje je A_k matrica koja se iz A dobije tako da uzmemo njenih prvih k redaka i k stupaca (tj. $A_i = (a_{ij}) \in M_k$).

Funkcija f u stacionarnoj točki X_0 ima

- lokalni minimum ako su sve minore Hesseove matrice $H(f)(X_0)$ pozitivne.
- lokalni maksimum ako predznaci minora Hesseove matrice $H(f)(X_0)$ alterniraju počevši s negativnim.

U slučaju da uvjet na predznake ne vrijedi strogo, tj. neke od minora su nula, ali nema negativnih ili pak alterniraju tako da neparne po redu nisu pozitivne, a parne nisu negativne, potrebno je drugim metodama provjeriti radi li se o točki lokalnog ekstrema. U preostalim slučajevima govorimo o sedlastoj točki: **Sedlasta točka funkcije** je stacionarna točka koja nije točka ekstrema.

Primjer

Odredimo lokalne ekstreme funkcije zadane formulom

$$f(x, y) = x^3 + x^2 y - y^2 - 4y.$$

Njen gradijent je

$$\nabla f(x, y) = (3x^2 + 2xy, x^2 - 2y - 4),$$

a Hesseova matrica je

$$H(f)(x, y) = \begin{pmatrix} 6x + 2y & 2x \\ 2x & -2 \end{pmatrix}.$$

Primjer

Odredimo lokalne ekstreme funkcije zadane formulom

$$f(x, y) = x^3 + x^2 y - y^2 - 4y.$$

Njen gradijent je

$$\nabla f(x, y) = (3x^2 + 2xy, x^2 - 2y - 4),$$

a Hesseova matrica je

$$H(f)(x, y) = \begin{pmatrix} 6x + 2y & 2x \\ 2x & -2 \end{pmatrix}.$$

Stacionarne točke od f su $(0, -2)$, $(1, -3/2)$ i $(-4, 6)$.

Primjer

Odredimo lokalne ekstreme funkcije zadane formulom

$$f(x, y) = x^3 + x^2y - y^2 - 4y.$$

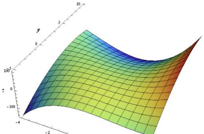
Njen gradijent je

$$\nabla f(x, y) = (3x^2 + 2xy, x^2 - 2y - 4),$$

a Hesseova matrica je

$$H(f)(x, y) = \begin{pmatrix} 6x + 2y & 2x \\ 2x & -2 \end{pmatrix}.$$

Stacionarne točke od f su $(0, -2)$, $(1, -3/2)$ i $(-4, 6)$. Od njih je $(0, -2)$ točka lokalnog maksimuma, a druge dvije stacionarne točke su sedlaste.



Uvjetni ekstremi

Primjer

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: Cijenu je uzeo razmjernu volumenu, ali volumen je određivao pomoću štapa kojeg je provukao kroz rupu u sredini ruba bačve, dok na suprotnoj strani ne dotakne jedan od kružnih krajeva te zatim izmjerio koliko je dug mokri dio štapa. Kepler je primijetio da mokri dio štapa može biti jednako dug za bačve različitih volumena te je odlučio odrediti za kakve je dimenzije bačve i danu duljinu mokrog dijela štapa (cijenu) volumen bačve najveći. U tu je svrhu zamislio da su bačve valjkastog oblika.
Koliko iznosi omjer promjera i duljine valjkaste bačve maksimalnog volumena ako je fiksirana duljina mokrog dijela štapa?

$$V(d,h) = r^2 h\pi = \frac{\pi}{4} d^2 h \to \max$$

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

$$V(d,h) = r^2 h\pi = \frac{\pi}{4} d^2 h \to \max$$

$$d^2 + \left(\frac{h}{2}\right)^2 = L = \text{const} \Rightarrow d^2 = L - \frac{h^2}{4} \Rightarrow V(h) = \frac{L\pi}{4} h - \frac{\pi}{16} h^3$$

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

$$V(d,h) = r^2 h\pi = \frac{\pi}{4} d^2 h \to \max$$

$$d^2 + \left(\frac{h}{2}\right)^2 = L = \text{const} \Rightarrow d^2 = L - \frac{h^2}{4} \Rightarrow V(h) = \frac{L\pi}{4} h - \frac{\pi}{16} h^3$$

$$V'(h) = \frac{L\pi}{4} - \frac{3\pi}{16} h^2 = 0 \Rightarrow h = +2\sqrt{\frac{L}{3}}$$

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

$$V(d,h) = r^2 h\pi = \frac{\pi}{4} d^2 h \to \max$$

$$d^2 + \left(\frac{h}{2}\right)^2 = L = \text{const} \Rightarrow d^2 = L - \frac{h^2}{4} \Rightarrow V(h) = \frac{L\pi}{4} h - \frac{\pi}{16} h^3$$

$$V'(h) = \frac{L\pi}{4} - \frac{3\pi}{16} h^2 = 0 \Rightarrow h = +2\sqrt{\frac{L}{3}}$$

$$d^2 = \frac{2L}{3} \Rightarrow d : h = \sqrt{L/3}$$

Zašto smo sigurni da za taj omjer imamo maksimalni volumen uz danu cijenu?

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

$$V(d,h) = r^2 h\pi = \frac{\pi}{4} d^2 h \to \max$$

$$d^2 + \left(\frac{h}{2}\right)^2 = L = \text{const} \Rightarrow d^2 = L - \frac{h^2}{4} \Rightarrow V(h) = \frac{L\pi}{4} h - \frac{\pi}{16} h^3$$

$$V'(h) = \frac{L\pi}{4} - \frac{3\pi}{16} h^2 = 0 \Rightarrow h = +2\sqrt{\frac{L}{3}}$$

$$d^2 = \frac{2L}{3} \Rightarrow d : h = \sqrt{L/3}$$

Zašto smo sigurni da za taj omjer imamo maksimalni volumen uz danu cijenu?

Problem uvjetnog ekstrema je zadatak određivanje ekstrema funkcije zadane formulom $f(x, y, \ldots)$ uz jedan ili više uvjeta[1] oblika $g(x, y, \ldots) = 0$.

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

Metoda Lagrangeovih multiplikatora

Za svaki od uvjeta uvodi se po jedna nova varijabla, tzv. Lagrangeov multiplikator λ te se formira nova funkcija koja ovisi o polaznim varijablama $x, y, \ldots$ i Lagrangeovim multiplikatorima $\lambda, \ldots$:

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

Ta nova funkcija zove se Lagrangeova funkcija.

Teorem

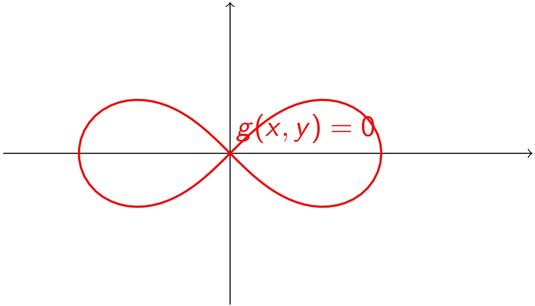
Ako polazna funkcija f postiže traženi uvjetni ekstrem u točki $(x, y, \ldots)$, onda postoje Lagrangeovi multiplikatori $\lambda, \ldots$ tako da je $X = (x, y, \ldots, \lambda, \ldots)$ stacionarna točka za Lagrangeovu funkciju F.

Primijetimo: $\nabla F(X) = \mathbf{0}$ ako i samo ako je $\nabla f(x, y, \ldots) = \mathbf{0}$ i zadovoljeni su svi uvjeti polaznog problema.

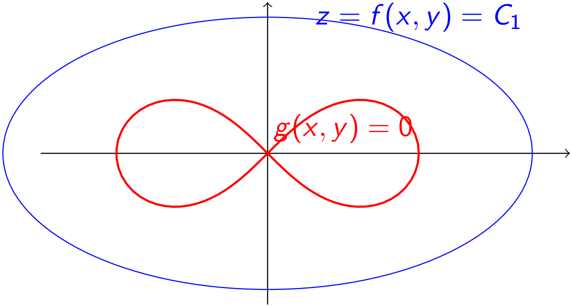
Geometrijska interpretacija za slučaj dvije varijable x i y i jednog uvjeta $g(x, y) = 0$: Uvjet je

Geometrijska interpretacija za slučaj dvije varijable x i y i jednog uvjeta $g(x, y) = 0$: Uvjet je krivulja u ravnini koja je podskup domene od f. Na njoj tražimo točku u kojoj f postiže minimum/maksimum. Mogli bismo u (x, y)-ravnini crtati nivo-krivulje funkcije f i tražimo onu s najvećom vrijednošću koja dodiruje krivulju $g(x, y) = 0$.

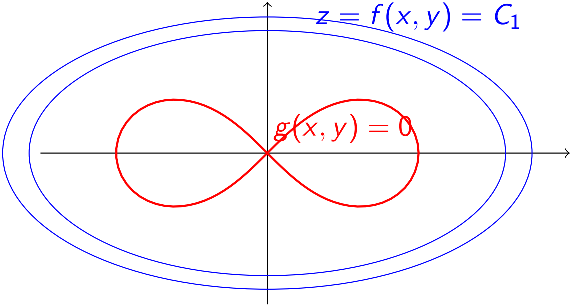
Geometrijska interpretacija za slučaj dvije varijable x i y i jednog uvjeta $g(x,y)=0$: Uvjet je krivulja u ravnini koja je podskup domene od f. Na njoj tražimo točku u kojoj f postiže minimum/maksimum. Mogli bismo u (x,y)-ravnini crtati nivo-krivulje funkcije f i tražimo onu s najvećom vrijednošću koja dodiruje krivulju $g(x,y)=0$. Uvjet $\nabla F(x,y,\lambda)=0$ svodi se sad na $\nabla f(x,y)=\lambda\nabla g(x,y)$, $g(x,y)=0$, dakle na traženje točke na krivulji u kojoj su gradijenti od f i g kolinearni.



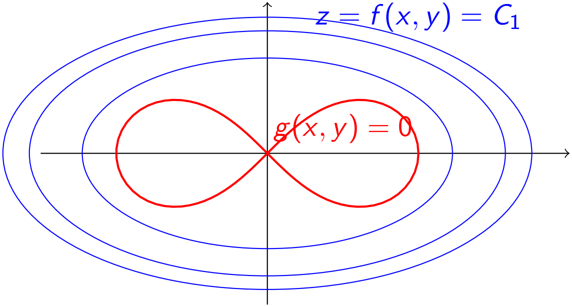
Geometrijska interpretacija za slučaj dvije varijable x i y i jednog uvjeta $g(x,y)=0$: Uvjet je krivulja u ravnini koja je podskup domene od f. Na njoj tražimo točku u kojoj f postiže minimum/maksimum. Mogli bismo u (x,y)-ravnini crtati nivo-krivulje funkcije f i tražimo onu s najvećom vrijednošću koja dodiruje krivulju $g(x,y)=0$. Uvjet $\nabla F(x,y,\lambda)=0$ svodi se sad na $\nabla f(x,y)=\lambda\nabla g(x,y)$, $g(x,y)=0$, dakle na traženje točke na krivulji u kojoj su gradijenti od f i g kolinearni.



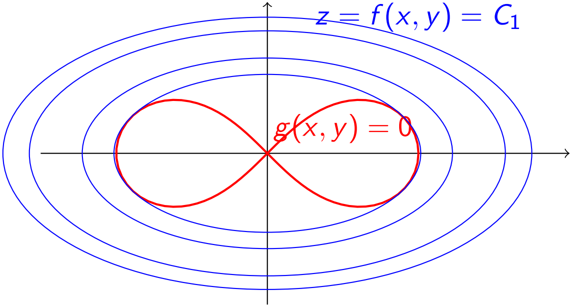
Geometrijska interpretacija za slučaj dvije varijable x i y i jednog uvjeta $g(x,y)=0$: Uvjet je krivulja u ravnini koja je podskup domene od f. Na njoj tražimo točku u kojoj f postiže minimum/maksimum. Mogli bismo u (x,y)-ravnini crtati nivo-krivulje funkcije f i tražimo onu s najvećom vrijednošću koja dodiruje krivulju $g(x,y)=0$. Uvjet $\nabla F(x,y,\lambda)=0$ svodi se sad na $\nabla f(x,y)=\lambda\nabla g(x,y)$, $g(x,y)=0$, dakle na traženje točke na krivulji u kojoj su gradijenti od f i g kolinearni.



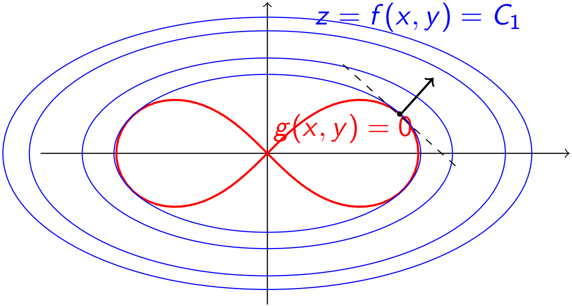
Geometrijska interpretacija za slučaj dvije varijable x i y i jednog uvjeta $g(x, y) = 0$: Uvjet je krivulja u ravnini koja je podskup domene od f. Na njoj tražimo točku u kojoj f postiže minimum/maksimum. Mogli bismo u (x, y)-ravnini crtati nivo-krivulje funkcije f i tražimo onu s najvećom vrijednošću koja dodiruje krivulju $g(x, y) = 0$. Uvjet $\nabla F(x, y, \lambda) = 0$ svodi se sad na $\nabla f(x, y) = \lambda \nabla g(x, y)$, $g(x, y) = 0$, dakle na traženje točke na krivulji u kojoj su gradijenti od f i g kolinearni.



Geometrijska interpretacija za slučaj dvije varijable x i y i jednog uvjeta $g(x, y) = 0$: Uvjet je krivulja u ravnini koja je podskup domene od f. Na njoj tražimo točku u kojoj f postiže minimum/maksimum. Mogli bismo u (x, y)-ravnini crtati nivo-krivulje funkcije f i tražimo onu s najvećom vrijednošću koja dodiruje krivulju $g(x, y) = 0$. Uvjet $\nabla F(x, y, \lambda) = 0$ svodi se sad na $\nabla f(x, y) = \lambda \nabla g(x, y)$, $g(x, y) = 0$, dakle na traženje točke na krivulji u kojoj su gradijenti od f i g kolinearni.



Geometrijska interpretacija za slučaj dvije varijable x i y i jednog uvjeta $g(x, y) = 0$: Uvjet je krivulja u ravnini koja je podskup domene od f. Na njoj tražimo točku u kojoj f postiže minimum/maksimum. Mogli bismo u (x, y)-ravnini crtati nivo-krivulje funkcije f i tražimo onu s najvećom vrijednošću koja dodiruje krivulju $g(x, y) = 0$. Uvjet $\nabla F(x, y, \lambda) = 0$ svodi se sad na $\nabla f(x, y) = \lambda \nabla g(x, y)$, $g(x, y) = 0$, dakle na traženje točke na krivulji u kojoj su gradijenti od f i g kolinearni.



Primjer

Odredite dimenzije otvorene kutije oblika kvadra maksimalnog obujma koja ima oplošje $64\,\mathrm{cm}^2$.
Ako su x, y *i* z *tražene duljine bridova te kutije (u centimetrima), zadatak se svodi na*

Primjer

Odredite dimenzije otvorene kutije oblika kvadra maksimalnog obujma koja ima oplošje $64\,\mathrm{cm}^2$*.*
Ako su x*,* y *i* z *tražene duljine bridova te kutije (u centimetrima), zadatak se svodi naodređivanje maksimuma funkcije* $f(x,y,z) = xyz$ *uz uvjet* $2xy + 2xz + yz = 64$*.*

Primjer

Odredite dimenzije otvorene kutije oblika kvadra maksimalnog obujma koja ima oplošje $64\,\mathrm{cm}^2$*.*
Ako su x, y *i* z *tražene duljine bridova te kutije (u centimetrima), zadatak se svodi naodređivanje maksimuma funkcije* $f(x,y,z) = xyz$ *uz uvjet* $2xy + 2xz + yz = 64$*.*

$$F(x,y,z,\lambda) = xyz - \lambda(2xy + 2yz + xz - 64),$$

Primjer

Odredite dimenzije otvorene kutije oblika kvadra maksimalnog obujma koja ima oplošje $64\,\mathrm{cm}^2$.
Ako su x, y *i* z *tražene duljine bridova te kutije (u centimetrima), zadatak se svodi naodređivanje maksimuma funkcije* $f(x,y,z) = xyz$ *uz uvjet* $2xy + 2xz + yz = 64$.

$$F(x,y,z,\lambda) = xyz - \lambda(2xy + 2yz + xz - 64),$$

$$\nabla f(x,y,z) = \lambda \nabla g(x,y,z) \,\&\, g(x,y,z) = 0 :$$

$$yz = \lambda(2y+z), \quad xz = \lambda(2x+2z),$$

$$xy = \lambda(2y+x), \quad 2xy + 2yz + xz = 64$$

Primjer

Odredite dimenzije otvorene kutije oblika kvadra maksimalnog obujma koja ima oplošje $64\,\mathrm{cm}^2$.
Ako su x, y *i* z *tražene duljine bridova te kutije (u centimetrima), zadatak se svodi naodređivanje maksimuma funkcije* $f(x,y,z) = xyz$ *uz uvjet* $2xy + 2xz + yz = 64$.

$$F(x,y,z,\lambda) = xyz - \lambda(2xy + 2yz + xz - 64),$$

$$\nabla f(x,y,z) = \lambda \nabla g(x,y,z) \,\&\, g(x,y,z) = 0 :$$

$$yz = \lambda(2y + z), \quad xz = \lambda(2x + 2z),$$

$$xy = \lambda(2y + x), \quad 2xy + 2yz + xz = 64$$

Pomnožimo prvu od jednadžbi s x, *drugu s* y *i treću sa* z:

$$xyz = \lambda x(2y + z) = \lambda y(2x + 2z) = \lambda z(x + 2y).$$

To može vrijediti za $\lambda = 0$, no to rješenje nas ne zanima (zašto?).

To može vrijediti za $\lambda = 0$, no to rješenje nas ne zanima (zašto?).Stoga mora biti $2xy + xz = 2xy + 2yz = xz + 2yz$, ergo (jer $x, y, z \neq 0$) $x = z = 2y$. To uvrstimo u četvrtu jednadžbu i dobivamo $12x^2 = 64$ odnosno $y = \frac{4}{\sqrt{3}}$ cm i $x = z = \frac{8}{\sqrt{3}}$ cm. Zašto se radi o točki maksimuma?

To može vrijediti za $\lambda = 0$, no to rješenje nas ne zanima (zašto?).Stoga mora biti $2xy + xz = 2xy + 2yz = xz + 2yz$, ergo (jer $x, y, z \neq 0$) $x = z = 2y$. To uvrstimo u četvrtu jednadžbu i dobivamo $12x^2 = 64$ odnosno $y = \frac{4}{\sqrt{3}}$ cm i $x = z = \frac{8}{\sqrt{3}}$ cm. Zašto se radi o točki maksimuma?

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.

Metoda najmanjih kvadrata

Primjer

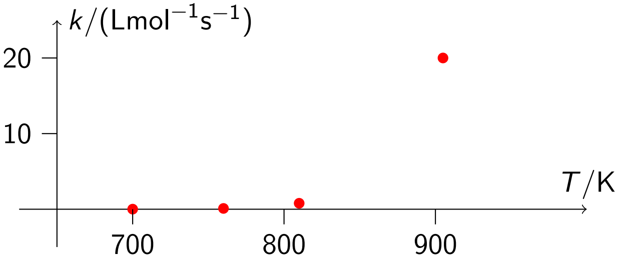
Arrheniusova jednadžba

$$k = Ae^{-E_a/(RT)}$$

opisuje ovisnost koeficijenta k brzine reakcije o temperaturi T. Vrijednosti A (predeksponencijalni faktor) i E_a (energija aktivacije) su konstantne, ali u pravilu nepoznate.
Mjerenjima pri jednoj reakciji su dobiveni sljedeći podaci:

$(T/\mathrm{K}$	$k/(\mathrm{L}/(\mathrm{mol\,s}))$
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 zadani 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 zadani 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 obzirom na zadane parove (x_i, y_i), $i = 1, \ldots, n$?

Problem 1: Za zadani 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 obzirom na zadane parove (x_i, y_i), $i = 1, \ldots, n$?
$e_i = y_i - f(x_i); f(x_i) - y_i$?

Problem 1: Za zadani 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 obzirom na zadane parove (x_i, y_i), $i = 1, \ldots, n$?
$e_i = y_i - f(x_i); f(x_i) - y_i ? e_i = |f(x_i) - y_i|$?

Problem 1: Za zadani 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 obzirom na zadane parove (x_i, y_i), $i = 1, \ldots, n$?
$e_i = y_i - f(x_i); f(x_i) - y_i ? e_i = |f(x_i) - y_i| ? E_i = (f(x_i) - y_i)^2$.
Ukupna greška aproksimacije:

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

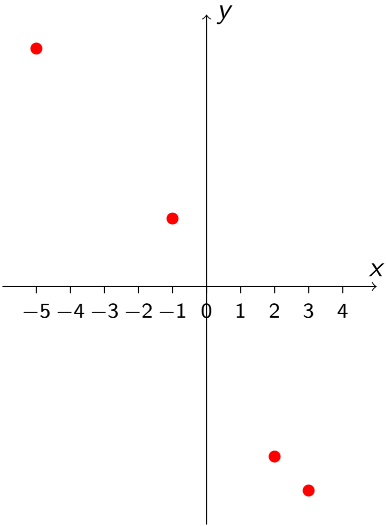
Problem 1: Za zadani niz parova brojeva (x_i, y_i), $i = 1, \dots, n$, traži se funkcija $y = f(x)$ (pretpostavljene vrste) takva da je ukupna greška aproksimacije što manja.
Problem 2: Kako za danu funkciju $y = f(x)$ opisati ukupnu grešku obzirom na zadane parove (x_i, y_i), $i = 1, \dots, n$?
$e_i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

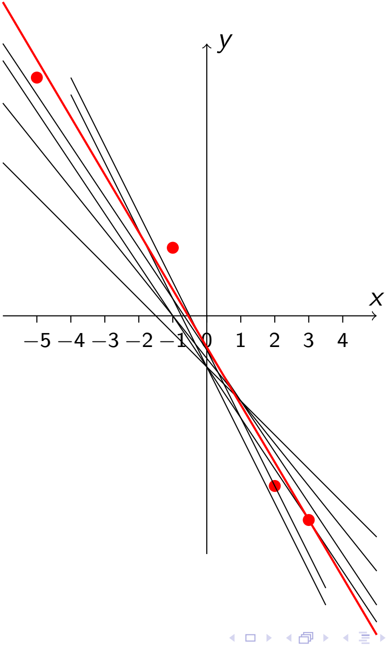
$$E = \sum_{i=1}^{n} E_i = \sum_{i=1}^{n} (f(x_i) - y_i)^2 \to \min$$

Problem 3: Ako smo pretpostavili oblik funkcije f, s nepoznatim parametrima a, b, c, $\dots$, 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 $(-5, 7)$, $(-1, 2)$, $(2, -5)$, $(3, -6)$.

$f(x) = ax + b$:

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

$f(x) = ax^2 + bx + c$:

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

$f(x) = ax + b$:

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

$f(x) = ax^2 + bx + c$:

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

Funkcije E su diferencijabilne, dakle su jedine kritične točke stacionarne:

$$\nabla E = 0.$$

MNK: Aproksimacija afinom funkcijom

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

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

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

MNK: Aproksimacija afinom funkcijom

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

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

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

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

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

Imamo dakle sustav:

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

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

Cramerovo pravilo daje:

$$a = \frac{ns_{xy} - s_x s_y}{ns_{x^2} - s_x^2}$$

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

Nije preteško dokazati da je ova stacionarna točka (a, b) stvarno točka minimuma za E.

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

$$a = \frac{n s_{xy} - s_x s_y}{n s_{x^2} - s_x^2}$$

$$b = \frac{s_{x^2} s_y - s_x s_{xy}}{n s_{x^2} - s_x^2}.$$

Primjer

Za zadatak s četiri točke u koordinatnom sustavu: $n = 4$, $s_x = -1$, $s_y = -2$, $s_{x^2} = 39$, $s_{xy} = -65$

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

$$a = \frac{n s_{xy} - s_x s_y}{n s_{x^2} - s_x^2}$$

$$b = \frac{s_{x^2} s_y - s_x s_{xy}}{n s_{x^2} - s_x^2}.$$

Primjer

Za zadatak s četiri točke u koordinatnom sustavu: $n = 4$, $s_x = -1$, $s_y = -2$, $s_{x^2} = 39$, $s_{xy} = -65a = -\frac{262}{155}$, $b = -\frac{143}{155}$

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

Ima li smisla podatke iz uvodnog primjera s Arrheniusovom jednadžbom aproksimirati pravcem? Ne! Grafički prikaz upućuje na afinu ovisnost, a i znamo da ona nije afina, nego kompozicija eksponencijalne i racionalne.

$$k = Ae^{-E_a/(RT)} \Leftrightarrow \ln \frac{k}{\mathrm{L}/(\mathrm{mols})} = \ln \frac{A}{\mathrm{L}/(\mathrm{mols})} - \frac{E_a}{R} \cdot \frac{1}{T}$$

$$y = \ln \frac{A}{\mathrm{L}/(\mathrm{mols})}, \quad x = \frac{1}{T}$$

$$a = -\frac{E_a}{R}, \quad b = \ln \frac{A}{\mathrm{L}/(\mathrm{mol\,s})}$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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