

Matemaattinen mallinnus

Seppo Pohjolainen (toim.)

Lukijalle

Tietokoneiden, ohjelmistojen ja informaatioteknologian nopea kehitys vahvistaa laskennallisen teknologian ja matemaattisen mallinnuksen merkitystä. Alan osaamisen tarve on kasvamassa. Mallinnuksen, teollisuusmatematiikan ja laskennallisen teknologian asiantuntijoita tarvitaan tulevaisuudessa lisääntyvässä määrin. Yliopistojen haaste on koulutusohjelmien kehittäminen ja ajanmukaistaminen.

Teollisuudessa tutkimus- tai kehitystyön parissa matemaatikon uraa suunnittelevalle ihanteellinen koulutuspaketti sisältää matematiikan teoriaa ja monipuolisen valikoiman menetelmiä käsitteleviä kursseja, laskennallisia menetelmiä ja ohjelmistotyökalujen käyttöä, luonnon- ja teknillisten tieteiden perusteita ja tekniikan tai muun käytännöllisen soveltamisalan tuntemusta. Riittävän laaja matematiikan teorian ja menetelmien tuntemus on tarpeen teollisuuden ja myös yhteiskunnan ongelmia ratkovaan insinööri- ja matemaatikolle. Tärkeää on myös kokemus mallinnusprojektien toteuttamisesta.

Matemaattisen tietämyksen siirto asiakastieteiden tai eri sovellusalojen suuntaan edellyttää mallien tuntemusta ja niiden rakentamisen taitoa. Kirjat, luennot, harjoitustehtävät ovat tarpeellisia. Kuitenkin menestyväksi soveltavaksi matemaatikoksi voidaan parhaiten kypsyä käytännön harjoittelun kautta, ts. oikeita ”tapauksia” hoitamalla. Lisäksi on tärkeätä, että koulutus valmentaa projektityöhön, tiimissä toimimiseen, harjaannuttaa kommunikaatiotaitoja ja valmentaa keskusteluun eri erikoisosaamisen edustajien kanssa.

Matemaattinen työ teollisuuden ja muiden kehitystehtävien parissa on ryhmätyötä. Menestystarinoita syntyy, kun asiantuntijat onnistuvat yhdistämään tietämyksensä ja näkemyksensä toisiaan vahvistavalla tavalla. Ryhmätyössä kommunikointitaidot ovat keskeisiä ja niitäkin oppii kokemuksen kautta. Matemaatikon kannattaa olla utelias ja suhtautua avoimesti eri tiedon aloja kohtaan ja opetella soveltamiskohteen toimialaa sisältäpäin.

Tämä kirja on syntynyt osana Suomen virtuaaliyliopiston toimintaa. Matemaattisen mallinnuksen verkostohankkeen osapuolet ovat rakentaneet matemaattisen mallinnuksen opintokokonaisuuden, jota voi opiskella Suomen yliopistoissa ja korkeakouluissa internetin välityksellä (<http://alpha.cc.tut.fi/mallinnus/>). Tämä kirja on ensimmäinen suomalainen matemaattisen mallinnuksen oppikirja. Toivomme sen edistävän mallinnuksen opiskelua yliopistoissa ja korkeakouluissa.

Tekijät

Matemaattisen mallinnuksen kirjan tekijät

Matti Heiliö on Lappeenrannan teknillisen yliopiston (LUT) lehtori ja Tampereen teknillisen yliopiston dosentti. Hän toimii LUT:n Technomathematics and Technical Physics -koulutusohjelman johtajana. Hän on perehtynyt matematiikan ja teollisuuden vuorovaikutukseen, teollisuusmatematiikan koulutukseen ja soveltavan matematiikan pedagogiikkaan. Hän on toiminut aktiivisesti European Consortium for Mathematics in Industry -verkostossa sen perustamisesta (1986) lähtien ja osallistunut kansainvälisiin koulutusohjelman kehityshankkeisiin ja matemaattisen mallinnuksen työpajatoimintaan.



Erkki Laitinen on Oulun yliopiston (OY) lehtori ja Jyväskylän yliopiston dosentti. Hänen erikoisalojaan ovat matemaattinen mallintaminen, simulointi, numeerinen analyysi ja optimointimenetelmät. Hän on soveltanut matemaattista osaamistaan mm. metalliteollisuuden valuprosessien ohjaukseen ja tietoliikenneverkkojen resursien allokointiin. Näistä aiheista hän on julkaissut lukuisia kansainvälisiä julkaisuja. Tällä hetkellä hän toimii OY:n matemaattisten tieteiden laitoksen sovelletun matematiikan lehtorina.



Timo Mantere on Vaasan yliopiston automaatiotekniikan lehtori sekä evoluutiolaskennan dosentti. Hänen erikoisalojaan ovat evoluutioalgoritmit, ohjelmien testaus sekä signaalien ja kuvien käsittely. Hän on ollut mukana useiden alojen tutkimusprojekteissa, joita ovat mm. uudet ohjelmistojen testausmenetelmät, tulostuslaitteiden optimointi, optimointialgoritmien hyvyysmaisemien kartoitus, selvitys LED-valaistuksen käyttämisestä kasvihuoneissa ja lähi-infrapunaspektroskopian käyttö ihosairauksien tunnistamisessa.



Jorma Merikoski on Tampereen yliopiston matematiikan dosentti. Hänen ensisijainen tutkimusalaansa on lineaari-algebra ja toissijaisia aloja ovat matemaattinen analyysi, matemaattinen tilastotiede, lukuteoria, kombinatorinen geometria ja matematiikan opettaminen. Merikoski on (yhdessä muiden kanssa) julkaissut peruskoulun, lukion ja yliopiston matematiikan oppikirjoja. Hän on usean tieteellisen lehden toimittaja tai arvioija.



Seppo Pohjolainen on Tampereen teknillisen yliopiston (TTY) matematiikan professori ja European Consortium of Mathematics in Industry -verkoston johtoryhmän jäsen. Hänen erikoisalojaan ovat matemaattinen säätöteoria, matemaattinen mallinnus ja simulointi. Lisäksi hän on kiinnostunut matematiikan opettamisesta ja oppimisesta modernia tietotekniikkaa hyödyntäen. Hän on johtanut useita kansainvälisiä ja kansallisia projekteja näiltä aloilta ja julkaissut lukuisia kansainvälisiä julkaisuja. Tällä hetkellä hän toimii TTY:n matematiikan laitoksen ja TTY:n hypermedialaboratorion johtajana.



Robert Piché on Tampereen teknillisen yliopiston (TTY) matematiikan professori ja TTY:n teknis-luonnontieteellisen koulutusohjelman johtaja. Hänen erikoisalanaan on matemaattisen mallinnuksen ja numeeristen menetelmien opetus ja tutkimus. Tutkimuksen sovellusalueet ovat mm. satelliittipaikannus, finanssimatematiikka, kuvankäsittely ja mekaniikka. Hän on toiminut konsulttina useissa teollisuuden tutkimus- ja kehityshankkeissa Suomessa ja Kanadassa.



Kimmo Raivio on Aalto-yliopiston teknillisen korkeakoulun tietojenkäsittelytieteen dosentti. Hänen erikoisalojaan ovat oppivat ja tilastolliset menetelmät data-analyyseissä ja matemaattisessa mallinnuksessa. Sovellusalueista kiinnostuksen kohteina ovat tietoliikennejärjestelmät ja prosessiteollisuuden automatisoidut työkonet. Tällä hetkellä hän toimii tutkijana Aalto-yliopiston Tietojenkäsittelytieteen laitoksella ja Adaptiivisen informatiikan tutkimuskeskuksessa.



Risto Silvennoinen on Tampereen teknillisen yliopiston matematiikan lehtori. Hänen erikoisalojaan ovat matemaattinen optimointi ja sen sovellukset logistiikkaan. Viime aikoina hän on lisäksi tutkinut matemaattisia menetelmiä tuulivoimaloiden kehittämisessä.



Antti Suutala on Tampereen teknillisestä yliopistosta valmistunut tekniikan lisensiaatti. Hänen erikoisalojaan ovat matemaattinen mallinnus ja osittaisdifferentiaaliyhtälöt, erityisesti akustiikan mallinnuksessa. Tällä hetkellä hän toimii matemaattisten aineiden opettajien sijaisena Tampereen ja lähikuntien yläkouluissa ja lukioissa.



Timo Tiihonen on Jyväskylän yliopiston tietotekniikan professori erikoisaloinaan matemaattinen mallinnus ja simulointi. Hän on oppilaineen osallistunut useisiin mallinnushankkeisiin, joiden tuloksia on sovellettu metalli-, paperi- ja puolijohdeteollisuudessa.



[6]

Jukka Tuomela on Itä-Suomen yliopiston (Joensuu kampus) matematiikan professori. Hänen erikoisalansa on ylimääräytyvien (osittais)differentiaaliyhtälöiden numeerinen analyysi. Lisäksi hän on tutkinut monikappalesysteemien kinemaattisia singulaarisuuksia.



Esko Turunen on Tampereen teknillisen yliopiston matematiikan dosentti. Hän on kansainvälisen tason uranuurtaja erikoisalanaan erilaiset yleistetyt logiikat, mm. matemaattinen sumea logiikka, parakonsistentti logiikka ja logiikkaan perustuva tiedonlouhinta. Hän on kirjoittanut kymmeniä kansainvälisissä lehdissä julkaistuja tutkimuksia, konferenssiesitelmiä ja kirjoja, joista esimerkiksi oppikirja 'Mathematics behind Fuzzy Logic' on käytössä useissa yliopistoissa.



Sisältö

Lukijalle	3
Matemaattisen mallinnuksen kirjan tekijät	4
1 Johdanto	11
1.1 Mallinnusprosessi	11
1.2 Matemaattisen mallinnuksen opiskelusta	13
1.3 Mallinnuksen oppimateriaalit	14
2 Mallit ja sovellukset	17
2.1 Mallit, teknologia ja laskenta	17
2.1.1 Matematiikka ja eri alojen kehitys	18
2.1.2 Mallit, teknologia ja laskenta	20
2.1.3 Teollisuusesimerkkejä	25
3 Näkökulmia systeemeihin ja malleihin	40
3.1 Tiedonsiirron optimointi hybridiverkoissa	42
3.2 Tiedonsiirron tasapainottamisen matemaattisesta mallintamisesta	45
3.3 Tasapainotilan olemassaolosta	49
4 Kokonaislukumallit	52
4.1 Johdanto	52
4.2 Loogisten ehtojen esittäminen	54
4.2.1 Kiinteän kustannuksen esittäminen	55
4.3 Standardimalleja	56
4.3.1 Reppuongelma eli Knapsack Problem	56
4.3.2 Kauppatkustajan ongelma eli TSP	57
4.3.3 Toimipisteen sijaintiongelma	59
4.3.4 Kuljetusongelma eli Transportation Problem	60
4.4 Täysin unimodulaariset matriisit	61
4.5 Verkkomallit	62
4.6 Yleistetyt verkot	68
4.7 Laskennallisesta vaativuudesta	71
4.8 Harjoitustehtäviä	73

5	Datapohjaiset mallit	77
5.1	Data ja sovitteet	77
5.1.1	Lagrangen interpolointi	77
5.1.2	Interpolointi kuutiosplinillä	83
5.1.3	Pienimmän neliösumman menetelmä	85
5.2	Probabilistisia malleja	89
5.2.1	Markovin ketjut	89
5.2.2	Poissonin prosessi	98
5.3	Mallinnuksen pehmeät menetelmät	105
5.3.1	GUHA-tiedonlouhintamenetelmä	107
5.3.2	Neuraalilaskenta	115
5.3.3	Geneettiset algoritmit	124
5.3.4	Matemaattinen sumean logiikka	132
6	Dimensioanalyysi	147
6.1	Johdanto	147
6.2	Dimensio	148
6.3	Dimensiottomat luvut ja π -teoreema	150
6.4	Esimerkkejä	153
6.5	Harjoitustehtäviä	155
7	Differentiaaliyhtälömalleja	157
7.1	Johdanto	157
7.1.1	Jatkuva vai diskreetti	158
7.1.2	Äärellinen vai ääretön	159
7.1.3	Jatkuva vai epäjatkua	160
7.2	Mallin muodostaminen	161
7.2.1	Hella	162
7.2.2	Pistemassa	164
7.2.3	Mallin perusmuoto	165
7.2.4	Tila-avaruus	166
7.3	Kvalitatiivinen vai kvantitatiivinen	167
7.4	Mallin geometria	168
7.4.1	Vektorikenttä ja suuntakenttä	168
7.5	Invariantit joukot ja stabiilisuus	170
7.5.1	Tasapainopisteet	172
7.5.2	Jaksolliset ratkaisut	174
7.5.3	Yleiset invariantit joukot	177
7.5.4	Rakenteellinen stabiilisuus	178
7.6	Säilymislait	180
7.7	Lopuksi	182

7.8	Harjoitustehtäviä	183
7.9	Merkintöjä	184
8	Kontinuumimallit	188
8.1	Motivointi	188
8.2	Peruskäsitteitä	189
8.2.1	Eulerin ja Lagrangen koordinaatit	190
8.2.2	Materiaaliderivaatta	191
8.2.3	Integrointi muuttuvassa alueessa	191
8.3	Säilymlait	192
8.3.1	Yleinen säilymlaki	193
8.3.2	Klassiset säilymlait	193
8.3.3	Yhteenveto	196
8.4	Materiaalilait (constitutive laws)	196
8.5	Ilmapallosesimerkki	198
8.5.1	Kaasuvirtaukset	198
8.5.2	Tilanyhtälö ja ilmakehän tiheys	199
8.5.3	Venyä kuormituksen vaikutuksesta	201
8.5.4	Pallon lämpötilan muutos	203
8.6	Diskreetin systeemin kontinuumimalli	204
8.7	Kontinuumimallit ja numeriikka	206
8.7.1	Differenssimenetelmät	206
8.7.2	Äärellisten volyymien menetelmät	207
8.7.3	Elementtimenetelmät	207
8.8	Harjoitustehtäviä	208
9	Laskenta ja visualisointi	211
9.1	Johdanto	211
9.2	Numeeriset menetelmät	212
9.2.1	Yleistä	212
9.2.2	Mallien käsittely numeerisilla menetelmillä	212
9.2.3	Valmiiden ohjelmien käyttö	214
9.3	Symbolinen laskenta	217
9.3.1	Yleistä	217
9.3.2	Lausekeräjähdys	217
9.3.3	Symboliikan ja numeriikan yhteistyö	219
9.4	Visualisointi	220
9.4.1	Yleistä	220
9.4.2	Hyvän kuvan suunnittelu	220

[10]

10	Yksinkertaisemmat mallit	223
10.1	Johdanto	223
10.2	Säännöllinen häiriö ja ratkaisun derivointi	227
10.3	Herkkyysanalyysi	229
10.4	Epäsäännöllinen häiriö	231
10.5	Dimension alentaminen	234
10.6	Harjoitustehtäviä	236
11	Akustinen mallinnus	238
	Merkintöjä	238
11.1	Akustinen malli	239
11.1.1	Lineaarinen aaltoyhtälö	239
11.1.2	Määrittelyalue	240
11.1.3	$L_2(\Omega)$ -avaruus	241
11.1.4	Reunaehdot	242
11.1.5	Lähdetermi	243
11.2	Fourier'n muunnos	244
11.3	Helmholtzin yhtälö	245
11.3.1	Lokaalisti reagoiva reuna(ehto)	245
11.4	Ominaisarvot ja ominaisfunktiot	247
11.5	Gaussin lause	247
11.6	Greenin kaavat	248
11.7	Helmholtzin yhtälön ratkaisu	248
11.7.1	Greenin funktio	249
11.7.2	Greenin funktio ominaisfunktiokehityksen avulla	249
11.7.3	Helmholtzin yhtälön ratkaisu Greenin funktion avulla	250
11.8	Lopuksi	257
11.9	Harjoitustehtäviä	258
12	Harjoitusesimerkkejä	260
	Hakemisto	268

1

Johdanto

1.1 Mallinnusprosessi

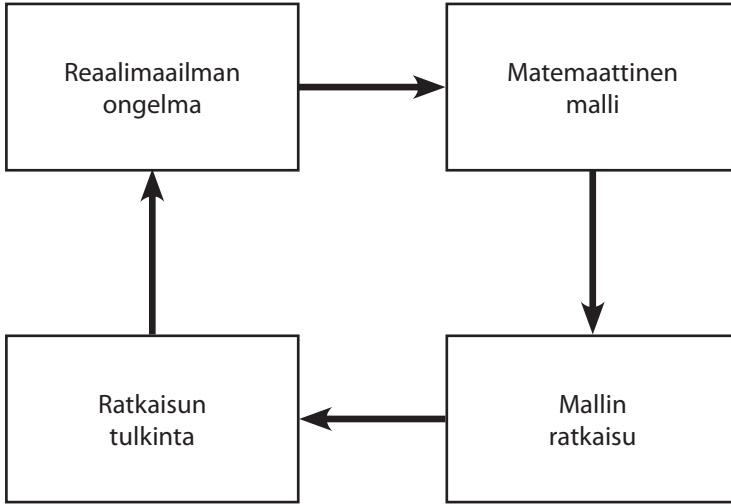
Matemaattinen mallintaminen perustuu matemaattisen mallin käsitteelle. Malli on matematiikan kielellä tehty monimutkaisen todellisuuden yksinkertaistus [4]. Mallin rakentaminen vaatii matematiikan ohella tarvittavien muiden tieteenalojen asiantuntemusta, sivistynyttä arvausta, tiedon keräämistä ja käsittelyä, testausta jne.

Matemaattisen mallinnuksen ja ongelmanratkaisun prosessi sisältää eri vaiheita, joita esitetään kuvassa 1.1. Aluksi on tunnistettava ongelma, jota mallinnuksella pyritään ratkaisemaan. On myös ymmärrettävä millaisia rakenneosia malliin tulee sisällyttää. Tässä vaiheessa määritellään tärkeimmät muuttujat ja suureet ja mietitään tarvittavat taustaoletukset, yksinkertaistukset jne. Mallin rakentamisen pääpiirteet kiinnitetään käsitteellisellä tasolla.

Kun matemaattinen malli on rakennettu, sen avulla voidaan ryhtyä tutkimaan mallinnettavaa ilmiötä. Tavallisesti mallia kuvaavat yhtälöt ratkaistaan tietokoneella. Lähtöarvoja, parametreja, muuttujia jne. voidaan muunnella vastaamaan erilaisia olosuhteita. Tätä kutsutaan simuloinniksi. Näin mallin käyttäytymisestä saadaan hyvä kuva.

Simuloinnin antamia tuloksia verrataan todellisesta ilmiöstä saataviin mittaustietoihin. Tarvittavien mittaustietojen hankkimiseksi on usein tehtävä kokeita. Mittaustietojen avulla voidaan myös mallin tuntemattomia parametreja arvioida ja malli sovittaa olemassa oleviin tietoihin.

Mittaustietojen perusteella tapahtuu myös mallin validointi. Siinä arvioidaan kuinka hyvin malli kuvaa alkuperäistä ilmiötä ja kuinka luotettavia simulointitulokset ovat. Tässä vaiheessa arvioidaan myös käytettyjen laskentamenetelmien aiheuttama virhe. Jos matemaattinen malli ei ole riittävän hyvä, tarkennetaan sitä lisäämällä malliin siitä puuttuvia



Kuva 1.1. Matemaattisen mallinnuksen vaiheet.

[12]

lainalaisuuksia ja niitä kuvaavia muuttujia iteratiivisella tavalla. Kun tulokset ovat selvillä ja luotettavia, siirrytään niiden tulkintaan. Lopulta malli ja sen antamat tulokset voidaan hyväksyä.

Matemaattisen mallinnuksen avulla ilmiöitä voidaan usein tarkastella halvemmalla ja turvallisemmin kuin reaalimaailman järjestelmiä. Näin voidaan myös tutkia sellaisia järjestelmiä, jotka ovat vasta suunnittelijan työpöydällä. Mallien avulla testausta voidaan tehdä olosuhteissa, jotka on vaikea luoda reaalimaailmassa.

Insinöörیتieteissä matemaattinen mallinnus ja simulointi muodostavat keskeisen tutkimus- ja suunnittelumenetelmän, jonka avulla matematiikkaa sovelletaan käytännössä. Tietokoneiden ja eri tieteenaloilla käytettyjen sovellusohjelmistojen kehittyessä matemaattisesta mallintamisesta on tullut yhä keskeisempi insinööri- ja luonnontieteiden tutkimus- ja suunnittelumenetelmä. Kansainvälisesti mallinnuksen tärkeys on tunnustettu ja se sisältyy monen yliopiston opetustarjontaan. Useista lähteistä tässä mainittakoon vain mallintamisen opettajien kansainvälinen yhteisö: The International Community of Teachers of Mathematical Modelling and Applications, <http://www.ictma.net/>.

1.2 Matemaattisen mallinnuksen opiskelusta

Matemaattisen mallintamisen opettaminen on tärkeää yliopistojen opiskelijoille, koska se antaa työelämässä tarvittavia valmiuksia ja valottaa matematiikan käyttöä teollisuudessa ja yhteiskunnassa.

Matemaattisen mallinnuksen koulutuksen haasteena on tutustuttaa opiskelijat mallinnuksen prosessiin, joka lähtee kenties hyvin epätasaisesti, sovellusalan käsittein vajavaisesti kuvatusta kysymysjoukosta ja päättyy mallin muodostamiseen, numeerisiin ratkaisuihin, mallin osuvuuden arviointiin ja saatujen tuloksien palauttamisen ”asiakkaana” olleen soveltamisalan piiriin. Mallinnuksen opettelussa opiskelijoita tulisi rohkaista ”liikaamaan kätensä” työskentelemällä aluksi selvästi vajavaisten, kokeilevien, alustavien ja osittaisten ratkaisujen synnyttämiseksi. On myös hyvä tietää, että sovelluksien kannalta usein lopullista oikeaa mallia ei ole tai sen ratkaisun etsintä on toivotonta. On siis tyytyminen riittävän hyviin toimiviin ratkaisuihin.

Koska matemaattisen mallin rakentaminen vaatii matematiikan perustaitoja, mallinnuksen opetus voi alkaa vasta matematiikan peruskurssien jälkeen. Matemaattisen mallintamisen opiskelu poikkeaa matematiikan tavallisesta opetuksesta monella tavalla. Opiskelu noudattaa mallinnusprosessin vaiheita.

- Ensinnä on rakennettava ilmiön matemaattinen malli. Opetuskäyttöön tarvitaan helposti mallinnettavia riittävän yksinkertaisia ilmiöitä. Ilmiön tulisi myös olla tuttu opiskelijoille arkielämästä. Joillakin opiskelijoilla saattaa itsellään olla ehdotuksia heitä kiinnostavien ilmiöiden mallintamisesta.
- Mallin yhtälöt ratkaistaan tavallisesti tietokoneella ja sopivalta simulointiohjelmistolla. Tärkeimpiä ovat Matlab (<http://www.mathworks.com/>), Maple (<http://www.mapleapps.com/>), Mathematica (<http://www.wolfram.com/>). Mainittakoon myös suomalainen Elmer (<http://www.csc.fi/elmer/>). Opiskelijoiden tulisi myös hallita tarvittavat matemaattiset ratkaisumenetelmät ja mallinnusohjelmistojen ohjelmointi ja käyttö. Nämä taidot voidaan tietysti opiskellakin mallinnusprojektin aikana.
- Tärkeä osa tulosten tarkastelua on mallin validointi eli simulointitulosten laadun ja tarkkuuden arviointi. Miten tarkkoja tulokset ovat? Millä oletuksilla tulokset ovat voimassa? Mitkä ovat mallin rajoitukset?

- Lopuksi tarkastellaan sitä, mitä itse tutkittavasta ilmiöstä saadaan selville mallin ja simulointitulosten avulla. Jos malli esittää kiinnostavaa ilmiötä, tulosten tarkastelu on jännittävää.

Mallinnuksen opiskelu on usein järkevää ja hyödyllistä järjestää opiskelijoiden ryhmätyönä. Ryhmässä mallinnusprojektin tehtävät voidaan jakaa monella tavalla, esimerkiksi matemaattisen mallin rakentamiseen, simulointiin ja tulosten esittämiseen. Koska mallinnuksen ongelmat ovat avoimia, niissä ei yleensä ole yhtä ainoaa oikeaa ratkaisua. Yhtä ja samaa ongelmaa voidaan lähestyä monella tavalla ja ratkaisutapoja voidaan vertailla. Tästä syystä useilla ryhmillä voi olla samoja mallinnustehtäviä. Opiskelijaryhmät voivat vertailla tuloksiaan, perustella ratkaisujaan ja pyytää muita ryhmiä perustelevaan tekemiään ratkaisuja.

Mallinnuksen opiskelussa toteutuvat mielekkään ja tarkoituksenmukaisen opiskelun kriteerit, joiden mukaan oppimisen tulisi olla opiskelijoiden aktiivista toimintaa, jossa tietoa rakennetaan yhteistoiminnallisesti ja tavoitteellisesti mielekkäässä yhteydessä reaali maailmaan. Opiskelijaryhmien projektin tuloksia esitetään ja niistä saadaan palautetta [3]. Oppimistulosten tulisi olla helposti siirrettävissä uusiin yhteyksiin [6].

[14]

1.3 Mallinnuksen oppimateriaalit

Mallinnuksen kurssin tulee sisältää julkaistuihin tapausesimerkkeihin tutustumista, oppikirjatekstien lukemista ja harjoitustehtävien ratkomista. Varsinainen haaste ja kiintoisan opetussisällön luoja on opiskelijoiden saattaminen avoimien reaalisesta elämästä nousevien mallinnustehtävien pariin. Tällaisia kysymyksiä saattaa löytyä opiskelijoiden tai kurssin ohjaajien muiden toimintojen piiristä, harrastusten, kesätyön tai vaikkapa vanhempien ammatin aihepiireistä. Sanomalehtien, ammattijulkaisujen ja uutisten lukeminen matemaattisesti uteliaalla silmällä nostaa joskus esiin mallinnusprobleemoiksi sopivia kysymyksiä.

Hyvä mallinnuksen oppimateriaali

- sisältää kiintoisan kokoelman erilaisia tapausesimerkkejä, jotka herättävät opiskelijan uteliaisuutta
- valaisee mallien monipuolista käyttöä eri tarkoituksiin
- kuvaa mallin rakentumista yksinkertaisista versioista kohti tarkempia ja mutkikkaampia

- valaisee mallinnustilanteiden usein monitieteistä luonnetta ja ryhmätyön merkitystä
- auttaa ymmärtämään sitä, ettei usein täsmälleen oikeata mallia ja ratkaisua ole
- viittaa mallien käytön konkreettisiin hyötyihin ja
- sitoo yhteen useiden aiempien matematiikan kurssien tietoja.

Mallinnuksen opetusta voidaan toteuttaa eri tavoin. Perinteinen luentokurssi, jossa on viikoittaisia harjoituksia, on yksi mahdollisuus. On ehdottoman tärkeää ottaa käyttöön ryhmätyöskentely ja laskentatyökalut tietokonealuokassa. Onnistuneempi toteutus on luultavasti silloin, kun kurssiin sisältyy usean viikon ajalle ulottuva projektityö, jonka etenemisestä ryhmät raportoivat viikoittain.

Hyvien harjoitus esimerkkien ja pienimuotoisten eri vaikeusasteita edustavien projektiaiheiden löytäminen on mallinnuksen opetuksen kannalta tärkeää. Monipuolisesti eri aloja valottavat ongelmat auttavat inspiroivan oppimiskokemuksen rakentamisessa. Yhteydenpito eri aloihin, innovatiivisiin prosesseihin, yhteiskunnan kehityksen tasoihin on tarpeen. Jos kukaan alalla toimiva opettaja valmistaisi vuosittain 1–2 uutta mielenkiintoista mallinnusprojektin aihetta ja ne koottaisiin sopivaan verkkoympäristöön, saataisiin riittävä varanto tukemaan kiinnostavaa ja ajankohtaista mallinnuskurssin toimintaa. Joten: let us keep in touch.

Kirjallisuutta

- [1] C. Haines, P. Galbraith, W. Blum, and S. Khan, editors. *Mathematical modelling: Education, engineering and economics (ICTMA 12)* Horwood Publishing, Chichester, 2007.
- [2] S. K. Houston, W. Blum, I. D. Huntley, and N. T. Neill, editors. *Teaching & learning mathematical modelling: Innovation, investigation and application (ICTMA 7)* Albion Publishing (now Horwood Publishing), Chichester, 1997.
- [3] D. H. Jonassen. Supporting communities of learners with technology: A vision for integrating technology with learning in schools. *Educational Technology*, 35(4):60–63, 1995.
- [4] W. F. Lucas. The impact and benefits of mathematical modeling. In D. R. Schier and K. T. Wallenius, editors, *Applied Mathematical Modeling: a multidisciplinary approach*. Chapman & Hall, London, 1999.
- [16] J. F. Matos, S. K. Houston, W. Blum, and S. P. Carreira, editors. *Modelling and mathematics education: ICTMA 9 – Applications in science and technology* Horwood Publishing, Chichester, 2001.
- [6] H. Ruokamo and S. Pohjolainen. Pedagogical principles for evaluation of hypermedia based learning environments in mathematics. *Journal for Universal Computer Science*, 4(3):292–307, 1998. <http://www.iicm.edu/jucs>.

2

Mallit ja sovellukset

MATTI HEILIÖ

2.1 *Mallit, teknologia ja laskenta*

[17]

Laskentateknologian kehitys on laajentanut matematiikan sovellusmahdollisuuksia. Laskentatehon ja numeriiikan kehittyessä yhä vaativammat menetelmät, mutkikkaammat systeemimallit ja realistisempi ilmiöiden laskennallinen simulointi ovat tulleet mahdolliseksi. Tämä on ”matemaattisen teknologian aikakauden” punainen lanka ja selittää matematiikan osaamisen ja mallinnuksen tarpeen.

Kehittyneet menetelmät ja matemaattiset mallit ovat valjastettu tuotteiden suunnitteluun, tuotannon ohjaukseen, yrityksen strategian muotoiluun ja kustannusten optimointiin. Pääomaoperaatioiden suunnittelua ja vakuutustoimintaa harjoittavat yritykset käyttävät kehittyneitä menetelmiä riskiskenaarioiden analyysiin sekä rahoitus- ja vakuutus tuotteiden suunnitteluun.

Luonnontieteet, tekniikka ja insinööritieteet ovat tunnetusti olleet matemaattisten menetelmien sovellusalueita. Merkillepantavaa on kuitenkin monien muiden käyttöalueiden vahvistuminen. Näistä esimerkkeinä biotieteet, sosiaalitieteet, hallinto ja talous. Informaation siirto, bioprosessit ja finanssimaailman instrumentit ovat esimerkkejä, joissa huippututkimus ja reaalielämän tarpeet ovat kiinteässä vuorovaikutuksessa.

2.1.1 *Matematiikka ja eri alojen kehitys*

Biotieteet

Yksi vilkkaimpia soveltavan matematiikan kehityksen aloja on viime vuosina ollut biotieteiden kenttä. Biologisten rakenteiden ja prosessien kuvailu matemaattisten mallien avulla on edistynyt valtavasti tietokoneajan mukana ja ilmiöiden laskennallinen simulointi on inspiroinut matematiikan teorian kehitystä.

Solu, elämän perusyksikkö, on hienovarainen systeemi, miniatyyrikoinen kemiallinen tehdas, termo-hydro-elektrinen reaktori rakenteineen ja säätökoodeineen. Erilaistuneita solurakenteita on lukemattomia. Solupopulaatiot ja yhteen kytkeytyvät solujen verkostot muodostavat vuorovaikuttavia järjestelmiä. Näiden kuvailu, toiminnan ymmärtäminen matemaattisen mallinnuksen keinoin on muodostunut vilkkaan tutkimuksen kohteeksi. Mallien avulla toivotaan voitavan imitoida ja ymmärtää esimerkiksi entsyymireaktioiden dynamiikkaa, erilaisten jarruttavien ja katalyyttisten tapahtumien tai oskillaatioiden ilmentymistä.

[18]

Ympäristö ja ekologia

Ekologisen tietoisuuden kasvu on lisännyt kiinnostusta ymmärtää prosesseja maapallon biosfäärissä, ilmakehässä, merien pinnalla ja syvällä pinnan alla. Huolenpidon kohteeksi noussut vyöhyke ulottuu myös maankuoren sisään ja ilmakehän ulkopuolelle lähiavaruuteen. Tämä ilmiöiden laaja skaala tarjoaa haastavia tehtäviä matemaattiselle mallinnukselle ja laskennallisille menetelmille.

Valtamerien virtauskuvioita, ilmaston virtauksia ja partikkeleiden ja saasteiden leviämistä kuvataan matemaattisilla malleilla. Eri ilmiöitä, kuten ukkonen, tornadot sekä sekoittumis- ja leviämisprosessit, yritetään ymmärtää tutkimalla niitä kuvaavien yhtälöiden ominaisuuksia. Mallinnuksen avulla on saatu aikaan ymmärrystä globaalien sääilmiöiden mekanismeista, tarkennuksia hurrikaanien rataennusteisiin, menetelmiä otsoniaukon mittaamiseen jne.

Ekosysteemin ravintoketjun herkän dynamiikan kuvailuun tarvitaan systeemianalyysin menetelmiä, mm. kytkettyjen systeemien ja ei-lineaaristen efektiön ymmärtämistä. Kuvailun haasteellisuutta lisäävät mutkikkaat reunaehdot, vapaa rajapinta -ilmiöt, huokoiset väliaineet, monifaasivirtaukset jne. Matemaattinen mallinnus ja simulointi ovat osa kestäväen kehityksen mahdollistavaa ympäristöpäätöksenteon välineistöä.

Sosiaalitieteet ja humanistinen tutkimus

Tarvitsevatko historiantutkijat, psykologit ja kielen tutkijat matematiikkaa? Entäpä runouden ja kirjallisuuden tutkijat? Kyllä vain ja heidänkin olisi hyvä olla asiasta perillä. Sosiaalisilla ja humanistisilla aloilla käsitellään suuria määriä usein hienovaraisen moniulotteista dataa. Haasteena on saada hahmotetuksi rakenteita, järkeviä yleistyksiä, asioiden riippuvuuksia ja mekanismeja, jotka auttaisivat varsinaista ilmiöiden ymmärtämisen tavoitetta. Mutkikkaiden datavarastojen käsittely kehittyneiden analyysivälineiden avulla johtaa matemaattisiin kysymyksiin. Niin sanotut data mining -tekniikat ovat yhdistelmiä tietoteknistä neuvokkuutta, informatiikkaa ja matemaattisia menetelmiä. Jotkut arkeologian lämmäritystekniikat, esimerkiksi radiohiilimenetelmä ja vuosirengasketjujen yhteensovitus nojaavat matematiikkaan.

Kielen rakenteen tutkimuksessa nojaututaan statistisiin menetelmiin mm. kirjainten, tavujen ja sanojen esiintyvyyden stokastisia rakenteita kartoittamalla. Erilaisia algebrallisia käsitteitä ja diskreettejä rakenteita tarvitaan kielen syntaksin ja kieliopillisten piirteiden kuvailussa. Tällaiset menetelmät ovat tulleet ajankohtaisiksi aikakaudella, jolloin pyritään rakentamaan tekniikkaa esimerkiksi automaattiseen kielen merkityksien tunnistukseen tai koneelliseen kääntämiseen. Matemaattiset ideat ovat keskeisiä myös tietoverkoissa toimivien hakukoneiden suunnittelussa ja muissa digitaaliajan informatiikan sovelluksissa.

[19]

Talous ja hallinto

Nykyaikaisen yhteiskunnan päivittäinen toiminta on riippuvainen laajoista järjestelmistä (liikenne-, kuljetus- ja jakelujärjestelmät, tiedonsiirto ja viestintä, energian jakelu tai kunnallistekniset palvelut, liike-elämän materiaali- virrat ja taloushallinto). Näiden järjestelmien ja niihin liittyvien tietojärjestelmien suunnittelu, seuranta ja ohjaus vaativat laskennallisia menetelmiä ja niiden kehitys tarjoaa mahdollisuuksia matemaattisten innovaatioiden soveltamiseen. Systeemimalleille, logistiikan ja operaatiotutkimuksen menetelmille ja simulointimalleille on käyttöä.

Liikkeenjohdon tietojärjestelmissä matemaattiset menetelmät on valjastettu eri tavoin käyttöön. Ekonometristen mallien avulla kuvataan kansantalouden ja elinkeinoelämän ilmiöitä. Riskianalyysi, peliteoria ja päätösteoria tarjoavat välineitä strategisten päätösten analysointiin, sovellusalueina voivat olla esimerkiksi investointisuunnittelu, hinnoittelu, rahoituksen strategiat tai osakesalkun hallinta.

Rahoitusmarkkinat ja rahoitusinstrumenttien kehitys, esimerkiksi optioiden hinnoittelu, ovat tarjonneet jännittävän ja viime vuosina nopeasti vilkastuneen soveltavan matematiikan alueen. Tämä ilmiö selittyi paitsi

maailmantalouden suhdanneilmiöillä myös – jälleen kerran – tietotekniikan kehityksen seurauksena. Rahoitusmarkkinoiden, kaupan ja pankkitoiminnan tapahtumat tallentuvat muistiin tic-by-tic-aikasarjoina, joita on tietoverkkojen vuoksi mahdollista analysoida lähes reaaliajassa. Tämä on tehnyt elektroniset kaupankäyntijärjestelmät mahdollisiksi ja markkinoiden mekanismeja oikein jäljittelevät mallit ja teoriat kullan arvoiksi – kirjaimellisesti. Vuonna 2008 puhjennut rahoitusmarkkinoiden kriisi osoitti toisaalta järjestelmän vaarat ja mallien kritiikittömän käytön hurjat seuraukset.

2.1.2 Mallit, teknologia ja laskenta

Nykyajan teollisuus on erityisesti Euroopan kehittyvissä maissa kasvavassa määrin high tech -teollisuutta. Laskennallisesti vaativia ja tietotekniikkaan pohjaavia menetelmiä sovelletaan kaikilla tasoilla. Matemaattisista menetelmistä on tullut keskeinen osatekijä menestyksekkään tutkimus- ja kehitystoiminnan apuneuvona.

Simulointi merkitsee laitteen, systeemin, eliön tai prosessin toiminnan jäljittelyä. Systeemi kuvataan joukolla loogisia, symbolisia, algebrallisia jne. lausekkeita ja yhtälöitä, joilla ilmaistaan mallin kuvaaman kohteen rakennosat ja niiden väliset kytkennät sekä toimintasäännöt. Jos onnistumme laskemaan systeemi yhtälöiden ratkaisun, saamme keinon arvioida systeemin toimintaa – tässä matemaattisen simuloinnin idea lyhyesti. Usein systeemimallin ratkaiseminen onnistuu vain numeerisesti kokeilemalla tietokoneen ratkoessa ja taulukoidessa miljoonittain sopivasti sirotellen valittuja yksittäistapauksia. Usein simulointi viittaa tällaiseen toimintaan. Jos mallin tilayhtälöille voidaan johtaa matemaattinen ratkaisualgoritmi, saadaan huomattavia parannuksia mallin ymmärrettävyyteen, tarkkuuteen ja laskennan tehokkuuteen.

Matemaattinen simulointi ja laskennalliset mallit ovat tehokas ja monikäyttöinen apuväline tutkimus- ja kehittämistehtävissä (t&k). Mallien avulla voidaan

- tutkia ja ymmärtää järjestelmän käyttäytymistä eri tilanteissa
- suorittaa erilaisia ranneanalyysin tehtäviä ja todentaa järjestelmän tai laitteen suoritusominaisuuksia, kapasiteetteja jne.
- tehostaa tai korvata koejärjestelyjä, protovalmistusta jne.
- suorittaa ”mitä, jos” -kokeiluja, testata muutoksien vaikutuksia, optimoida tiettyjä ominaisuuksia

- analysoida riskitekijöitä ja vikaantumismekanismeja
- luoda visuaalisia kuvauksia, animaatioita järjestelmän toiminnasta ennen sen toteuttamista
- luoda kuvitteellisia materiaaleja ja keinotekoisia koeolosuhteita
- jäljitellä fysikaalisia ääriolosuhteita, aikaskaaloja, joissa havaitseminen ja mittaaminen eivät ole mahdollisia
- hallita ja analysoida mittauksista ja prosessien seurannasta kertyvää dataa
- hallita laajojen järjestelmien ja tietokantojen tietovirtoja ja tietomassaa.

Matemaattinen fysiikka ja mekaniikka

Teknologisen tutkimuksen pienimmät ”laitteet” ja yksikköprosessit ovat atomien kokoluokkaa. Kemian reaktiokulkujen hallinta, ymmärtäminen ja mikroelektroniikan ja nanoteknologian komponenttien toiminnan kuvaus edellyttävät itse materian ominaisuuksien huomioimista kvantti-ilmiöiden tasolta alkaen. Fysiikan kehitys nojautuu syvällisiin matemaattisen ajattelun tuotoksiin. Matematiikan perustutkimuksen vaikutus näkyy elämässämme arkipäiväisten kojeiden mikroelektroniikan toiminnassa.

Dynaamisten monikomponenttisten järjestelmien tilavaihtoehtojen, liiketilojen ja toimintadynamiikan mallinnuksessa ja tutkimuksessa on havaittu yhteydet monistojen geometrian ja algebrallisen topologian kaltaisten teoreettisten oppien sisältöihin. Moninivelisen nosturin puomijärjestelmän ohjauksessa ja liiketilojen mallinnuksessa hyödynnetään algebrallisen geometrian ja kommutatiivisen algebran tuottamia tietoja ja menetelmiä.

Dynaamisten mekaanisten järjestelmien malleista esimerkkejä ovat moninivelinen robottikäsi, nosturimekanismi, junan telijärjestelmä tai vaikkapa Lontoon Thames-joen yli rakennettu epäonninen jalankulkusilta. Arveluttavan huojunnan vuoksi silta jouduttiin sulkemaan tuoreeltaan. Katastrofin analyysi simulointimallin avulla osoitti yllättävän syyn, tuulivirtausten sijasta huojunnan käynnisti jalankulkijoiden jonon käyttäytyminen, siirtyily huojunnan tahdissa puolelta toiselle ja siitä syntyvä takaisin-kytkentä, jota ei ollut alkuperäisessä mallissa otettu huomioon.

Tietotekniikan menetelmäkehitys

Matematiikan ja tietotekniikan vuorovaikutus tapahtuu molempiin suuntiin ja useilla tasoilla. Matemaattisten proseduurien toteuttaminen edellyttää niiden kääntämistä laskulaitteiden kielellä muotoilluksi algoritmiksi ja matemaattisten mallien soveltaminen on näin lähes poikkeuksetta lopulta tietotekniikan haaste.

Toisaalta tietotekniikan menetelmien kehitys nojaa useassa kohdassa matematiikkaan. Algoritmien teoria, rinnakkaisalgoritmien tutkimus ja ohjelmistojen verifiointikysymykset ovat tällaisia esimerkkejä. Tietorakenteiden ja muistinhallinnan tehtävissä, hajautettujen ja time-sharing-algoritmien toteutuksessa tarvitaan vaativia algebrallisten, kombinatoristen ja probabilististen menetelmien sovelluksia.

Kiehtova alue matemaattisten sovellusten kannalta on tietoliikenne. Tiedon ja datan koodaukseen ja siirtoon luodut järjestelmät perustuvat matemaattisiin ajatustapoihin. Koodaus ja koodijärjestelmien väliset muunnoskysymykset tarvitsevat algebraa, kombinatoriikkaa, todennäköisyysteoriaa, diskreetin optimoinnin menetelmiä ja automaattien ja formaalisten kielten teoriaa.

[22]

Mittaukset ja instrumenttitekniologia

Korkean teknologian aikakausi näkyy erityisen hyvin mittaus- ja instrumentointitekniologian alueella. Erilaisten herkkien aistielinten, anturien ja mittausjärjestelmien kehitys on edennyt puolijohteiden, mikroelektronikan, uusien materiaalien, optiikan sovellusten ja tietotekniikan yhteistuloksena. Tämä on mahdollistanut yhä hienovaraisemmat prosessijärjestelmät, mikä synnyttää valtavasti mittaustietoa. Mittausdatan käsittelyn älykkäät menetelmät ovat soveltavan matematiikan haaste.

Mittaustekniikan instrumenttien kehitystyö nojaa laskennallisiin menetelmiin, esimerkkinä mikroskaalan komponenttien suunnittelu sekä materiaalien ja työstömenetelmien mallintaminen. Mittaustiedon käsittely on usein matemaattinen haaste, erityisesti silloin, jos mitattava suure päätellään epäsuorasti havaituista suureista. Tällainen voisi olla mikroliuskan taipumiseen perustuva kiihtyvyyssanturi tai optisesti herkän materiaalin värimuutokseen perustuva sähköinen anturi. Erityisen haastavia tiedonkäsittelyn ongelmia ovat kuvantamis- ja tomografiasovellukset ja kohdetta rikkomattomat testimenetelmät, jossa mitattava asia päätellään lukuisten eri suunnista tehtyjen absorptiohavaintojen perusteella käänteisongelmien teoriaan nojaten.

Kognitiotiede ja laskennallinen aistimustekniikka

Kehittyvä kognitioteknologia ja koneaistit ovat tietotekniikan ja kehittyneen mittaustekniikan yhteisiä perillisiä. Tämä on erilaisista kohteista koottavaa havaintodatan keruuta ja tähän dataan pohjautuvaa analyysia, jonka tarkoituksena on tunnistaa tapahtumia, merkkejä, kuvioita ja merkityksiä. Tämä signaali voi olla yhtä hyvin tekstijono, siirtymämittaussignaali, kromatografian spektri, EKG, EEG, valheenpaljastimen tulosnauha tai videokuva. Signaalien analysoinnin matemaattisten apuneuvojen kehitys tarkoittaa muun muassa aikasarjamallien tutkimusta, moniulotteisten signaalien analyysimenetelmiä, epälineaaristen suotimien tutkimusta, luokitteu-
[23]

Materiaalitutkimus ja mallinnus

Innovaatiot uusien materiaalien luomisessa ovat teknologian aikakauden ilmentymiä. Molekyylitasolta alkaen räätälöityjen yhdisteiden, komposiittimateriaalien ja nanomittakaavan kerrosrakenteiden avulla on mahdollista rakentaa uusia täsmäominaisuuksilla varustettuja raaka-aineita ja mikroskooppisia komponentteja. Materiaalien ominaisuuksien ennustaminen niiden kemiallisesta ja mikrorakenteesta lähtien ja valmistusprosessin eri vaiheiden kuvaaminen mallien avulla on tärkeä matemaattisen teknologian sektori. Erityisistä sovelluskohteista voitaisiin mainita polymeeriyhdisteiden kiteytysprosessien mallintaminen ja komposiittimateriaalien ominaisuuksien simulointi. Muistavat tai optoaktiiviset materiaalit, granulaariset, jauhe-, pulveri- ja aerosoliomuodossa esiintyvät materiaalit johtavat kiintoisiin mallinnuskysymyksiin.

Geometrinen mallinnus ja tuotesuunnittelu

Matemaattiset mallit toimivat tuotesuunnittelun apuvälineenä mm. kuvaus- ja visualisointijärjestelmien toteutuksessa (CAD). Autoteollisuuden korimuotoilu, huonekaluteollisuuden muotoilu tai kankaiden leikkaaminen vaatesuunnittelussa ovat esimerkkejä tietokoneavusteisesta suunnittelusta. Tuotteen geometrinen malli vaatii usein tuntuva matemaatiikan käyttöä, joskus splinisovituksia, interpolaatioteoriaa, Bezierin käyriä ja pintoja. Usein mallista johdetaan tiedot työstöä tekevän koneen ohjaamiseen.

Viime vuosikymmeninä kehittynyt alue on muodon optimointi. Geometrisessa muotoilussa voidaan ottaa huomioon haluttuja rakenneominaisuuksia ja etsiä optimiratkaisua annettujen kriteerien mukaan. Laivojen muotoilu, sylinterin palotilan muoto tai turbiinin siipiprofiili voisivat olla esimerkkejä tästä.

Tuotannonohjaus ja prosessisäätö

Tuotantoprosessien kehitystavoitteet johtavat kohti lisääntyvää automaatiota, joustavaa reaaliaikaista ohjausta ja saumattomasti yhdessä toimivia osajärjestelmiä. Prosessien säätö ja tuotannonohjaus ovat osa uutta tekniikkaa jossa kehityksen avaintekijöinä ovat matemaattiset menetelmät. Prosessien ohjauksen osalta anturitekniologia ja tiedonkeruun järjestelmät merkitsevät lisääntyvää ja tarkentuvaa prosessidataa, jonka hyödyntäminen on haaste. Koesuunnittelu ja modernit data-analyysin menetelmät, moniulotteiset mittaussignaalit, prosessi-identifikaatio ja mallipohjainen säätö ovat ajalle tyypillistä matematiikkapitoista teknologiaa. Uusia menetelmiä edustavat sumea säätö, robustit menetelmät, epälineaariset mallit ja stokastiset systeemit.

Visualisointi

Elokuvateollisuuden erikoistehosteiden luominen matemaattisen mallinnuksen, simuloinnin ja tietokonegrafiikan keinoin on esimerkki visualisointitekniologiasta. Tämä sovellusalue on viime vuosina kehittynyt nopeasti, alkaen Jurassic Park ja Titanic-elokuvista. Visualisointi on tärkeä komponentti myös esimerkiksi teknisessä suunnittelussa, ohjelmistojen käyttöliittymien toteutuksessa, koulutussimulaattoreiden rakentamisessa, järjestelmien toimintaa havainnollistavien animaatioiden luomisessa sekä lääketieteen diagnostisen tiedon ja satelliittidatan analysoinnissa.

Nykytekniologia mahdollistaa hyvin uskottavan näköisen näkymän luomisen lentokoneen ohjaussimulaattorin ikkunaan, ihmisen kehon havainnekuvan verisuoniston leikkaussuunnitelman tekemistä varten, hirmuliskojen taistelun animaation tai laivan keulan aaltopärskeiden visualisoinnin.

Matemaattinen teknologiasiirto

Matemaattinen teknologiasiirto toimii parhaimmillaan kaksisuuntaisena. Tutkimuksen tulokset siirtyvät yhteiskunnan ja teollisuuden prosessien osatekijöiksi. Reaalimaailman kehityshaasteet suuntaavat ja inspiroivat matematiikan tutkimusta. Onnistuessaan tämä tiedonsiirto voi synnyttää huomattavia edistysaskeleita.

Teollisuusmatematiikka-sanaa on käytetty viittaamaan matemaattisten menetelmien käyttöön tuotantoelämän prosesseissa. Sana ei ole osuvin mahdollinen. On selvää, että mitään erityistä matemaattisen teorian erityislajia nimeltä teollisuusmatematiikka ei voida erottaa. On vain matemaattista tutkimusta, joka vaihtelevin tavoin osoittautuu hyödylliseksi

käytännön apuvälineenä. Kansainvälisesti vakiintuneen termin ”industrial mathematics” kääntämistä suomen kieleen vaikeuttaa sekin, että *industry*-sana tunnetusti kattaa hyvin laajan tuotannollisen toiminnan alueen, mukaan lukien finanssialan, palvelutoimialat ja viihdetuotannon.

Matemaattisen teknologiasiirron toteuttaminen ei ole yksinkertainen asia. Usein kysymys on jopa onnekkasta yhteensattumasta eri osaamisaloja edustavien spesialistien, tieteellisen uteliaisuuden ja sopivasti ajoittuvan tietotarpeen kohdatessa. Innovaatioprosessia on tunnetusti vaikea ohjata ja edistys on usein yllätyksellistä, joskus paradoksaalista. Eri maissa on kehitelty toimintamalleja matemaattisen ongelmanratkaisun ja aivoriihi-ajatuksen toteuttamiseksi.

2.1.3 Teollisuusesimerkkejä

Tässä luvussa esitellään mallinnushaasteita sisältäviä esimerkkejä. Koska esimerkit ovat reaali maailmasta tuotantoelämän eri tahoilta, ne ovat laajoja, monitahoisia ja sellaisenaan liian vaativia mallinnuksen kurssin harjoitustehtäviksi. Niiden ratkomiseen tarvittaisiin työryhmä, poikkitieteellistä asiantuntemusta sekä paljon aikaa. Kuvatuista tilanteista voi kuitenkin irrottaa osakysymyksiä, jotka sopivasti skaalattuina voisivat olla mallinnuksen kurssin harjoitustyön aiheita. Useimmat esimerkit perustuvat julkaistuihin tapauskuvauksiin, jotka toivottavasti tuottavat opiskelijoiden ja mallinnuskurssin tutoreiden mielikuvitukselle ärsykettä.

Esimerkit voidaan jaotella monella tavalla. Mallinnuksen sovelluksia voitaisiin jakaa teollisuusalan mukaan (kemia, lääke, metalli, autoteollisuus, biotekniikka, digitaalinen teollisuus jne.).

Toisaalta jako voitaisiin tehdä tehtävänannon eli sovelluksessa keskeisen teknologisen haasteen mukaan. Näitä voivat olla laitteen, mekanismin, prosessin tai verkoston toiminnan kuvaaminen, mittaus- tai ohjausinformaation analysointi, rakenteen tai prosessin suunnittelu ja materiaalin käyttäytymisen tutkiminen.

Jaottelu voisi tapahtua myös mallin käyttötarkoituksen mukaan. Tällöin tavoitteena voi olla mekanismin toiminnan ymmärtäminen, ennustaminen, ohjaus ja säätäminen, mittaaminen tai mittausten suunnittelu tai toisaalta kuvainformaation tuottaminen tai muokkaus, laitteen tai prosessin suunnittelu, optimointi tai testaus. Lopulta jaottelu voisi nojautua mallin perustana olevan matematiikan alaluokitukseen, jolloin mallien ryhmitteilyä voisi yrittää tehdä asteikolla differentiaaliyhtälöt, osittaisdifferentiaaliyhtälöt, tilastolliset mallit, stokastiset prosessit ja aikasarjamallit, diskreetit mallit, optimointimenetelmät, numeeriset menetelmät, analyysi ja asymp-toottiset menetelmät.

Luokittelutavat johtaisivat erilaisiin luetteloihin. Reaalimaailman ongelmat ovat monitahoisia, eivätkä ne kunnioita matematiikan alaluokituksia. Siispä alla oleva lista on yhtä kirjava kuin tuotantoelämä vaihtelevine toimintoineen ja haasteineen.

1. Kliinisen verianalyysitestin suunnittelu

Suunniteltava testilaitte on pieni rasia, jossa on kemiallisesti aktiivinen ainekoostumus. Rasiaan pudotetaan pisara laboratoriossa otetusta verinäytteestä. Testattavassa veressä oleva aine aiheuttaa reaktion, jonka vastetta kuvaa dose-response-käyrä. Mallilla halutaan kuvata mitattavan entsyymin pitoisuuden aiheuttamaa vastetta.

Haasteena on kuvata testissä tapahtuvien reaktioiden kinetiikka DY-mallilla. Testiaineen koostumus määrää mallin vakiot, joiden arvot tulee määrätä. Testiaineen koostumus halutaan sellaiseksi, että ihmisen tyypilliset mittausarvot osuvat dose-response-käyrän kasvualueelle.

2. Elintarviketeollisuuden laadunvarmistus

[26]

Lihapullien pakastuslinjalla liukuhihnalla kulkevat lihapullat jäädytetään kylmän ilmavirran avulla. Oikean pakastusajan varmistamiseksi olisi tiedettävä aika, jonka lihapullan jäätyminen kestää. Haasteena ovat muun muassa lihapullien poikkeavat muodot, ja epätavanomainen materiaali ja virtausilmiöt. Tehtävänä on laatia malli lihapullan jäähtymisestä ja jäätymisajan etenemisestä kylmän ilmavirran vaikutuksesta.

Vastaavia laadunvalvonnan prosesseja ovat oluen pastörointilinja sekä viljankuivurin ohjaus, joita molempia on tutkittu matemaattisen mallinnuksen avulla. Viljankuivatuksessa haasteena on kuvata kuuman ilmavirran etenemistä rakeisen jyvämässän läpi sekä kosteuden siirtymistä viljasta ilmaan ja sen mukana ulos.

Tölkkeihin pakattujen ja pitkään varastoitavien elintarvikkeiden käyttöturvallisuutta on kehitetty matemaattisten mallien tuella. Haasteena on kuvata materiaalissa käynnistyvät haitalliset biokemialliset prosessit ja toisaalta kuvata niiden ehkäisemiseen tarkoitettujen toimenpiteiden vaikutus.

Sterilointitekniikat käyttävät joskus lämpöä, joskus säteilyä, joskus taas desinfiioivia kemikaaleja. Kaikille on yhteistä tarve optimoida oikea annostus. Säilykepurkkien sterilointilinjant optimaalinen ohjaus on esimerkki tällaisesta mallinnustehtävästä. Oliiviöljyn turvallisen säilytysajan pidentäminen on toinen esimerkki. Mallin avulla olisi kuvattava ne kemialliset ja biologiset prosessit, jotka aikaansaavat tuotteen härskiintymisen, sekä selvítettävä, mitä asioita muuttamalla kehitystä voitaisiin hidastaa.

3. Ajoneuvon pyöränripustuksen mekaniikka

Autoteollisuudessa simuloidaan suunniteltavia rakenteita huolella mallien avulla ennen niiden valmistusta. Tavoitteena voi olla esimerkiksi mallintaa luotettavasti jousi-iskunvaimenninjärjestelmä sekä renkaan elastiset ominaisuudet. Mallissa on kuvattava tien epätasaisuus. Stokastiset prosessit ovat matemaattisia välineitä mekaanisten värähtelyjen kuvaamisessa. Tässä sovelluksessa erityistä on myös stokastiikan ja differentiaaliyhtälöiden kytkentä.

4. Kemiallisen tehdasprosessin dynamiikka

Kemiallisen tehdaslaitoksen prosessiympäristö koostuu joukosta säiliöitä, putkia, pumppuja, sekoittimia, lämmönsiirtimiä jne. Tehdasmallin haasteena on kuvata prosessin kemiallinen tila, pitoisuudet, virtaukset, lämpötilat ja reaktioiden nopeudet. Mallin tarkoituksena on hallita prosessia. Mallin avulla yritetään selvittää prosessin tasapainotilat, säätöjen muutokset, transientti-ilmiöt, ainetaseet jne. Erityisiä kysymyksiä voivat olla olomuotomuutokset, materiaalien rakenneominaisuudet, mutkikas geometria tai pintailmiöinä tapahtuvat reaktiot.

[27]

5. Verkostosuunnittelu

Verkkomallien avulla kuvattavia järjestelmiä voivat olla tietoliikenne, kuljetus ja jakelu tai tuotannon ja suunnittelun aikataulut. Mallien avulla voidaan tutkia kapasiteettikysymyksiä, redundanssia ja luotettavuutta, muutoksien vaikutuksia jne. Mallin avulla saatetaan selvittää suurkaupungin metrojunien aikataulun toimivuutta, ruuhka-ilmiöitä, myöhästelyjen kumuloitumista tai uuden suunniteltavan lisävuoron tai lisäyhteyden vaikutusta. Mobiiliviestinnän tukiasemaverkoston suunnittelu ja verkon suorituskykyanalyysi ovat nykyisin verkkomallien tärkeä sovellusalue.

6. Polymeerien kiteytys

Polymeerivalmistus on mutkikas satunnaisprosessi. Kiteen kasvun alkuhetki on pienen keskushiukkasen satunnainen syntymä eli nukleaatio. Tämä prosessi noudattaa spatiaalista statistiikkaa, jonka vaiheiden kuvauksessa tarvitaan satunnaisgeometrian nimellä kulkevaa matematiikkaa.

Kiteiden kasvu tuottaa satunnaismuotoja, näiden yhdistyminen (impingement) mutkikkaampia, usein fraktaalaisia rakenteita. Tuloksena on koagulaatio, kokkareet ja lopulta satunnainen kiderakenne. Prosessin kulkuun vaikuttavat mm. ainesosien pitoisuudet ja lämpötila.

Kiteytysprosessin mallilla halutaan kuvata prosessin kulkua, kasvuprosessiin vaikuttavia tekijöitä ja lopputuotteen morfologista koostumusta. Morfologia määrittää syntyvän materiaalin käyttöön ja muokkaamiseen liittyviä ominaisuuksia. Tarvittavia teoriavälineitä ovat mm. spatiaalinen Poisson-prosessi, satunnaisgeometria sekä fraktaali-käsitteet.

7. Teräksen jatkuvavalu

Sula teräs valuu valmistusastian aukosta jatkuvana prosessina, jähmettyen pinnalta alkaen. Jähmettymistä säädetään vesijähdytyksellä. Prosessin mallinnuksella halutaan kuvata sulan ja kiinteän rajapinnan muoto ja säättää vesijähdytystä oikean jähmettymisprofiilin aikaansaamiseksi. Haasteena ovat muun muassa lämmönsiirron mallintaminen, faasimuutosrajan määrittäminen ja jäähdytyksen optimiohjaus.

8. Autonkorin törmäystestit

[28]

Auton valmistuksessa kolariturvallisuus on avainasia. Varsinaisia törmäyskokeita edeltää numeeristen simulointimallien käyttö. Korirakenteesta muodostetaan tietokonemalli, jossa ovat mukana rakenneosien tarkka geometria, materiaalien ja liitoksien lujuudet sekä kimmoelastiset ominaisuudet. Mallin avulla toteutetaan törmäys laskennallisen simuloinnin muodossa. Menettely lyhentää suunnittelu- ja testivaiheita.

9. Optisen kuidun veto

Kuitu valmistetaan paksusta aihioista ohentamalla sitä vedon avulla. Aihio kuumennetaan ja sitä venytetään useassa vaiheessa. Kuitu suippenee vedon vaikutuksesta.

Kuidun suippeneminen halutaan kuvata mallin avulla tarkasti. Mallin avulla ohjataan kuumennusta ja venytystä. Prosessin ohjaus on tärkeä mm. laadunvalvonnan kannalta. Kohteena oleva materiaali on amorfina massa, jonka elastisuus riippuu lämpötilasta. Venytyksen tuloksena syntyvä suippeneva muoto on ns. vapaa rajapinta, joka tekee muodonmuutoksesta haastavan mallinnustehtävän.

10. Liikennevirran dynaaminen ohjaus

Liikenneverkon sujuvuus on merkittävä tekijä erityisesti metropolialueilla. Verkon toimintaa säädetään esimerkiksi valo-ohjauksella.

Liikennevirran käyttäytymistä kuvataan liikennemalleilla. Tarkastelun skaala voi olla esimerkiksi sellainen, jossa yksittäiset ajoneuvot kuvataan erillisinä objekteina. Mallissa kuvataan ajoneuvojen liikkumisen ja ajoneuvotiheyden tilastollisuutta sekä ajoneuvojen reaktioita toisiin tiellä tai kadulla liikkuviin. Tutkimuksen kohteena voi olla yksittäisen valoristeyksen toimivuus, jonomuodostus, läpiajoajat tai voidaan tutkia kaupungin osan ja usean valoristeyksen ja korttelin muodostaman järjestelmän toimivuutta. Pääteillä liikkuvan ajoneuvojonon käyttäytymistä on myös tutkittu mallien avulla. Malli voi selvittää ruuhkan aiheuttamaa hidastuvuutta, teillä olevan hidasteen synnyttämiä tukoksia ja jopa aaltomaisten tihentymien muodostumista liikennevirtaan, ääriesimerkkinä yllättäen syntyvä shokkiaaltona vahvistuva tihentymä, jonka tuloksena voi olla kolarisuma. Kun liikennevirran tarkasteluskaalaksi valitaan suuret ajoneuvomäärät, voidaan liikennevirtaa kuvata jatkuvan massan mielikuvan mukaisesti eli ottaa käyttöön fluidianalogia ja nesteiden tai oikeammin kokoonpuristuvan kaasun virtausmallit.

11. Kemiallinen työstö

Nykyaikainen valmistusteknologia hyödyntää kemiallisia reaktioita muotojen luomisessa. Mikropiirien valmistus ja nanoteknologia soveltavat etsaus-tekniikkaa. Kemiallinen reaktio etenee aineen pinnassa ja syövyttää tai kovertaa sitä. Tätä prosessia kuvataan ja ohjataan matemaattisen mallin avulla. Etsausprosessia kuvaava malli kertoo syöpyvän rintaman etenemisen ja pinnan muodon kehittymisen.

Mallin avulla saadaan tietää mahdollisesti eri komponentteja sisältävän syövytysprosessin lopputulos tai halutun muodon saamiseksi tarvittava syövytysohjelma. Eräissä kiderakenteissa voidaan liuoksen koostumuksella säädellä syöpmisen rintamasuuntaa ja työstää haluttuja muotoja. Toinen nykyaikainen työstötekniikka esimerkiksi mikroelektronikassa on elektronilitografia, jossa syövyttävänä mekanismina on elektronisuihku. Tämän prosessin kulkua kuvataan niin ikään matemaattisen mallin avulla. Malli ja sen matemaattinen haaste on täysin erilainen näissä kahdessa tapauksessa.

12. Elektrolyyttimaalaus

Auton korien, osien ja metallista valmistettujen tarve-esineiden maalauksessa käytetään ns. elektrolyyttimaalausta. Maalattava kappale upotetaan värihiukkasia sisältävään suspensioon. Nesteeseen synnytetään sähköinen kenttä.

Värihiukkaset ovat sähköisesti varattuja ja ne kulkeutuvat kappaleen pinnalle. Elektrodiin sijoittelu, väriaineen määrä ja upotuksen kesto vaikuttavat värjäyksen lopputulokseen. Kuvaamalla elektrolyyttiliuoksen sähkökenttä ja mallintamalla hiukkasten kulkeutuminen pystytään kuvaamaan, mihin maalihiukkaset kerääntyvät ja millainen kerrospaksuus eri osissa syntyy. Mallilla voidaan tutkia elektrodiin sijoittelun vaikutusta ja siten esimerkiksi varmistaa riittävä maalikerros kriittisissä kohdissa.

13. Monikappalemekaniikka

Laajat, yhteen kytketyistä mekaanisista komponenteista koostuvat järjestelmät ovat haaste mallinnuksen kannalta. Esimerkkinä voisi olla muunmuassa puominosturi, vaihdelaatikko, hihnakuuljetinjärjestelmä tai junan telijärjestelmä.

Tutkittavina ilmiöinä liikkuvan juna tapauksessa voivat olla jarrutus tai kiihdytys, värähtelyt ja stabiilisuus. Suuret, useista komponenteista koostuvat mallit ovat mahdollisia tehokaskannan aikana.

Junan pyörän ja ratakiskon kontakti on sinällään haastava ja monipuolinen mallinnustehtävä. Tutkittavia asioita ovat liukuminen, jarrutustilanteet, pyörän ja kiskon kuluminen, kontaktikohdan mallinnus kuten esimerkiksi kontaktipisteen siirtyminen kaarteissa.

[30]

Puominosturin mallissa voidaan tutkia, miten järjestelmään kuuluva hydraulinen sylinteri toimii kokonaisuuden osana. Sylinterin tekninen mitoitus, sen ohjausjärjestelmä koetetaan säätää oikeaksi ennen laitteen sarjatuotannon aloitusta. Puominosturin matemaattinen malli saattaa koostua 10–20 erilaisen osajärjestelmän malleista, joista osa on mekaanisia, osa hydraulisia, osa sähköisiä komponentteja. Monikomponenttimallit johtavat usein laajoihin DAE-yhtälösystemeihin (differential algebraic equation system).

Eräs tärkeä nykyaikainen sovellusalue ovat automaatiotekniikkaan liittyvät robotit ja kone-elimet. Näiden liikeratojen kuvaus, säätö ja optimointi ovat tärkeä laskennallisen tekniikan alue.

14. Meriteollisuus ja offshore-järjestelmät

Laivansuunnittelu nojaa matemaattisiin malleihin eri vaiheissa. Hydrodynaamisten mallien avulla etsitään rungon muodolle energiakulutuksen ja ohjattavuuden kannalta edullista muotoa. Laivan stabiilisuus dynaamisena systeeminä on vakava asia ja sitä tutkitaan mallien avulla.

Laivan rakennesuunnitteluun vaikuttavat lisäksi merenkäynti ja aallokko. Näiden vaikutusta tutkittaessa on kehitetty ns. simuloitua aaltokinematiikkaa, joka tarkoittaa aallokkoa kuvaavaa matemaattista mallia. Kelluvien

rakenteiden dynamiikka ja niihin kohdistuvat rasitukset koskevat myös muita meritekniisiä rakennelmia, esimerkkeinä öljynporauslautat, aallonmurtajat, laiturirakenteet, poijut ja ankkurimekanismit.

15. *Elektroniikka ja puolijohdeteollisuus*

Mikroelektroniikka nojaa vaativiin matemaattisiin malleihin. Nanomitakaavaa lähestyvien piirikomponenttien sähköistä toimintaa kuvaavia malleja kehitetään. Komponenttien valmistusteknologiassa tarvittava litografiatekniikka on kemiallista työstöä ja nojaa olennaisesti matemaattisen mallin käyttöön, kuten edellä kuvattiin.

Ennen kuin piirisuunnitelma viedään tuotantoon ja sen massavalmistusta aloitetaan, piirin toiminta testataan sähköisen piirimallin avulla. Malli on luonteeltaan yhtälöitä ja differentiaaliyhtälöitä käsittävä systeemi, jossa voi olla miljoonia muuttujia.

16. *Öllyteollisuus*

Öllyteollisuus nojaa matematiikkaan monissa kohdin. Öljyn etsinnässä maaperän mallit ja seismisten signaalien analysointi inversioteorian kaltaisen matematiikan keinoin ovat toiminnan perusta. Virtaukset maaperän huokoisissa materiaaleissa vaativat erityistä matematiikkaa. Putkistovirtaukset ja niiden mittaaminen ovat matemaattisesti vaativia tehtäviä. Öljyn saaminen maan uumenista pinnalle perustuu joissain menetelmissä paineistetun höyryn pumppaamiseen porausreikään. Tämän prosessin mallinnus eli öljyn ja höyryn käyttäytymisen tutkiminen ovat keino, jolla pyritään parantamaan pumppauksen tulosta. Raakaöljy sekä jauhetun hiilipölyn ja veden seos, ns. slurry, ovat materiaaleja, joiden reologiset ominaisuudet ovat joskus yllättäviä ja niiden käyttäytyminen putkistoissa johtavat mallinnuksen ongelmiin. Putkistovirtausten mittaaminen tomografian periaatteella on yksi kehittyvä ala.

[31]

17. *Digitaalinen kuvankäsittely*

Digitaalinen kuvankäsittely nojaa monissa kohdin matemaattisiin algoritmeihin ja malleihin. Tunnettuja esimerkkejä ovat kuvainformaation pakkaustekniikat, joilla säästetään muistia ja tehostetaan siirtokapasiteettia. Kuvainformaation käyttö laadunvalvonnassa ja diagnostiikassa on kasvava alue, ja näistä syntyvä hahmontunnistus ja muu kuva-analyysi nojaavat matemaattisiin menetelmiin. Värikuvien käsittelyssä värien hallinta ja ihmissilmän ominaisuuksien huomiointi tuottavat matemaattisesti haastavia kysymyksiä.

Joskus tehtävänä on häiriöllisen, samean kuvan palauttaminen eli rekonstruktio. Tämä matemaattisen mallinnuksen kannalta kiintoisa tilanne voi liittyä lääketieteen diagnostiikkaan tai teleskooppikuvan korjaamiseen. Digitaalisen still-kameran kuvan säätö (noise reduction, colour interpolation) nojaa matematiikkaan. Matemaattisesti mielenkiintoinen aihe on myös kolmiulotteisen geometrisen muodon rekonstruktio videosignaalin kaksiulotteisesta kuvanauhasta.

18. Tekstiiliteollisuus

Tekstiiliteollisuudesta nousee yllättäviä matemaattisen mallinnuksen haasteita. Nykyaikaisia materiaaleja ovat kuitukankaat eli non-woven-tekstiilit, joissa kuitujen yhteen kietoutuminen muodostaa satunnaisrakenteita. Näitä käytetään esimerkiksi hygieniatuotteissa, huonekaluissa ja vaatealusteollisuudessa. Kuitukankaiden valmistus tapahtuu pursottamalla polymeerimassaa hyvin pienten suuttimien läpi. Materiaali jähmettyy ilmavirrassa vajotessaan kuiduksi. Samalla kuitujen virtaan syntyy turbulenssia joka saa aikaan sen, että kuidut laskeutuessaan alla kulkevalle rainalle sekoittuvat ja muodostavat stokastisen kuiturakenteen.

[32]

Tässä prosessissa matemaattisten mallien avulla on tutkittu polymeerin virtausta suuttimen läpi ja kuidun muodostumista pursotuksen tuloksena, kuitujen värähtelyä ilmavirrassa, monien kuitujen tapauksessa niiden vuorovaikutusta keskenään. Itse kuitukankaan stokastisen rakenteen tutkimus on tärkeätä laadunvalvonnan kannalta. Monet kehittyneet matemaattiset menetelmät, kuten wavelet-analyysi, ovat osoittautuneet tarpeellisiksi.

Perinteisen tekstiilin valmistuksen puolelta mainittakoon kaksi esimerkkiä. Kutomakoneessa langan syöttömekanismi on monitahoinen dynaaminen systeemi. Lankaan kohdistuva kuormitus ja prosessin stabiilisuus ovat virheettömän toiminnan kannalta keskeisiä. Langan siirtomekanismi ja langan mekaaniset ominaisuudet ovat mallinnuksen kannalta haastavia kohtia.

Langan valmistusta edeltävä työvaiheet ovat karstausta ja kehrua. Karstauskoneessa tarkoituksena on saada kovin epäjärjestyneeseen kuitumassaan osittaista hallittua järjestystä, samansuuntaisuutta. Tämä tehdään erilaisilla mekaanisen raapimisen keinoilla. Villan tai puuvillakuidun käyttäytymistä karstausprosessissa on tutkittu matemaattisen mallinnuksen avulla. Mallissa pyritään kuvaamaan kuitujen satunnaista vuorovaikutusta toistensa kanssa.

19. Piezosähköiset komponentit

Piezosähköiset materiaalit ovat aineita, joissa ilmenee sähkökentän ja mekaanisten muodonmuutosten yhteys. Tällainen materiaali esimerkiksi taipuu

sähkökentässä ja kääntäen materiaalin taivuttaminen synnyttää sähköisen ilmiön. Hienoelektronikassa valmistetaan komponentteja, joissa piezosähköisen alustan pintaan liitetään sähköisiä komponentteja. Näin syntyy rakenne, jossa sähkövirran avulla syntyy muodonmuutos. Tämä voi olla vaikkapa kytkimen asennon muutos tai akustisen äänilähteen kalvon värähdys. Toiseen suuntaan komponentti voi toimia liiketunnistimena, jossa mekaaninen liike tuottaa sähköisen heijasteen.

Esimerkki piezosähköisestä komponentista on liuska, johon on tuotettu säännöllinen periodinen rivi elektrodeja. Tällaisella laitteella on suodinominaisuus, se mahdollistaa tiettyjä värähtelytaajuuksia ja vaimentaa toisia. Komponentin piezosähköistä toimintaa voidaan tutkia komponenttimallin avulla.

20. Biotekniikka ja ympäristönsuojelu

Maaperään joutuneet ei-toivotut kemikaalit ovat suuri huolenaihe. Ne voivat olla epäpuhtauksia, myrkkyyä tai öljyä. Joissakin tapauksissa tällaisen maaperän puhdistaminen voidaan antaa mikrobien tehtäväksi. Tällainen biointerventio edellyttää, että osataan kuvata maaperässä olevan mikrobiopopulaation toimintaa, sen etenemistä, kasvua, ravintotaloutta ja sen kykyä muokata aineenvaihdunnassaan kohteena olevaa haittamateriaalia. Tätä mikrobikasvuston jakaumaa, liikettä ja kasvua voidaan kuvata mallin avulla. Vaikeusastetta kasvattavat itse bioprosessin ja populaatiomallin lisäksi maaperän rakenteesta, huokoisuudesta, yms. mekaanisista ominaisuuksista johtuvat kysymykset.

Pohjavesien saastuminen torjunta-aineiden ja lannoitteiden vaikutuksesta on iso kysymys. Saasteiden leviämistä selittävät mallit ovat ympäristönsuojelun kannalta tärkeä apuväline. Alueella olevien kaivojen ja niistä pumpattavan vesimäärän vaikutus pohjavesitilanteeseen ja saasteiden leviämiseen voi olla tärkeää suojelun ja kenties palautumisen kannalta. Pohjavesipinnan mallintaminen ja sen määrittäminen kaivojen vesihavaintojen perusteella on jo sinänsä kiintoisa tehtävä.

21. Joen tulvamalli

Veden virtaus jokiverkostossa on mallinnustehtävä, jota on ratkottu ja tutkittu eri tavoilla. Jokisysteemi voi koostua pääjoesta ja haaroista, siinä voi olla välialtaita ja kapeikkoja. Jokuoman muoto ja pinnan laatu saattavat vaihdella ja vaikuttaa virtausominaisuuksiin. Mutkikkaan systeemin kuvaus pakottaa tekemään yksinkertaistuksia, jolloin joki korvataan sopivalla moniosaisella systeemimallilla.

Jokimallien käyttötarve liittyy erityisesti tulvakontrolliin: halutaan ennustaa miten jokiuoma täyttyy rankkasateen, lumien sulamisen tai pitkityvän sadekauden aikana. Myös ympäristönäkökohdat, lietteiden ja saasteiden leviäminen voivat olla jokimallin avulla hallittavissa. Voimalaitoksen suunnittelussa malli on tärkeä väline.

22. Kaupungin vesijärjestelmät

Kaupungin vesi- ja viemäriverkostot sisältävät monia näkökohtia, joissa matemaattisen mallin rakentaminen tulee kyseeseen. Tällöin on kyse nesteen virtaamisesta monimutkaisessa putkistossa. Virtaus yksittäisessä putken osassa tunnetaan hyvin, mutta kuinka tulisi kuvata satojen eri kokoisten putkien osien, liitosten ja välikaivojen kokonaisuutta?

Viemäriverkoston mallin avulla voidaan tutkia kaupungin sadevesikaivojen kykyä selviytyä rankkasateen aiheuttamasta tulvasta – seikka, joka voi olla ihmisten turvallisuuden kannalta tärkeä tekijä bakteeri-infektioiden vaaran vuoksi.

Vesijohtojärjestelmän hallintaan liittyy samanlaisia näkökohtia. Kaupungin vedenkulutus on valtava järjestelmä, jossa kulutustaso muuttuu vuorokaudenajan ja vuodenajan mukaan. Käyttäjien kannalta järjestelmässä oleva paine tulisi säätää tarkasti. Päävesijohdon pumppuasemien ohjaus on tärkeätä ja mallin avulla on hallittava verkostossa paineen vaihtelut ja virtausmäärät sekä tuotettava ohjeet pumppujen käyttämiseksi. Jos kaupungin vedenotto tapahtuu useiden kaivojen kautta, tehtävään tulee mukaan lisäksi kysymys vedenottamojen pumppujen käynnin ohjaamisesta halutun painetason ylläpitämiseksi.

Joskus vesilaitoksen putkistoon joutuu haitallinen sinne kuulumaton ainepäästö. Tässä tilanteessa tulisi voida ennustaa, miten saaste leviää verkostossa ja millä tavalla virtausta venttiilien avulla ohjaamalla putkiverkosto voitaisiin tehokkaimmin puhdistaa.

23. Bussin takapyörät

Joskus matemaattisen mallin tarve syntyy alkeisgeometrian ja peruslaskennan kysymyksistä. Millä tavalla kuvata bussin takapyörien kulkema reitti, kun etupyöriä käännetään? Tällaista mallia kaivataan, kun liikenne- ja katusuunnittelussa mitoitetaan ahdasta ajoväylää. Mallia tarvitaan myös ajoneuvon suunnittelussa, rungon mitoitusta ja pyörien sijoittelua suunniteltaessa. Mallia saatetaan pian tarvita itse ajoneuvon ajotietokoneen osaksi varoittamaan kuljettajaa väärästä ajotavasta kadunkulmissa.

24. Lasin puristus

Lasin valmistukseen liittyy paljon matemaattisia näkökohtia. Matemaattisilla malleilla voidaan kuvata sulan lasimassan käyttäytymistä, jäähtymistä ja jähmettymistä. Yksi esimerkki on puristelasista valmistettujen käyttöesineiden, esimerkiksi pullojen ja säilykepurkkien tuotanto. Tässä sula lasimassa puristetaan muottiin ja jähmettymisen tuloksena saadaan haluttu esine. Usein massa puristetaan muottia vasten puhaltamalla. Tämän vaiheen hallinta on tärkeätä, jotta varmistetaan seinämän tasainen paksuus, muotin täyttyminen joka kohdasta jne.

Prosessi on mallinnuksen kannalta vaativa useasta syystä. Lasimassan viskositeetti muuttuu lämpötilan mukana, mikä tekee massan virtauksesta epätavallisen ilmiön. Lasi on läpinäkyvää, jolloin lämpö siirtyy myös säteilylämpönä, eikä tätä voida mallissa unohtaa, kuten usein lämmön siirtoa kuvaavissa tilanteissa.

Lasin jäähtymisen hallinta on tärkeätä myös siihen jäävien jännitysten vuoksi. Joskus jähmettyvän lasin pintaan syntyvä hienorakenne on tärkeä laatuomaisuus, ja silloin lämpötilan kontrolli jäähtymisen aikana voi olla tärkeä hallita.

25. Tuulilasin valmistus

[35]

Lasin valmistuksen erikoistapaus on auton tuulilasin tuotanto. Eräs käytetty menetelmä on *sag bending* -nimellä tunnettu järjestely, jossa lasilevy kuumennetaan pehmeäksi ja sen annetaan deformatiota painovoiman vaikutuksesta vaakasuoran kehikon päälle riippumaton tapaan. Tuloksena on silloin ideaalisen sileä pinta. Lopputuloksen muoto riippuu lasin lämmityksestä; lämpötilajakauma levyssä riiputuksen alkaessa tulisi määrätä. Tämä ns. suora laskutehtävä on jo haastava. Miten muotoutuu riiputuksessa lasilevy, jonka lämpötilajakauma on annettu? Käänteinen tehtävä on vielä mutkikkaampi: jos tuulilasille halutaan tietty lopullinen muoto, miten sen esilämmitys tulisi suorittaa?

26. Uraanin rikastus kaskadisuodatuksella

Reaktoreissa käytetyn uraanin valmistus edellyttää radioaktiivisen isotoopin eristämistä uraanista. Hyötykäyttöön soveltuvan isotoopin pitoisuus on pieni. Erotusmenetelmä on sentrifugi, jossa uraani pystytään erottamaan kahdeksi jakeeksi. Tämä menetelmä ei kuitenkaan toteuta erottelua lähimainkaan tarkasti, ainoastaan tiedetään, että toisessa jakeessa raskaamman isotoopin pitoisuus on kasvanut muutaman prosenttiyksikön.

Tämä tilanne on ratkaisu kaskadisuodatuksella. Siinä jauhettu uraani johdetaan usean peräkkäisen erotteluvaiheen läpi ja kussakin vaiheessa hyötюраanin pitoisuus nousee muutaman prosenttiyksikön verran. Alhaisemman pitoisuuden omaava jako-osa sisältää edelleen tavoiteltua isotooppia. Sitä ei hukata, vaan syötetään kaskadisuotimessa yhden tai kaksi vaihetta taaksepäin. Kaskadisuodatuksen mallin avulla tulisi kuvata tällaisen erottelujärjestelmän toimintaa ja ennustaa pitoisuuden rikastuminen eri tasoilla.

Rauhanomaisempi versio samasta aiheesta voisi olla puuhakkeen lajittelu, jossa halutaan poistaa kuorta sisältävä hake vaaleasta aineksesta. Jos käytävissä on vaikkapa täristämiseen ja ilmapvirtaan perustuva lajittelija joka hyödyntää eri jakeiden pientä tiheyseroa, voitaisiin laatia saman ajatuksen mukainen kaskadinen erottelu selluteollisuuden massan valmistukseen.

27. Puun kuivaus

Puutavaran kuivaaminen on Suomen teollisuuden kannalta miljoonien arvoinen kysymys. Puun kuivumista koskevan matemaattisen mallin tulisi kuvata veden etenemistä väliaineessa, joka on vahvasti anisotrooppinen. Vesi kulkeutuu helpommin puukuitujen suunnassa ja paljon huonommin niiden poikki. Lisäksi itse kuivumistapahtuma saattaa muuttaa veden kulkeutumisen ehtoja ja ongelmaan tulee epälineaarisia piirteitä. Onnistuessaan tällaisen puun kuivumisen mallin tuloksena voisi olla puukuivurin optimaalisen lämpötilan ohjauksen ohjelma. Kuivatustapahtuman oikealla ohjaamisella varmistetaan puutavaran laatu. Tämä on vaikkapa huonekalujen parketin ja muiden rakennusosien valmistuksessa tärkeää.

28. Batch-prosessin tuotantosuunnitelma

Polystyreeni-nimisestä materiaalista valmistetaan useita vaihtoehtoisia tuotevariaatioita *batch*-prosessina. Prosessin vaiheet ovat valmisteluvaihe, polymerointi ja jälkikäsitteily. Kutakin vaihetta varten tuotantojärjestelmässä on rinnakkaisia linjoja (esimerkiksi 2–4 kpl). Valmistettavasta tuotteesta riippuen näiden työvaiheiden kesto ja linjojen kapasiteetti ovat erilaisia. Myös työvaiheen erilainen jako rinnakkaisille linjoille voi tulla kyseeseen. Tässä tilanteessa tulisi suunnitella optimaalinen tuotantosuunnitelma. Tehtävää mutkistaa sen stokastinen luonne. Prosessin toiminta sisältää satunnaisia tekijöitä, kuten kestoajat ja saantosuhteet ja lisäksi asiakastilauksien saapuminen on tilastollinen prosessi. Probleemasta muodostuu *mixed integer* -lineaarisen optimoinnin tehtävä (MILP). Satunnaistekijöistä johtuen se laajenee stokastisen optimoinnin tehtäväksi.

29. Reologia ja slurry

Öljy- ja kivihiiliteollisuudessa syntyy useita ei-tavanomaisten materiaalien kuljetukseen liittyviä haasteita. Tällainen esimerkki on jauhetun hiilipölyn kuljettaminen nesteeseen sekoitettuna. Tämä *slurry*-nimellä kulkeva materiaalin olomuoto on tekniikka, jota käytetään energia- ja petrokemian teollisuudessa. Tämä *slurry* eli vesi-hiili-suspensio on erikoinen materiaali, mikä tuottaa mallinnuksen kannalta pulmia. Aineen reologiset ominaisuudet ovat oikukkaat. Jos aine pumpatessa seisahtuu paikoilleen sopivaksi ajaksi, hiilihiukkaset sedimentoituvat putken pohjalle ja putki jämähtää tukkoon. Myös virtauksessa putken keskelle saattaa muodostua kiinteä tulppa. Näiden ilmiöiden mallinnus on tärkeä, jotta osataan suunnitella suspension siirrossa tarvittavat pumppauksen toimintatavat. Tarvitaan materiaalmalli ja virtausmalli. Aineen ominaisuudet tuottavat malliin kiintoisia epälineaarisia piirteitä. Mallin tulisi tavoittaa seoksen koagulaatio ja sedimentoituminen sekä viskositeetin voimakkaat muutokset.

30. Kuvankäsittely ja sieni-itiöt

Kameran ja digitaalisen kuvankäsittelyn yhdistelmällä voidaan luoda näköjärjestelmä, jossa mekaaninen laite oppii havaitsemaan kuvista yksityiskohtia ihmissilmän korvaten. Tällaisella kuvasta tapahtuvalla tunnistuksella on kasvava määrä soveltamiskohtia.

Työterveyden kannalta huoneilman haitalliset homesieni-itiöt ovat ikävä asia. Ilman laadun seuraamiseksi rakennusten ilmaa suodatetaan ja suotiimeen jääviä hiukkasia tutkitaan mikroskoopilla. Näytteiden tutkiminen suurina määrinä on rasittavaa, laborantin silmä saattaa väsyä ja huolellisuus loppahtaa. Konenäköön perustuva tunnistusjärjestelmä, joka havaitsee mikroskooppikuvasta homesienen itiöt, olisi hyvä apuneuvo. Ilman-suotiimeen kerääntyy suuri määrä vähemmän haitallisia hiukkasia, kuten pölyä ja siitepölyä. Tunnistusjärjestelmän tulisi kyetä erottamaan erilaisten mikrobikuvien joukosta juuri homesienen itiöt. Tässä on matemaattisen hahmontunnistuksen haaste.

Vastaavia tehtäviä ovat bakteerinäytteiden analysointi lääketieteen laboratoriossa otetuista soluviljelyistä, tai syöpäsolujen ja epänormaalin solukon tunnistaminen kudoksenäytteistä. Geenitekniikassa analysoidaan geneettisen materiaalin muodostamia näytetaulukkoja (DNA micro array), joissa saattaa olla kymmeniä tuhansia ruutuja. Kussakin ruudussa on tapahtunut biokemiallinen reaktio testiaineen vaikutuksesta. Tulos on luettavissa esimerkiksi ruudun värikoodauksesta. Tällaisen taulukon tuloksen lukeminen koneaistin avulla on suuri apu, kun aineistoa käsitellään mahdollisesti suurina määriä pitkinä sarjoina.

Hahmontunnistus, koneaistit ja digitaalinen kuvankäsittely ovat vilkkaan tutkimuksen kohde, ja alan teknologia nojaa vahvasti matemaattisiin menetelmiin, stokastiikkaan ja matemaattiseen analyysiin.

31. Pankin likviditeettiriski

Pankit harjoittavat lainoituksen ohella monia tehtäviä, kuten maksuliikenteen hoitoa, arvopapereiden kauppaa ja asiakkaiden arvopaperisalkkujen hallinnointia. Näistä syntyvät rahavirrat, saatavat, velat ja maksuveloitteet muodostavat pääomavirtoja, joiden käyttäytyminen on stokastista. Satunnaisuus ja epäsäännöllisyys ilmenee kovin monilla tavoilla ja aika-kaaloissa.

Pankit haluaisivat ymmärtää pörssissä tapahtuvan kaupankäynnin dynamiikkaa, finanssi-instrumenttien hinnan muodostusta. Erityisesti niin sanottujen johdannaisarvopapereiden, kuten optioiden, hinnoittelu on syvällinen matemaattinen kysymys.

Yksi esimerkki pankkitoiminnan mallintamisen tarpeesta on sen kokonaislikviditeetin hallinta. Pankkitoiminnan riskejä on jaoteltu seuraaviin tyyppeihin: luottoriskit, toiminnalliset riski, markkinariskit, likviditeettiriski. Lukemattomien stokastisten prosessien eli rahapurojen keskellä tulee varmistaa, että turvallinen maksuvara säilyy, pankin käytössä olevat päivittäin liikuteltavat rahat eivät saa huveta. Likviditeettiriski kytkeytyy muihin riskin muotoihin ja sen mallinnuksessa tulee väistämättä esiin useiden riskiennusteiden ja skenaariomallien yhdistely.

[38]

32. Bioreaktorin oskillaatiot

Hiiwasienten sukuun kuuluva mikro-organismi kykenee aineenvaihdunnassaan käyttämään ravinteenaan erilaisia bioperäisiä materiaaleja ja tuottamaan etanolia. Bioprosessin avulla voidaan näin maatalouden, elintarviketeollisuuden ja yhdyskuntien biojätteistä tuottaa etanolia. Tuotantoa varten on rakennettu tehdasmittakaavan kokoisia reaktoreita.

Hiiwasienen elinkaari ja aineenvaihdunnan biokemiallinen prosessi sisältää yllättäviä piirteitä. Joskus mikrobien populaation aktiivisuus näyttää sammuvan. Sen jälkeen alkaa aktiivisen tuotannon aika, lämmön nousu jne. Nämä vaiheet vuorottelevat ja syntyy oskillaatio, joka voi joskus ryöstäytyä laajaksi. Bioreaktori on vaarassa poksahduttaa vakavin seurauksin. Tämän vuoksi tehdas haluaa ymmärtää etanoliprosessin dynamiikkaa ja oskillaatioiden syntyä. Halutaan selvittää, voidaanko sopivilla puuttumistoimilla, lisäaineilla tai muilla säädöillä vaimentaa vaihteluita.

Mallin rakentamiseen tarvitaan hiivasienten etanolituotannon biokeemiallisen prosessin tuntemista. Itse populaation kasvu, eliöiden lisääntyminen ja aktiivisuuden muutokset ovat osa mallinnettavaa ongelmaa.

33. *Silmälasin linssin hionta*

Silmälasien linssit valmistetaan leikkaamalla sopivan työstömenetelmän avulla lasiaihioista oikea muoto. Lopuksi pinta hiotaan ja viimeistellään tarkan sileäksi. Linssin pinnan muoto määritellään funktiona ja tämä funktiolauseke ohjaa työstävän leikkurin tai hiomalaitteen terän liikettä.

Tässä mallinnustehtävässä haasteena on määrätä linssin muotoa kuvaava funktio, usein paloittain määriteltynä lausekkeena. Kontrolloitavana suurena on kaksiulotteisen pinnan kaarevuus linssin eri kohdissa. Usein linssin keskellä on ympyrän muotoinen keskivyöhyke ja sen ympärillä laajennussektorit ulottuen laitaa ja aikanaan silmälasien kehykseen. Kaarevuuden tasaisuus tuottaa erityisen laskentahaasteen vyöhykkeiden saumakohdissa. Tehtävästä syntyy myös luontevasti variaatiolaskentaan johtava optimointitehtävä.

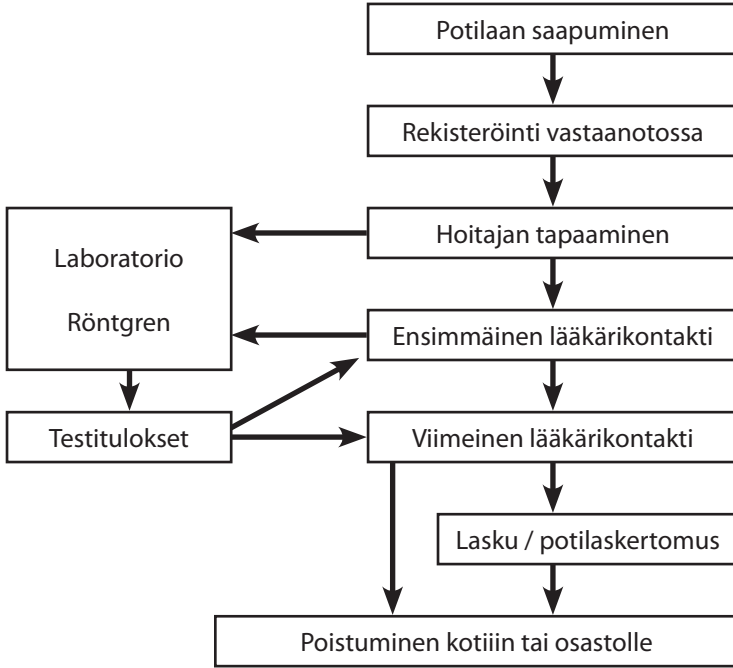
3

Näkökulmia systeemeihin ja malleihin

ERKKI LAITINEN

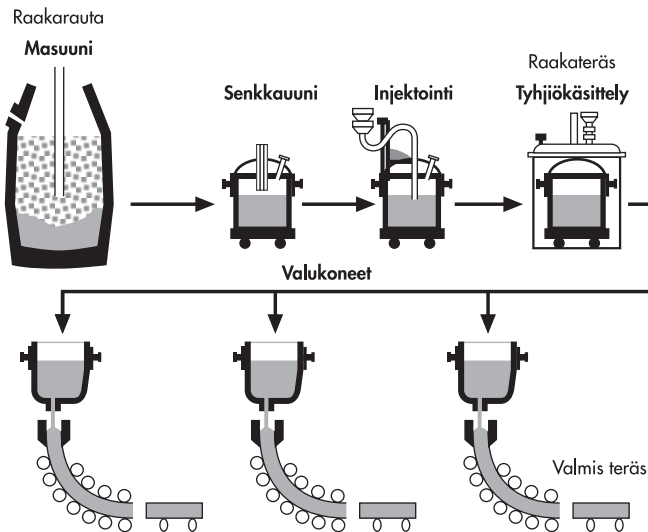
[40]

Tässä kappaleessa valotetaan esimerkkien avulla erilaisia näkökulmia systeemien mallintamiseen. Aluksi lienee tarkoituksenmukaista kuvata mitä tarkoitetaan itse systeemillä tai sen matemaattisella mallilla. Systeemillä tarkoitetaan joukkoa toisiinsa vaikuttavia komponentteja (olioita, alkioita) ja niihin liitettyjä ominaisuuksia (numeerisia arvoja). Systeemit ovat yleensä *dynaamisia*, ts. *systeemin tila* muuttuu ajan suhteen. Systeemin tilalla tarkoitetaan sen komponenttien arvoja, ja yleensä systeemissä kiinnostaa sen *tasapainotila*, eli tila, jossa komponenttien arvot säilyvät ajan suhteen muuttumattomina. Esimerkiksi sairaalaa voidaan ajatella systeeminä, jossa potilaat, lääkärit ja hoitajat ovat sen komponentteja. Potilaiden ominaisuutena voi olla esimerkiksi saapumissy ja hoitohenkilökunnan ominaisuutena voisi olla esimerkiksi osaamisala. Lisäksi sairaalassa on erilaisia laitteistoja (resursseja), kuten röntgen, laboratorio, vuodepaikat jne., joiden kapasiteetti saattaa aiheuttaa pullonkauloja potilasvirralle. Systeemi on tyypillinen ns. *diskreetti systeemi*, jossa esimerkiksi potilaan saapuminen sairaalaan tai poistuminen sieltä muuttaa äkillisesti systeemin tilaa. Tyypillisesti tämän kaltaiset systeemit ovat myös ns. *stokastisia systeemejä*, koska potilaan saapumiset ja viipymisaika sairaalassa ovat satunnaismuuttujia. Yleensä tämän tyyppisessä systeemissä halutaan seurata potilaiden läpimenoaikoja ja resurssien riittävyyttä. Kuvassa 3.1 on esitetty prosessivuokaavio sairaalan poliklinikan toiminnasta [4].



[41]

Kuva 3.1. Sairaalan poliklinikan toiminnan prosessikaavio.



Kuva 3.2. Teräksen valmistusprosessi.

Tarkastellaan seuraavaksi hieman erilaista diskreettiä systeemiä, terästehtaan toimintaa. Tehdas tuottaa eri teräslaaduista (eri seoskomponentit) teräsaihoita asiakkailleen. Kuvassa 3.2 on esitetty systeemin eri vaiheita.

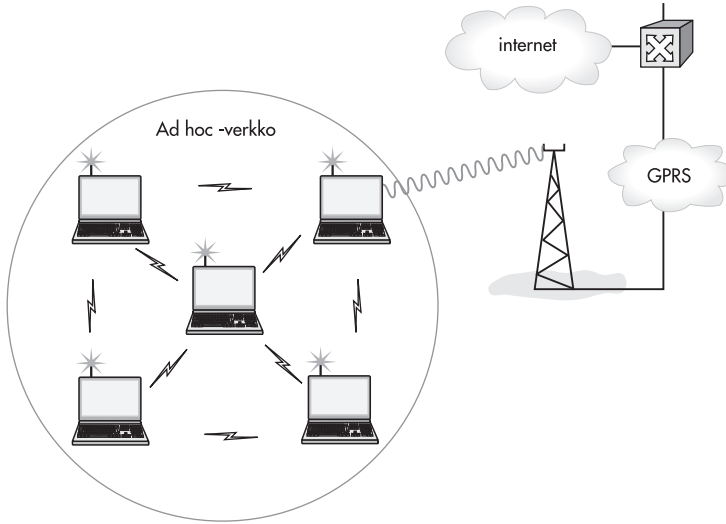
Raakateräs valmistetaan masuuniprosessissa, minkä jälkeen se seostetaan senkkauunissa oikeaan koostumukseen. Valmis sula teräs viedään senkassa (n. 120 000 kg terästä) valukoneelle, jossa se jähmetytetään kiinteiksi teräsaihoiksi, jotka kuljetetaan varastoon asiakkaalle lähettämistä varten. Tässäkin tapauksessa systeemiä voidaan pitää diskreettinä, stokastisena systeeminä, jossa teräsaihiot ovat systeemin olioita ja prosessin eri vaiheet ovat resursseja. Asia ei ole kuitenkaan yhtä selväpiirteinen kuin sairaalaesimerkissä. Nyt systeemi sisältää useita alisysteemejä, jotka ovat selvästikin luonteeltaan *jatkuvia systeemejä*. Tällaisia ovat esimerkiksi raudan sulatus masuunissa, seostaminen ja sulkeumien poisto senkkauunissa tai teräksen jähmettäminen valukoneella [3]. Siitä, millaisia asioita systeemistä halutaan tutkia, riippuukin suuresti minkälainen näkökulma systeemiin kannattaa ottaa. Seuraavassa luvussa käsitellään erästä tietoliikenteen kannalta merkityksellistä systeemiä.

3.1 Tiedonsiirron optimointi hybridiverkoissa

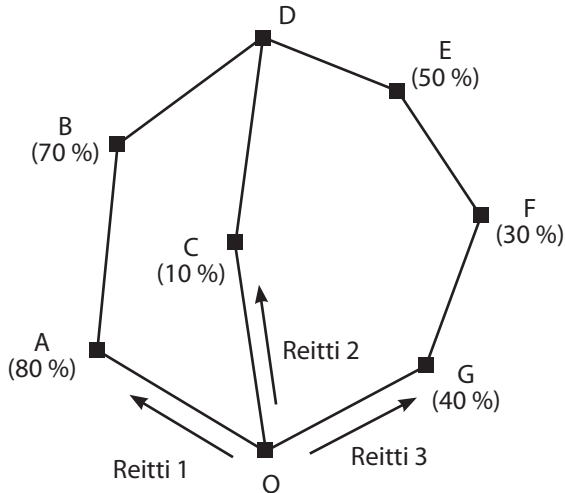
[42]

Kuvassa 3.3 on esitettyä tyypillinen hybridiverkko, joka koostuu liikkuvien päätelaitteiden (tietokone, puhelin) muodostamasta verkosta ja kiinteästä verkosta (soluverkko, lankaverkko). Verkon solmut koostuvat muun muassa päätelaitteista, tukiasemista ja reitittimistä, ja jos jokin solmu haluaa kommunikoida toisen solmun kanssa, niiden välille täytyy muodostaa tietoliikenneyhteys. Polun tai useampien polkujen löytäminen lähtösolmusta (origin) määränpäähän (destination) on eräs keskeinen kysymys suunniteltaessa tietoliikenneprotokollia. Lisäksi datasiirron jakaminen useammille poluille saattaa olla verkon toiminnan kannalta oleellisen tärkeää. Data-liikennettä oikein jakamalla voidaan muun muassa estää verkon ruuhkautumista ja lisätä verkon elinikää (ts. aikaa, jonka verkko pysyy toimintakykyisenä esimerkiksi ennen päätelaitteiden akkujen virran loppumista). Ajatellaanpa vaikka kuvan 3.4 mukaista reitittämistä. Verkko koostuu 8 solmusta (A,B,C,D,E,F,G,O). Solmu O (origin) tarvitsee yhteyden solmuun D (destination). Kuten kuvasta ilmenee, tämän yhteyden muodostamiseen on olemassa kolme eri reittivaihtoehtoa (reitti 1, reitti 2 ja reitti 3). Kuvassa on lisäksi esitetty, kuinka paljon akun kapasiteettiä on kussakin solmussa jäljellä (esimerkiksi solmulla A, akkua on jäljellä 80%).

Käytettävä reitti/reitit voidaan valita usealla eri tavalla. Käydään seuraavassa läpi neljä eri tapaa. Yleensä käytettävä reitti haetaan siten, että sen mitta eli hyppyjen määrä on pienin, ja ohjataan koko liikenne tälle reitille (Dijkstra tai Bellman-Ford). Useita muitakin mittoja voidaan kuitenkin



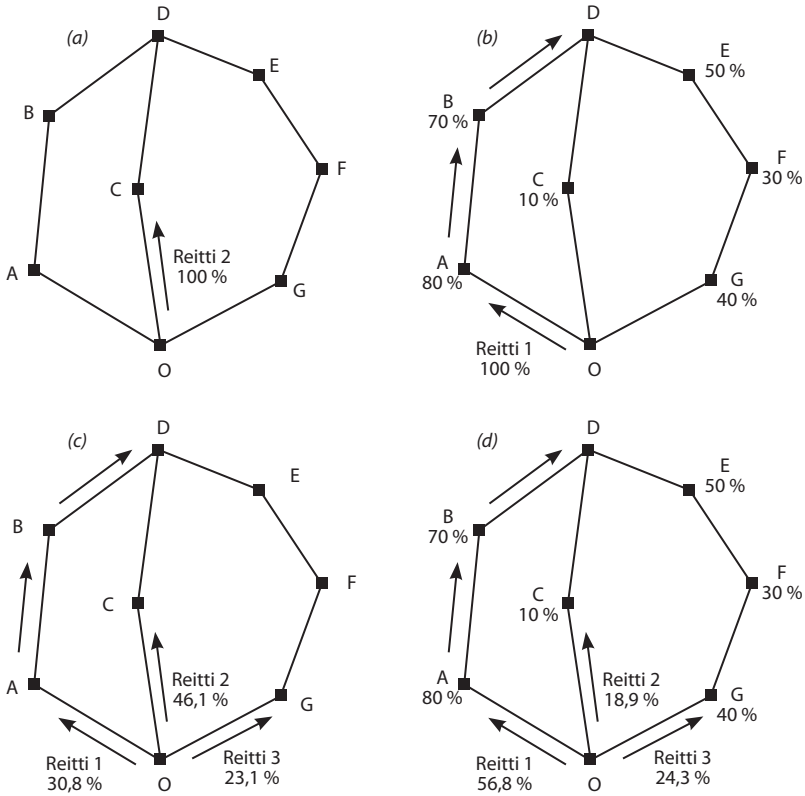
Kuva 3.3. Hybridiverkko.



Kuva 3.4. Verkko.

käyttää, kohdissa 2 ja 4 reitit valitaan ottamalla huomioon reitin välitykseen osallistuvien solmujen akkujen kapasiteetit.

Kuvassa 3.5(a) valitaan lyhin reitti ja liikenne ohjataan kokonaan tälle reitille. Tässä tapauksessa 100 prosenttia liikenteestä ohjataan reitille 2. Kuvassa 3.5(b) reitti valitaan akkujen kuluneisuuden perusteella. Valitaan reiteistä se, jonka eniten kuluneen akun kapasiteetti on suurin. Tällöin liikenne ohjautuisi 100-prosenttisesti reitille 1.



[44]

Kuva 3.5. Reititysvaihtoehdot.

Yhden reitin varassa oleminen ei ole kuitenkaan aina järkevää, koska esimerkiksi akun kapasiteetin loppuminen tai laitevika aiheuttavat tiedonsiirron katkeamisen ja reitinsentä joudutaan käynnistämään uudelleen. Myöskään tiedonsiirron kustannukset eivät välttämättä ole halvimmat käytettäessä yhtä reittiä. Toinen tapa on määritellä reiteille hintafunktiot ja jakaa liikenne optimaalisesti useammalle reitille. Tällöin puhutaan verkon liikenteen tasapainottamisesta [2,1]. Eräs tapa verkon liikenteen tasapainottamiseksi on määrittämällä kullekin reitille r_i kustannus C_i ja jakaa liikenne halvimmille reiteille. Asetetaan kullekin linkille a_i linkkikustannus $c_i = f_i$, jossa f_i on linkin liikennemäärä. Määritellään reitin r_i kustannus C_i reitin muodostavien linkkien linkkikustannusten summana. Tarkasteltavassa esimerkkiverkossa reittien kustannukset saadaan muotoon

$$C_1 = 3 \cdot x_1, \quad C_2 = 2 \cdot x_2, \quad C_3 = 4 \cdot x_3, \quad (3.1)$$

missä x_i on reitin r_i liikennemäärä. Tässä tasapaino saavutetaan, kun liikenne ohjataan kuvan 3.5(c) mukaisesti. Tällöin jokaisen reitin kustannus on sama. Liikenteestä ohjataan 30,8 % reitille 1, 46,1 % reitille 2 ja 23,1 % reitille 3.

Määritellään nyt reittien kustannukset asettamalla

$$C_i = (100 - p_i) \cdot x_i, \quad (3.2)$$

missä p_i on reitin r_i solmujen pienin akkukapasiteetti. Tasapaino saavutetaan kuvan 3.5(d) mukaisella reitityksellä, jossa liikenteestä ohjataan 56,8 % reitille 1, 18,9 % reitille 2 ja 24,3 % reitille 3.

3.2 Tiedonsiirron tasapainottamisen matemaattisesta mallintamisesta

Olkoon pari $\mathcal{G} = (V, D)$ verkko, jossa V on solmujen joukko ja D on suunnattujen linkkien d joukko,

$$d \in D, \quad d = (i \rightarrow j). \quad (3.3)$$

[45]

Määritellään

$$w \in W, \quad w = (i \rightarrow j), \quad (3.4)$$

- W on o/d (origin-destination) -parien w joukko
- b_w on o/d-parin w liikenne (pakettia/s),
- P_w on o/d-parin w polkujen joukko,
- x_p on polun $p \in P_w$ virtaus.

Merkitään X :llä sallittujen polkuvirtausten vektoria

$$X = \left\{ x \mid \sum_{p \in P_w} x_p = b_w, \quad x_p \geq 0, \quad p \in P_w; \quad w \in W \right\}. \quad (3.5)$$

Matriisimuodossa

$$\mathbf{b} = \mathbf{B}\mathbf{x} \quad (\text{säilymlaki}), \quad \mathbf{x} \geq \mathbf{0}. \quad (3.6)$$

Yhtälö määrittelee, että o/d-virtaus polkuja pitkin pitää olla b_w , ks. kuva 3.6. Lisäksi on luonnollista vaatia, että $x_p \geq 0$.

Jokainen sallittu polkuvirtaus $x \in X$ määrittelee sallitun linkkivirtauksen f_d . Linkkivirtaus on summa linkkiä käyttävistä polkuvirtauksista, ks. kuva 3.6,

$$f_d = \sum_{w \in W} \sum_{p \in P_w} \alpha_{pd} x_p, \text{ missä } \alpha_{pd} = \begin{cases} 1, & \text{jos polku } p \text{ sisältää linkin } d, \\ 0, & \text{muulloin.} \end{cases} \quad (3.7)$$

Matriisimuodossa

$$\mathbf{f} = \Psi \mathbf{x}, \quad \text{missä } \Psi = \begin{bmatrix} \alpha_{1,1}, \dots, \alpha_{1,m} \\ \dots, \alpha_{i,j}, \dots \\ \alpha_{l,1}, \dots, \alpha_{l,m} \end{bmatrix}. \quad (3.8)$$

Asetetaan jokaiselle linkille d kustannus $t_d = T_d(f)$, missä f on linkin virtaus. Kustannus voisi olla esimerkiksi siirtoaika, kapasiteetti tai akun kesto.

Polun p polkuvirtauksen $x \in X$ kustannukseksi $g_p(x)$ saadaan

$$[46] \quad g_p(x) = \sum_{d \in D} t_d \alpha_{pd}. \quad (3.9)$$

Matriisimuodossa

$$\mathbf{G} = \Psi^T \mathbf{T}(\mathbf{f}). \quad (3.10)$$

MÄÄRITELMÄ 3.1

[Wardropin tasapainotila.] Sallittua polkuvirtausta x^* sanotaan Wardropin tasapainoksi, jos minkä tahansa o/d-parin w käytössä olevien polkujen kustannukset ovat yhtä suuret eikä löydy käyttämätöntä polkua, jonka kustannus olisi pienempi. On siis toisin sanoen olemassa tasapainokustannus \mathbf{u}^* (vektori) siten, että kaikille polkukustannuksille

$$g_p(x) \geq u^*, \quad \forall p \in P_w; \forall w \in W \quad (3.11)$$



Kuva 3.6. Polkuvirtaus vasemmalla ja linkkivirtaus oikealla.

ja

$$x_p(g_p - u^*) = 0, \quad \forall p \in P_w; \quad \forall w \in W \quad (3.12)$$

Matriisimuodossa

$$\mathbf{G} \geq \mathbf{B}^T \mathbf{u}^*, \quad \mathbf{x} \cdot (\mathbf{G} - \mathbf{B}^T \mathbf{u}^*) = \mathbf{0}, \quad (3.13)$$

missä \mathbf{G} ja \mathbf{x} on määritelty yhtälöillä (3.8) ja (3.10).

MÄÄRITELMÄ 3.2

[Käyttäjän tasapainotila.] Polkuvirtausta x^* sanotaan käyttäjän tasapainoksi, jos mille tahansa o/d-parille w ja mille tahansa sen polulle $p_1 \in P_w$ $x_{p_1} > 0$

$$g_{p_1}^* \leq \liminf_{\varepsilon \rightarrow 0^+} g_{p_2}(x^* + \varepsilon), \quad \forall p_2 \in P_w. \quad (3.14)$$

Käyttäjä ei siis voi pienentää kustannustaan siirtymällä toiselle reitille.

ESIMERKKI 3.1

Verkko koostuu yhdestä o/d-parista, jota yhdistää kaksi polkua (ks. kuva 3.7(a)), joiden kustannukset ovat

$$g_1(x) = x \quad (3.15)$$

$$g_2(x) = \begin{cases} \frac{5}{4}x, & \text{jos } x < \frac{1}{2}, \\ \frac{1}{2}, & \text{jos } x = \frac{1}{2}, \\ \frac{5}{4}x - \frac{1}{4}, & \text{jos } x > \frac{1}{2}. \end{cases} \quad (3.16)$$

Piste (x_1, x_2) on Wardropin tasapaino, sillä $g_1(x_1) = g_2(x_2) = \frac{1}{2}$. Piste ei ole kuitenkaan käyttäjän tasapaino, sillä $\liminf_{\varepsilon \rightarrow 0^+} g_2(x_2 + \varepsilon) = \frac{3}{8} < \frac{1}{2} = g_1(x_1)$, katso kuva 3.7(b).

ESIMERKKI 3.2

Verkko koostuu yhdestä o/d-parista, jota yhdistää kaksi polkua, joiden kustannukset ovat

$$g_1(x) = x \quad (3.17)$$

$$g_2(x) = \begin{cases} \frac{1}{2}x, & \text{jos } x \leq \frac{1}{2}, \\ \frac{1}{2}x + \frac{1}{2}, & \text{jos } x > \frac{1}{2}. \end{cases} \quad (3.18)$$

Piste $(x_1, x_2) = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ ei ole Wardropin tasapaino, sillä $g_1(x_1) = \frac{1}{2} \neq g_2(x_2) = \frac{3}{4}$. Piste on kuitenkin käyttäjän tasapaino, sillä polun 1 käyttäjä ei voi alentaa kustannuksiaan siirtymällä polulle 2. Katso kuva 3.7(c).

ESIMERKKI 3.3

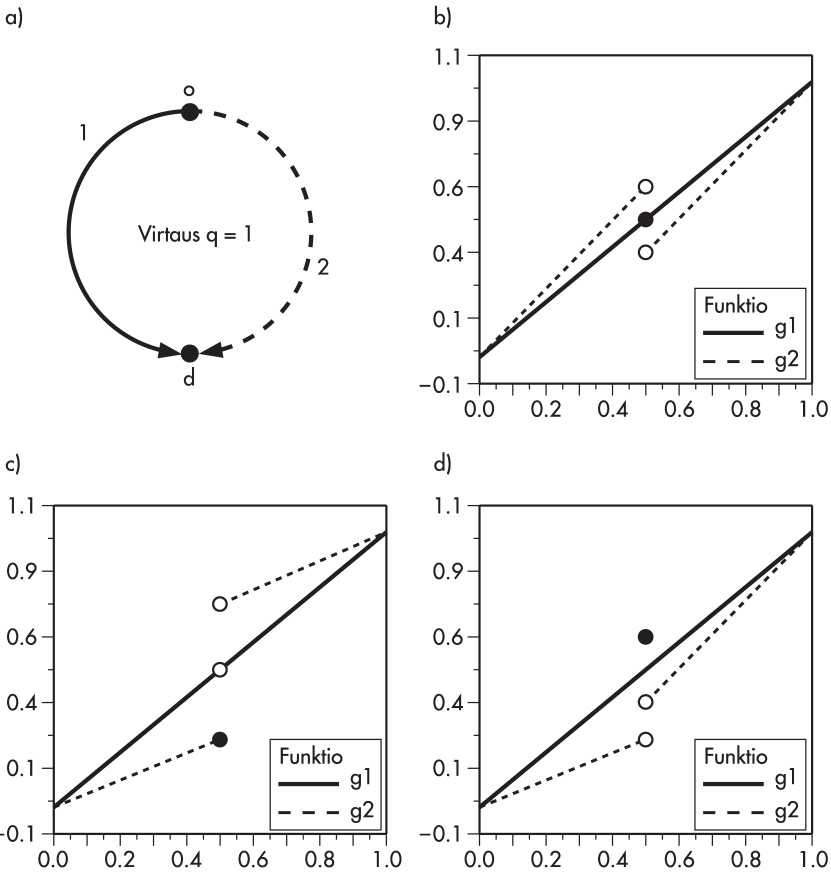
Verkko koostuu yhdestä o/d-parista, jota yhdistää kaksi polkua joiden kustannukset ovat

$$g_1(x) = x \quad (3.19)$$

$$g_2(x) = \begin{cases} \frac{1}{2}x, & \text{jos } x < \frac{1}{2} \\ \frac{5}{8}, & \text{jos } x = \frac{1}{2} \\ \frac{5}{4}x - \frac{1}{4}, & \text{jos } x > \frac{1}{2} \end{cases} \quad (3.20)$$

Piste $(x_1, x_2) = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ ei ole Wardropin tasapaino eikä käyttäjän tasapaino, ks. kuva 3.7(d).

[48]



Kuva 3.7. Esimerkit 3.1–3.3.

3.3 Tasapainotilan olemassaolosta

Tarkastellaan kappaleen lopuksi hieman millä ehdoilla tasapaino on olemassa. Tehdään sen vuoksi seuraavia oletuksia linkkikustannusoperaattorista. Oletetaan, että

1. linkkikustannus $T(f)$, $f \geq 0$, on yksiarvoinen ja monotoninen:

$$(T(x) - T(y), x - y) \geq 0, \quad \forall x, y \in \mathcal{F}, \quad (3.21)$$

missä \mathcal{F} on linkkikustannusoperaattorin T avoin määrittelyjoukko,

2. operaattori $T(f)$ on täydellinen:

$$\forall y \in \mathcal{F} : (T(x), x - y) \rightarrow +\infty, \quad \text{kun } x \rightarrow \partial\mathcal{F}. \quad (3.22)$$

Oletuksista seuraa, että polkukustannusoperaattori $G(x)$ on myös monotoninen ja täydellinen, sillä yhtälöistä (3.10) ja (3.8) seuraa

$$G(x) = \Psi^T T(\Psi x), \quad \text{dom } G = \{x : \Psi x \in \mathcal{F}\}. \quad (3.23)$$

[49]

LAUSE 3.1

Jos linkkikustannusoperaattori $T(f)$ toteuttaa edellä mainitun oletuksen, niin:

- (i) *Verkon $\mathcal{G} = (V, D)$ Wardropin tasapaino on variaatioepäyhtälön*

$$(G(x), x - x^*) \geq 0, \quad \forall x \in X \quad (3.24)$$

ratkaisu.

- (ii) *Jos linkkikustannus $T(f)$ on jatkuva, niin Wardropin tasapainotila on olemassa.*

- (iii) *Jos linkkikustannus on aidosti monotoninen ja Wardropin tasapaino on olemassa, niin tasapainotila on yksikäsitteinen.*

Todistus. Olkoon $x^* \in X$ Wardropin tasapainovirtaus verkossa \mathcal{G} . Silloin jokaiselle sallitulle x ja $G = G(x)$ pätee seuraava lauseke:

$$(G, x) \underbrace{\geq}_{\text{yht. (3.0.13)}} (B^T u^*, x) \underbrace{=}_{\text{sisätulo}} (u^*, Bx^*) \underbrace{=}_{\text{yht. (3.0.6)}} (u^*, Bx^*) \quad (3.25)$$

$$\underbrace{=}_{\text{sisätulo}} (B^T u^*, x^*) \underbrace{=}_{\text{yht. (3.0.13)}} (G, x^*). \quad (3.26)$$

Vastaavasti, olkoon $(x^*, G(x^*))$ variaatioyhtälön (3.24) vahva ratkaisu. Tällöin voidaan osoittaa, että x^* on seuraavan optimointitehtävän ratkaisu.

Etsi hyväksyttävä polkuvirtaus $x^* \in X$, $x^* > 0$ siten, että se toteuttaa ehdon

$$\forall q \in P_w, x_q^* > 0 \implies G_q(x^*) = \min_{p \in P_w} G_p(x^*), \quad \forall w \in W. \quad (3.27)$$

Kirjallisuutta

- [1] A. S. Belenky. *Operations research in transportation systems*, volume 20 of *Applied Optimization*. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1998.
- [2] I. V. Konnov. *Equilibrium models and variational inequalities*, volume 210 of *Mathematics in Science and Engineering*. Elsevier, Amsterdam, 2007.
- [3] J. Rekola. Metallurgian mahdollisuudet 1999–2003. Teknologiaohjelmaraaportti 3/2004, Tekes, 2004. http://www.tekes.fi/julkaisut/Metallurgian_mahdollisuudet.pdf.
- [4] T. Ruohonen. *Improving the operation of an emergency department by using a simulation model*. PhD thesis, University of Jyväskylä, Jyväskylä, 2007.

4

Kokonaislukumallit

RISTO SILVENNOINEN

4.1 Johdanto

[52]

Tässä luvussa käsitellään matemaattisia malleja, joiden muuttujista ainakin osa on *kokonaislukuja*. Jos kokonaismuuttujien lukumäärä on pieni, ei niiden käsittelyssä yleensä tarvita erityismenettelyjä (kaikkien vaihtoehtojen täydellinen läpikäynti on silloin yleensä mahdollista). Jos sen sijaan kokonaislukumuuttujia on paljon, tarvitaan mallien käsittelyyn omat keinonsa. Mikä milloinkin on ”paljon”, riippuu tilanteesta, mutta esimerkiksi binäärimuuttujien x_i , $i = 1, \dots, n$ tapauksessa arvovaihtoehtoja on 2^n . Luku kasvaa hyvin nopeasti muuttujan n mukana (mainittakoon vertailukohtana, että kosmologien arvioiden mukaan maailmankaikkeudessa alkeishiukkasten lukumäärä on suuruusluokkaa 2^{266}).

Termi *kombinatorinen* viittaa siihen, että usein tämän tyyppisten mallien peruskysymyksenä on selvittää, miten toimenpiteet on järjestettävä, jotta asiat saadaan hoidetuksi halutulla tavalla, esimerkiksi jakelukuljetukset tuottajilta kuluttajille. Hyvin usein on myös niin, että erityisesti binäärimuuttujilla kuvataan mallissa olevia loogisia ehtoja. Kombinatoristen mallien ohella käytetään nimityksiä *äärelliset mallit* tai *kokonaislukumallit*. Jos mallissa on pelkästään kokonaislukumuuttujia, mallia sanotaan joskus *puhtaaksi*, muuten *sekalukumalliksi*. Korostettakoon lopuksi, että ”äärellisyys” tässä ei sulje niinkään pois rajattoman suuria lukuja, vaan kiellettyä aluetta muuttujille on ”äärettömyys pienessä”, eli muuttujille sallitaan vain kokonaislukuarvot. Jos jokin muuttuja saa saada kaikkia reaalityyppisiä (tieteilijä avoimilta väleiltä), kyseessä on *jatkuva muuttuja*. Muuttujat jakautuvat siis

kombinatoristen mallien näkökulmasta jatkuviin ja diskreetteihin, joista jälkimmäiset kuvataan kokonaisluvulla. (Katso kirjan lukua 7.1.1, jossa selostetaan jatkuvien ja diskreettien suureiden eroa.)

Kombinatoristen mallien käyttöön liittyy hyvin usein *optimointinäkökulma*. Ongelma kuuluu silloin *kokonaislukuoptimoinnin* tai *kombinatorisen optimoinnin* piiriin. Usein optimoitavissa malleissa on mukana molempia muuttujalajeja, jolloin tehtävät ovat *sekalukuoptimoinnin* ongelmia. Nämä jakautuvat lineaarisuus/epälineaarisuus-akselilla *lineaariseen sekalukuoptimointiin* (Mixed Integer Linear Programming, MILP) ja *epälineaariseen sekalukuoptimointiin* (MINLP). Pelkästään kokonaislukuja sisältävä lineaarinen optimointi esiintyy myös nimellä *Integer Programming (IP)*, ja jos nämä kokonaisluvut ovat erityisesti kaikki binäärilukuja, kyseessä on *binäärioptimointi* eli *Binary Integer Programming (BIP)*. Tarkassa puhe-tavassa voidaan erottaa toisistaan *probleema* ja sen konkreettisilla numeroarvoilla esitetty *tapaus (instanssi)*.

Yleisin optimointiongelma tässä esityksessä on siis MINLP, jonka muoto on seuraava:

$$\begin{aligned} \min f(\mathbf{x}, \mathbf{y}), \\ h_i(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = 0, \quad i = 1, \dots, r, \\ g_j(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \leq 0, \quad j = 1, \dots, s, \\ \mathbf{x} \in \mathbb{Z}^n, \quad \mathbf{y} \in \mathbb{R}^q. \end{aligned}$$

[53]

Funktio f on tässä (skalaariarvoinen) *kohdefunktio*, funktiot h_i ja g_j ovat *rajoitefunktioita* ja *muuttujavektori* $\begin{bmatrix} \mathbf{x} \\ \mathbf{y} \end{bmatrix}$ kuuluu *muuttuja-avaruuteen* $\mathbb{Z}^n \times \mathbb{R}^q$ (myös tilanteesta riippuen *päätösavaruus* tai *suunnitteluavaruus*). Joukko

$$S = \left\{ \begin{bmatrix} \mathbf{x} \\ \mathbf{y} \end{bmatrix} \in \mathbb{Z}^n \times \mathbb{R}^q \mid h_i(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = 0, \quad i = 1, \dots, r; \quad g_j(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \leq 0, \quad j = 1, \dots, s \right\}$$

on *käypä joukko*, jonka pisteet ovat *käyvät ratkaisut*. Tehtävän *optimiratkaisu* on sellainen käypä ratkaisu, joka antaa kohdefunktiolle pienimmän arvon. Minimoinnin sijasta voidaan kohdefunktiota f maksimoida, tai käyttää yhteyttä

$$\max f(\mathbf{x}) = -\min(-f(\mathbf{x})).$$

Lineaarisen sekalukuprobleemaan MILP *standardi epäyhtälömuoto* on

$$\max \mathbf{c}^T \mathbf{x} + \mathbf{d}^T \mathbf{y}$$

käyvässä joukossa

$$P = \{[\mathbf{x}^T, \mathbf{y}^T]^T \in \mathbb{Z}_+^n \times \mathbb{R}_+^q \mid \mathbf{A}\mathbf{x} + \mathbf{B}\mathbf{y} \leq 0\}. \quad (4.1)$$

4.2 Loogisten ehtojen esittäminen

Käytännössä suurin osa malleissa esiintyvistä kokonaismuuttujista on binäärimuuttujia ja peräisin loogisten ehtojen mallintamisesta. Seuraavassa esitellään muutamia yleisiä tilanteita. Koska laskennallisista syistä pyritään *lineaarisen* optimoinnin muotoon, ei käytä tuloja, vaan ainoastaan *lineaarisia yhtälöitä ja epäyhtälöitä*. Näitä saa olla myös useita yhtä mallinnettavaa asiaa kohden, jolloin normaaliin tapaan yhtälö- tai epäyhtälöryhmä ymmärretään kyseisten ehtojen konjunktiksi. (Tämä eroaa tavanomaisemmasta Boolean algebran käytöstä juuri kertolaskun välttämisenä. Menettely perustuu *propositiologiikan konjunkttiiviseen normaalimuotoon*.)

- *Yhden vaihtoehdon valinta* joukosta $S = \{s_1, \dots, s_n\}$: Muuttuja $x_i = 1$, jos s_i valitaan, $x_i = 0$ muuten, $i = 1, \dots, n$. Silloin on oltava voimassa yhtälö

$$x_1 + \dots + x_n = 1.$$

- Vastaavasti korvaamalla yllä oleva yhtälö epäyhtälöllä \leq tai \geq saadaan valittua joukosta S korkeintaan yksi tai vähintään yksi alkio.

[54]

- Jos ehdon A_i toteutumista kuvaa muuttuja x_i , joka saa arvon 1, jos A_i on tosi, ja arvon 0 muuten, niin *implikaatio* ”jos A_1 , niin A_2 ” voidaan esittää epäyhtälöllä

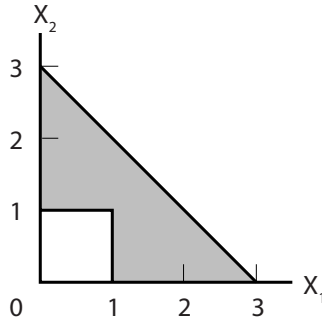
$$x_1 \leq x_2.$$

- Jos rajoitusepäyhtälöistä $g(\mathbf{x}) \leq 0$, $h(\mathbf{x}) \leq 0$ halutaan toteutuvan ainakin toinen (siis kyseessä on looginen *tai* ehtojen välillä, *disjunctiivinen ehto*), niin otetaan käyttöön ohjaava binäärimuuttuja y ja riittävän suuri positiiviluku M ja asetetaan ehdot

$$\begin{aligned} g(\mathbf{x}) &\leq M(1 - y), \\ h(\mathbf{x}) &\leq My. \end{aligned}$$

ESIMERKKI 4.1

Kuvassa 4.1 olevan kuvion mukainen käypä joukko *disjunctiivisesta lineaarisesta optimoinnista* voitaisiin esittää seuraavilla ehdoilla:



Kuva 4.1. Käypä alue disjunkttiivisella ehdolla.

$$\begin{aligned}x_1 + x_2 &\leq 3, \\x_1 &\geq 0, \\x_2 &\geq 0, \\x_1 \geq 1 \text{ tai } x_2 &\geq 1,\end{aligned}$$

[55]

jotka sitten ovat muunnettavissa normaaliin matematiikan esitystapaan epäyhtälöryhmäksi (jossa sopimuskäytännön mukaisesti rivien välillä on looginen konnektiivi *ja*):

$$\begin{aligned}x_1 + x_2 &\leq 3, \\x_1 &\geq 0, \\x_2 &\geq 0, \\1 - x_1 &\leq M(1 - y), \\1 - x_2 &\leq My, \\y &\in \{0, 1\}.\end{aligned}$$

4.2.1 Kiinteän kustannuksen esittäminen

Olkoon $x \geq 0$ jotakin aktiviteettia kuvaava reaalimuuttuja ja olkoon kustannusfunktio

$$f(x) = K + cx, \quad \text{kun } x > 0 \text{ ja } f(0) = 0.$$

Silloin kustannukset alkavat kiinteästä kustannuksesta K heti, kun aktiiviteettia x esiintyy, eli kun $x > 0$ ja kasvavat sitten lineaarisesti muuttujan x mukana. Otetaan käyttöön binäärimuuttuja y ja ”suuri positiivinen luku” M ja asetetaan

$$f(x) = Ky + cx$$

sekä muuttujia x ja y sitovaksi ehdoksi

$$0 \leq x \leq My.$$

Silloin x voi olla > 0 vain, kun $y = 1$, jolloin kiinteän kustannuksen osuus tulee kustannusfunktioon. Jos $y = 0$, niin välttämättä $x = 0$ ja kustannus $= 0$. (Tapaus $y = 1$ ja $x = 0$ ei pääse f :n minimoinnin takia loppuratkaisuksi.)

Tyypillinen tilanne syntyy kuljetusongelmissa. Kuljetuskustannukset ilmaistaan yleensä kustannuksena tuoteyksikköä kohden ja lisäksi auton käyttämisestä aiheutuvasta kiinteästä kustannuksesta.

4.3 Standardimalleja

[56]

Kokonaislukumalleissa on suuri joukko omilla nimillään yleisesti tunnettuja standardimalleja. Niihin perehtyminen on hyödyllistä, koska ne ovat yleensä analogian kautta käyttökelpoisia monilla aloilla, eivät pelkästään niillä, joilla ne on keksitty tai minkä mukaan ne on nimetty. Esimerkiksi seuraava reppuongelma voi olla käyttökelpoinen malli konttien pakkaamiseen, kauppatuotteen ongelmia tuotannon automaatioon.

4.3.1 Reppuongelma eli Knapsack Problem

Reppuun on lastattava n :stä esineestä mahdollisimman arvokas lasti siten, että annettu painoraja W ei ylity. Kukin esine i painaa määrän w_i verran ja on arvoltaan c_i , $i = 1, \dots, n$.

Valitaan muuttujiksi binäärimuuttujat x_i , jotka saavat arvon 1, jos esine numero i otetaan mukaan, ja muuten arvon 0. Silloin painorajoitus saa muodon

$$w_1x_1 + \dots + w_nx_n \leq W.$$

Maksimoitava kohdefunktio on

$$c_1x_1 + \dots + c_nx_n.$$

Ongelma on siis

$$\max z = c_1x_1 + \dots + c_nx_n$$

ehdoilla

$$\begin{aligned} w_1x_1 + \dots + w_nx_n &\leq W \\ \mathbf{x} &\in \mathbf{B}^n, \quad \mathbf{B} = \{0, 1\}. \end{aligned}$$

Tehtävästä voidaan myös esittää versio, jossa esineitä on n :ää tyyppiä ja samantyyppisiä esineitä voidaan ottaa useita. Tällöin muuttujat x_i ovat ei-negatiivisia kokonaislukuja, eivät välttämättä binäärilukuja.

$$\begin{aligned} \max z &= c_1x_1 + \dots + c_nx_n, \\ w_1x_1 + \dots + w_nx_n &\leq W, \\ \mathbf{x} &\in \mathbb{Z}^n. \end{aligned}$$

(Koska Knapsack-probleemoissa on vain yksi rajoitusehto, ne ovat petollisen yksinkertaisen näköisiä. Ne on silti erittäin vaikea ratkaista. Vaihtoehtojen lukumäärä eli käypien ratkaisujen luku voi olla binäärimuuttujien tapauksessa rajoittavien ehtojen vähyyden takia pahimmillaan suuruusluokkaa 2^{n-1} .)

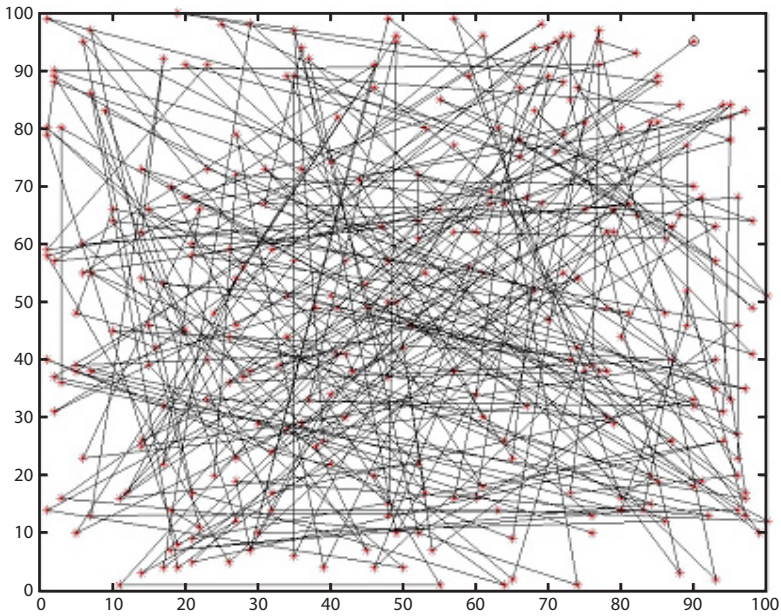
[57]

4.3.2 Kauppamatkustajan ongelma eli TSP

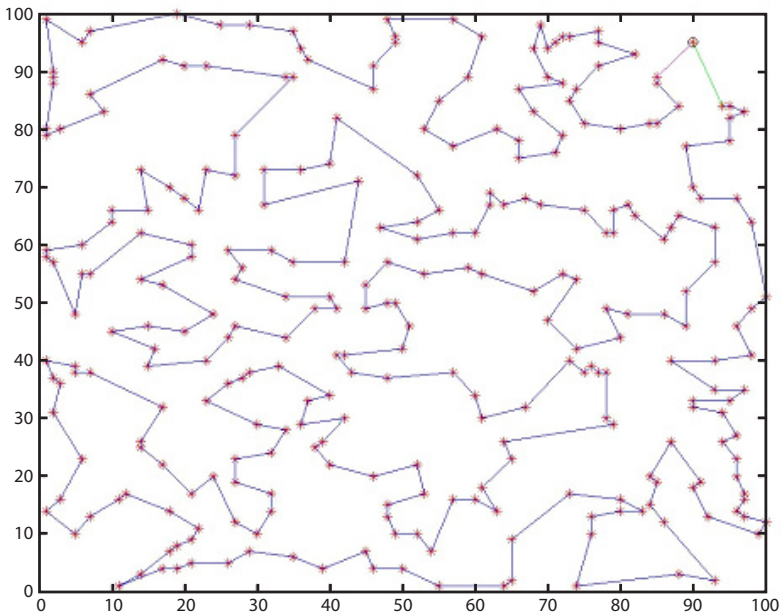
Kauppamatkustajan on kierrettävä n kaupunkia siten, että hän lähtee kaupungista 1 ja palaa sinne sekä käy jokaisessa muussa kaupungissa täsmälleen kerran. Matka kaupungista i kaupunkiin j on c_{ij} , joka ei välttämättä ole sama molempiin suuntiin. Tehtävänä on etsiä lyhin kiertomatka. Kyseinen ongelma tunnetaan englanniksi nimellä Traveling Salesman Problem, TSP. Kyse on siis siitä, missä järjestyksessä kaupungit on kierrettävä, jotta yhteenlaskettu matka olisi pienin mahdollinen. Eri mahdollisuuksia on paljon: $(n-1)!$

Kovinkaan moni ”kaupparatsu” ei ehkä käytä mallia kuukauden työsuunnitelmaa tehdessään, mutta silti TSP on analogian kautta yksi käytetyimmistä kokonaislukumalleista. Se soveltuu tilanteisiin, joissa on tehtävä jono operaatioita, joiden järjestys voi olla muuten vapaa, mutta eroa on eri järjestysten kustannuksilla (kokoontulo-ongelmat teollisuudessa, piirilevyn ladonta, automaattisten varastojen keräilyrobottien reititys jne.). Kuvassa 4.2 on esimerkki kolmensadan kaupungin TSP-ongelmasta.

TSP voidaan muotoilla lukuisilla eri tavoilla. Seuraavassa otetaan käyttöön malli, jossa binäärimuuttuja $x_{ij} = 1$, jos kaupungista i mennään seuraavaksi kaupunkiin j , ja muuten $x_{ij} = 0$. Silloin rajoitusehtoina ovat yhtälöt



[58]



Kuva 4.2. 300 kaupungin TSP ensin satunnaisratkaisuna (ylempi kuva) ja sitten heuristisen algoritmin (Lin-Kernighan-algoritmi eli 2-opt) antamana (lähes) optimiratkaisuna (alempi kuva).

$$\begin{aligned}x_{i1} + \dots + x_{in} &= 1, & i &= 1, \dots, n, \\x_{1j} + \dots + x_{nj} &= 1, & j &= 1, \dots, n.\end{aligned}$$

Näistä ensimmäinen yhtälönippu takaa sen, että kaupungista i lähdetään täsmälleen yhteen kaupunkiin, ja jälkimmäinen sen, että kaupunkiin j saavutaan täsmälleen yhdestä kaupungista.

Lisäksi tarvitaan vaikeammin muotoiltavissa oleva ehto, joka kieltää erillisten alireittien syntymisen. Eräs tällainen konstruktio koostuu epäyhtälöistä, joissa jokaiselle kaupunkijoukon $\{1, 2, \dots, n\}$ aidolle epäyhjälle osajoukolle S vaaditaan muuttujien x_{ij} summaksi ≥ 1 , kun $i \in S$ ja $j \notin S$. Tällöin siis reitti pakotetaan ulos osajoukosta S .

Minimoitavana kustannusfunktiona on

$$\sum_i \sum_j c_{ij} x_{ij}.$$

Esimerkiksi jos piirilevyyn on porattava reikiä annettuihin paikkoihin ja reiän poraamiseen menee vakioaika, aikaero eri poraustapojen välille syntyy poran terän siirtelystä. Ongelma on silloin TSP.

4.3.3 Toimipisteen sijaintiongelma

[59]

On valittava sijainnit perustettaville keskusvarastoille. Mahdollisia sijaintipaikkoja ovat ennalta selvitettyt paikkakunnat $i = 1, 2, \dots, n$. Palveltavia liikkeitä ovat $j = 1, 2, \dots, m$. Jos varasto perustetaan paikkakunnalle i , siitä aiheutuvat kiinteät kustannukset f_i . Kuljetuskustannukset varastosta i liikkeeseen j ovat c_{ij} , jos liikkeen j koko tarve toimitettaisiin varastosta i .

Ongelmana on selvittää, montako varastoa perustetaan ja mille valituista mahdollisista paikkakunnista ne sijoitetaan. Muuttuja $y_i = 1$, jos paikkakunnalle perustetaan varasto, ja muuten $y_i = 0$. Reaalimuuttuja x_{ij} kertoo sen osuuden, minkä paikkakunnalla i oleva varasto hoitaa liikkeen j tarpeesta, $0 \leq x_{ij} \leq 1$.

Minimoitavana kustannusfunktiona on silloin

$$z = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m c_{ij} x_{ij} + \sum_{i=1}^n f_i y_i$$

ja rajoitusehtoina ovat vaatimukset, että kunkin liikkeen tarve hoidetaan

$$\sum_{i_1}^n x_{i_1 j} = 1, \quad j = 1, \dots, m$$

ja että olemattomasta varastosta ei voi toimittaa

$$\sum_{j=1}^m x_{ij} \leq M y_i, \quad i = 1, \dots, n.$$

Tässä $M > 0$ on ”riittävän suuri” luku (esimerkiksi $M = m$ käy). Probleema on siis lineaarinen sekalukutehtävä eli MILP.

4.3.4 Kuljetusongelma eli Transportation Problem

Yksi varhainen sovellus lineaarisessa optimoinnissa oli kuljetusten optimointi. Perusmallissa on yksi tuote, jota valmistetaan monessa eri paikassa ja jota on kuljetettava eri asiakkaille.

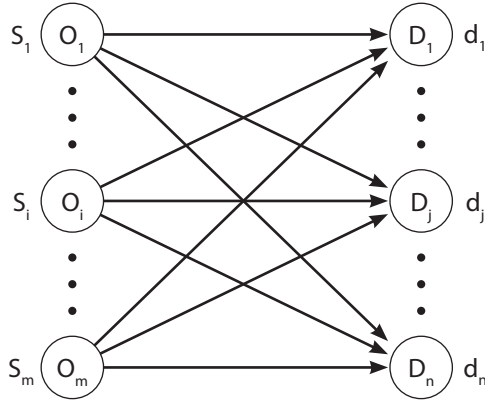
- Yritys valmistaa samaa tuotetta m :ssä tehtaassa O_1, \dots, O_m , joista tuotteet on toimitettava n :lle asiakkaalle D_1, \dots, D_n .
 - Valmistusmäärät ovat s_i , $i = 1, \dots, m$, kussakin tehtaassa i , ja asiakkaiden tilaukset ovat d_j , $j = 1, \dots, n$, kullakin asiakkaalla j .
 - Kuljetuskustannukset tehtaalta i asiakkaalle j ovat c_{ij} kuljetettavaa yksikköä kohti.
- [60]
- Muuttujina ovat kuljetusmäärät x_{ij} tehtaalta i asiakkaalle j .

Kuljetuskustannukset minimoiva kuljetussuunnitelma saadaan lineaarisen optimoinnin mallista

$$\begin{aligned} \min z &= \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n c_{ij} x_{ij}, \\ \sum_{i=1}^m x_{ij} &= d_j \quad (j = 1, \dots, n), \\ \sum_{j=1}^n x_{ij} &= s_i \quad (i = 1, \dots, m), \\ x_{ij} &\geq 0 \quad (i = 1, \dots, m, j = 1, \dots, n). \end{aligned}$$

Kuljetusongelma voidaan esittää verkkona, kuten kuvassa 4.3 (kaikkia nuolia ei ole tässä merkitty näkyviin). Kuljetusmallin tulee ratkaisua varten olla *tasapainossa* eli kokonaistarjonnan $s_1 + \dots + s_m$ on oltava sama kuin kokonaiskysynnän $d_1 + \dots + d_n$.

Jokainen kuljetusongelma voidaan tarvittaessa tasapainottaa ottamalla käyttöön keinotekoiset valettehtaat ”*dummies*” (jos tuotanto pienempi kuin kysyntä) tai asiakkaat (jos kysyntä on pienempi kuin tuotanto).



Kuva 4.3. Kuljetusongelma.

4.4 Täysin unimodulaariset matriisit

[61]

Kokonaislukumallien käsittelyssä suurimpia ongelmia ovat muuttujien arvojen pysyminen kokonaislukuina yhtälö- tai epäyhtälöryhmiä ratkaistaessa. Pyöristäminen saadusta reaalista ei-kokonaisluvusta ei yleensä anna järkevää tulosta. Koska lineaarisilla yhtälö- ja epäyhtälöryhmillä on korostetun suuri merkitys kombinatorisissa malleissa (juuri logiikan ehtojen lineaarisuudesta johtuen), on seuraava kokonaisluvut säilyttävä matriisityyppi ihanteellinen:

Matriisi \mathbf{A} on *täysin unimodulaarinen*, jos sen jokainen alideterminantti on 0, 1 tai -1 .

Heti nähdään, että matriisin \mathbf{A} alkioina voi olla vain lukuja 0, 1 ja -1 (1-rivisinä determinanteina). Ehto on siis varsin rajoittava, mutta kuitenkin moni erityisesti binäärioptimointiin liittyvä matriisi on sitä muotoa.

Täysi unimodulaarisuus säilyy transponoinnissa, rivin tai sarakkeen poistossa, rivien tai sarakkeiden paikkojen vaihdossa ja rivien tai sarakkeiden monistamisessa. Samoin jos \mathbf{A} on täysin unimodulaarinen, niin myös $[\mathbf{A} \quad \mathbf{I}]$ ja $\text{rref}(\mathbf{A})$ ovat sitä. (Merkintä $\text{rref}(\mathbf{A})$ tarkoittaa matriisin pelkistettyä riviporrasmuotoa, reduced row echelon form.)

Tällöin voidaan todistaa [2]:

LAUSE 4.1

Rajoitetun monitahokkaan $P = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}_+^n \mid \mathbf{A}\mathbf{x} \leq \mathbf{b}\}$ kärkipisteet ovat kokonaislukupisteitä kaikilla kokonaislukuvektoreilla \mathbf{b} täsmälleen silloin, kun \mathbf{A} on täysin unimodulaarinen matriisi.

Todistus perustuu oleellisesti Cramerin sääntöön. Voidaan osoittaa, että kuljetusongelman kerroinmatriisi on täysin unimodulaarinen.

4.5 Verkkomallit

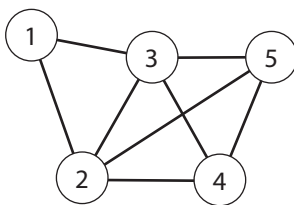
Täysin unimodulaariset matriisit voidaan rakentaa oleellisesti verkkomalleihin liittyvistä matriiseista [6]. Verkkomalleilla on muutenkin laaja käyttö. Seuraavassa esitellään verkkoteorian peruskäsitteitä optimointisolustusten näkökulmasta.

Graafi (*graph*) rakentuu *solmuista* (*node, vertex*) ja niitä yhdistävistä *kaarista* (*arc, edge*). Graafi on siis järjestetty pari (V, E) , missä V on solmujen joukko ja E on järjestämättöminä solmupareina esitetty kaarien joukko. Tässä V ja E oletetaan äärellisiksi.

[62]

ESIMERKKI 4.2

Kuvan 4.4 mukainen graafi on (V, E) , missä $V = \{1, 2, 3, 4, 5\}$ ja $E = \{(1, 3), (1, 2), (2, 3), (2, 4), (2, 5), (3, 4), (3, 5), (4, 5)\}$. Merkintä (i, j) tarkoittaa, että solmuja i ja j yhdistää kaari.



Kuva 4.4. Viiden solmun graafi.

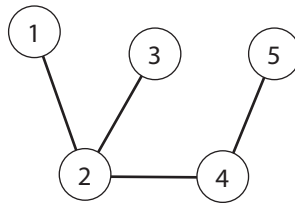
Polku solmusta i solmuun j on jono kaaria siten, että ensimmäinen alkaa solmusta i ja viimeinen päättyy solmuun j :

$$(i, i_1), (i_1, i_2), (i_2, i_3), \dots, (i_{n-1}, i_n), (i_n, j).$$

Polku on *piiri*, jos $i = j$. Edellisessä esimerkissä $(2,3), (3,4), (4,2)$ muodostavat polun, joka on piiri.

Graafi on *yhtenäinen*, jos sen jokaisesta solmusta päästään polkua pitkin sen jokaiseen toiseen solmuun. Yhtenäinen graafi on *puu*, jos siinä ei ole piirejä.

Graafin (V, E) *aligraafi* on graafi, joka sisältää osan V :n solmuista ja osan E :n kaarista. Graafin *virittävä puu* on sellainen aligraafi, joka sisältää graafin kaikki solmut ja on puu. Virittävä puu yhdistää siis kaikki graafin solmut, mutta ei yleensä sisällä alkuperäisen graafin kaikkia kaaria. Kuvassa 4.5 on edellisen esimerkin (eräs) virittävä puu.



Kuva 4.5. Esimerkin 4.2 virittävä puu.

[63]

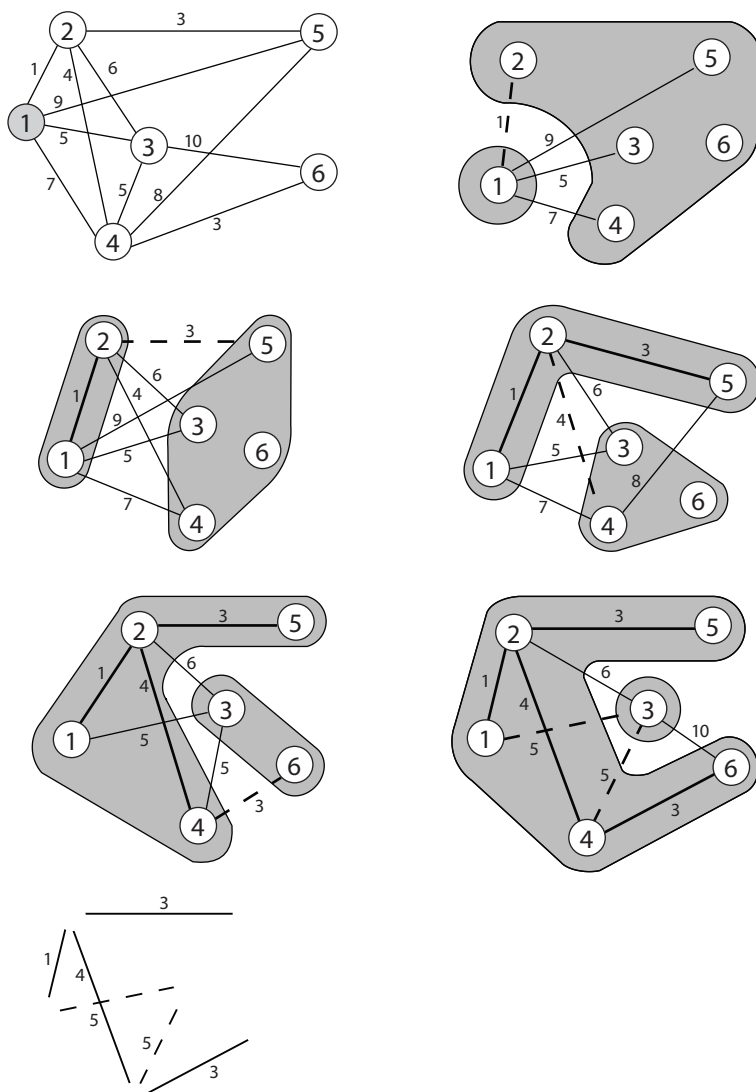
Painotetun graafin jokaiseen kaareen liitetään positiivinen reaaliluku, joka on kaaren päätepisteiden etäisyys (kaaren pituus tai tasapaino). Tällaisen graafin *minimaalinen virittävä puu* on sellainen virittävä puu, jolla kaarien pituuksien summa on mahdollisimman pieni.

ESIMERKKI 4.3

Seuraavalla sivulla olevan painotetun graafin solmusta 1 lähtemällä on muodostettu minimaalinen virittävä puu. Periaate on, että aina haetaan lyhin kaari jo muodostetun puun ja vielä ulkopuolella olevien solmujen välille. (Tämä on yksi niistä harvoista optimointitehtävistä, joissa kaikissa vaiheissa parasta tulosta tavoitteleva *ahne* algoritmi antaa aina optimin.)

Suunnattu graafi eli *digraafi* on graafi, jossa jokaiseen kaareen liittyy aina suunta. Sallimme myös, että samojen solmujen välillä on useita kaaria. Digraafin rakenne voidaan nytkin määrittää parilla (V, E) , missä V on solmujoukko, mutta E on nyt järjestettyjen solmuparien *monijoukko* (*multiset*). Se eroaa tavallisesta joukosta siten, että alkio voi esiintyä siinä monta kertaa.

[64]



Kuva 4.6. Graafien kaarien yhteyteen on merkitty etäisyydet.

ESIMERKKI 4.4

Viiden solmun digraafi, jossa $V = \{1, 2, 3, 4, 5\}$ ja $E = \{(1, 3), (1, 4), (1, 4), (3, 2), (2, 5), (5, 2), (5, 5), (5, 1)\}$. Tässä (i, j) tarkoittaa suunnattua kaarta solmusta i solmuun j . Kaari $(1, 4)$ esiintyy kahteen kertaan, kaaren $(1, 4)$ esiintymiskertoja on 2. Kaarella (i, j) on suunta solmusta i solmuun j eli $(2, 5)$ ja $(5, 2)$ ovat vastakkaisuuntaisia kaaria.

Digraafin rakenne voidaan määrittää myös *vierusmatriisilla* (adjacency matrix), kun $A = (a_{ij})$, missä a_{ij} = solmusta i solmuun j menevien kaarien lukumäärä. Siis $a_{ij} = 0$, jos kaarta ei ole, $a_{ij} = 1$, jos kaaria on yksi, ja $a_{ij} = k$, jos rinnakkaisia kaaria solmusta i solmuun j on k . Mikä on esimerkin 4.4 vierusmatriisi?

Verkko on digraafi, johon liitetään *virtaus* (flow), joka kulkee solmusta toiseen kaaria pitkin kaaren suuntaan. Virtaus on siis funktio $f: E \rightarrow \mathbb{R}$, $f(e) \geq 0$ kaikilla $e \in E$. Virtausta voi syntyä solmussa, jolloin solmu on *lähdesolmu*, tai sitä voi upota solmuun, jolloin solmu on *kohdesolmu*. Lähdesolmun j *tarjonta* (supply) on annetulla välillä $[s_{j1}, s_{j2}]$ joka voi olla yksi pistekin ($s_{j1} = s_{j2}$) tai mitä hyvänsä ei-negatiivista: $[0, \infty)$. Samoin kohdesolmun j *kysyntä* (demand) on annetulla välillä $[d_{j1}, d_{j2}]$, joka sekin voi olla määrätty täsmälliseksi arvoksi ($d_{j1} = d_{j2}$) tai olla määrittelemätön: $[0, \infty)$.

Jos solmu ei ole kumpaakaan edellä mainittua tyyppiä, sitä voidaan sanoa *kauttakulkusolmuksi*. (Solmu ei voi olla samanaikaisesti lähde- ja kohdesolmu, mutta se voi olla samalla lähde- ja kauttakulkusolmu tai kohde- ja kauttakulkusolmu.)

Virtausta ei synny eikä häviä verkossa muuten kuin lähde- ja kohdesolmuissa. *Virtauksen säilymislaki* vaatii kussakin solmussa, että tuleva virtaus = lähtevä virtaus (jolloin tulevaan virtaukseen luetaan mahdollinen lähdesolmun tuotto ja lähtevään virtaukseen mahdollinen kohdesolmun kulutus). Kaaren (i, j) kannalta virtauksella voi olla *ala-* ja *yläraja*, joka ilmaistaan välinä $[l_{ij}, u_{ij}]$. Tämä väli voi olla myös yksi piste, jolloin se pakottaa virtauksen kaarella luvuksi $l_{ij} = u_{ij}$ tai virtaus voi olla vapaa: $[0, \infty)$.

Virtaus, joka toteuttaa virtauksen säilymislain ja kaarien rajoitukset, on *käypä* virtaus. Sen arvot x_{ij} kullakin kaarella (i, j) kertovat virtausongelman käyvän ratkaisun. Kun kaariin (i, j) liitetään vielä *virtaukustannus* c_{ij} , saadaan verkon *minimikustannusvirtausmalli* (Minimal Cost Network Flow Model), jossa haetaan virtausta, joka minimoi kokonaiskustannukset. Hyvin moni optimoinnin ja operaatiotutkimuksen ongelma voidaan pukea verkon minimikustannusvirtausmalliksi.

Verkon rakenne ja siihen liittyvä virtaus voidaan kuvata algebrallisesti lineaarisina yhtälöinä ja epäyhtälöinä, jolloin virtauksiin liittyvät optimointitehtävät muotoutuvat matemaattisen optimoinnin malleiksi lineaarisin rajoitusehdoin. Erityisesti minimikustannusvirtausmalli on silloin lineaarisen optimoinnin tehtävä ja kokonaislukuoptimointiin kuuluva, jos virtauksen ainoa sallittu muoto on kokonaisluku.

Verkon (V, E) algebrallisen mallin *muuttujat* ovat *kaarien virtaukset* x_{ij} , $(i, j) \in E$ sekä lähdesolmujen i *tarjontamuuttujat* s_i ja kohdesolmujen j *kysyntämuuttujat* d_j . Jokaista verkon solmua $i \in V$ kohti saadaan virtauksen säilymislain johdosta *säilymisyyhtälö*, jossa

$$\begin{aligned} \text{tuleva virtaus} + \text{solmussa syntyvä virtaus} = \\ \text{lähtevä virtaus} + \text{solmussa kulutettava virtaus.} \end{aligned}$$

Koska mikään solmu ei voi olla samalla lähde- ja kohdesolmu, on säilymisyhtälössä solmusta lähtevien ja sinne tulevien kaarien virtausmuuttujat ja mahdollisesti joko tarjontamuuttuja tai kysyntämuuttuja (mutta ei molempia).

Säilymisyhtälöiden tyypit ovat siten seuraavat:

- lähdesolmun i yhtälö

$$\sum_{(j,i) \in E} x_{ji} - \sum_{(i,j) \in E} x_{ij} + s_i = 0.$$

- kohdesolmun j yhtälö

$$\sum_{(i,j) \in E} x_{ij} - \sum_{(j,i) \in E} x_{ji} - d_j = 0.$$

- kauttakulkusolmun k yhtälö

$$\sum_{(i,k) \in E} x_{ik} - \sum_{(k,j) \in E} x_{kj} = 0.$$

Virtausmuuttujille x_{ij} on lisäksi mahdolliset *ala- ja ylärajat*:

[66]

- kaaren (i,j) virtauksen rajat $l_{ij} \leq x_{ij} \leq u_{ij}$.

Lisäksi lähdesolmun i tarjonnalle on *tarjontarajat* ja kohdesolmulle j *kysyntäraajat*:

- lähdesolmun i tarjonnan rajat $s_{i1} \leq s_i \leq s_{i2}$;
- kohdesolmun j kysynnän rajat $d_{j1} \leq d_j \leq d_{j2}$.

Koska virtaus oletetaan aina ei-negatiiviseksi (virtauksen suuntaan), niin edellä olevat rajat ovat virheettömässä datassa ei-negatiivisia. Jos rajoja ei ole erikseen annettu, niiden *oletusarvona* on alaraja 0 ja yläraja ∞ . Edellä mainitut säilymisyhtälöt ja rajat toteuttavat virtaukset x_{ij} , s_i ja d_j muodostavat verkon virtausongelman *käyvän* ratkaisun.

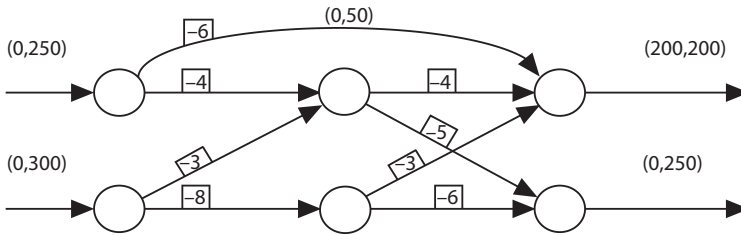
Optimivirtausmalliin liittyy vielä lineaarinen *kohdefunktio*. Kuhunkin kaareen (i,j) liittyy luku c_{ij} , joka on luonteeltaan *kustannus* (minimointitehtävät) tai *hyöty* (maksimointitehtävät). Kohdefunktio on

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{(i,j) \in E} c_{ij} x_{ij}.$$

Minimikustannusvirtausmallissa kohdefunktio ilmoittaa virtauskustannusten summan, jota minimoidaan. Muuttujavektori \mathbf{x} sisältää kaikki virtaukset

x_{ij} yhdessä pystyvektorissa siten, että toinen indeksi kulkee nopeammin kuin ensimmäinen (kyseessä on leksikograafinen eli sanakirjajärjestys: $x_{12}, x_{13}, \dots, x_{21}, x_{23}, \dots$).

Kuvassa 4.7 esitetyllä verkolla on kaksi lähdesolmua, tarjonnat välillä $(0,250)$ ja $(0,300)$. Kaarien kustannukset on merkitty neliöiden sisään ja kaarien kapasiteetit suluilla, esimerkiksi $(0,50)$. Oletusarvo kaarien kapasiteeteille on $(0, \infty)$. Kauttakulkusolmuja on kaksi, samoin kohdesolmuja. Ylemmän kohdesolmun kysyntä on tasan 200, alemman välillä $(0,250)$. (Merkintätavasta huolimatta välit ovat tässä suljettuja välejä.)



Kuva 4.7. Verkko kahdella lähdesolmulla.

[67]

Kun muuttujat ryhmitellään säilymisytälöissä siten, että samaan kaareen liittyvät muuttujat ovat samalla kohdalla, tulevat yhtälöryhmän kerroinmatriisissa sarakkeet (pystyrivit) kertomaan, mihin solmuun kaari on tulossa (+1) ja mistä solmusta lähdössä (-1). Koska jokaisella kaarella on täsmälleen yksi alku- ja loppusolmu, on siis jokaisella sarakeella täsmälleen yksi 1 ja -1. Vaakarivit taas vastaavat solmuja, ja niillä voi olla pelkästään lukuja 1 tai pelkästään lukuja -1 tai yleisimmin molempia vaihtelevin lukumäärin siitä riippuen, kuinka moni kaari solmuun tulee ja siitä lähtee.

Kyseisen yhtälöryhmän kerroinmatriisi on verkon *solmu-kaari-matriisi* eli (täysi) *insidenssimatriisi*. *Minimikustannusvirtausmalli* on siis *matriisi-muodossa*

$$\begin{aligned} \min f(\mathbf{x}) &= \mathbf{c}^T \mathbf{x} \\ \mathbf{A}\mathbf{x} + \mathbf{s} - \mathbf{d} &= \mathbf{0} \\ \mathbf{l} &\leq \mathbf{x} \leq \mathbf{u} \\ \mathbf{s}_1 &\leq \mathbf{s} \leq \mathbf{s}_2 \\ \mathbf{d}_1 &\leq \mathbf{d} \leq \mathbf{d}_2. \end{aligned}$$

Tässä \mathbf{A} on verkon insidenssimatriisi (kokoa $m \times n$, kun verkossa on m solmua ja n kaarta), \mathbf{s} on tarjontavektori, $m \times 1$ -vektori, jossa on solmujen

tuotannot, \mathbf{d} on kysyntävektori, $m \times 1$ -vektori, jossa on solmujen kysynnät, \mathbf{x} on virtausvektori, $n \times 1$ -vektori, jossa on kaarien virtaukset ja \mathbf{c} on kustannusvektori, $n \times 1$ -vektori, jossa on kaarien kustannukset. Kyseessä on siis lineaarisen optimoinnin ongelma, muuttujina vektorit \mathbf{x} , \mathbf{s} ja \mathbf{d} (joiden komponenteista osa voi olla vakioitakin).

Huomattakoon, että tässä mallissa \mathbf{s} ja \mathbf{d} eivät ole suoraan kaariin liittyviä virtauksia eikä niihin siitä syystä liity kustannuskertoimia. Jos niihin halutaan liittää kustannuksia, lisätään malliin niitä varten tarpeelliset solmut ja kaaret.

Edellä määritelty insidenssimatriisi \mathbf{A} on rakenteeltaan totaalisesti unimodulaarinen, joten jos kysyntä ja tarjonta ovat kokonaislukuja, niin optimivirtaus on automaattisesti kokonaislukuarvoista. Minimikustannusvirtausmalli sopii hyvin moneen tilanteeseen, varsinkin jos ”virtaava” suure valitaan sopivasti.

ESIMERKKI 4.5

[*Kohdistusongelma eli Assignment Problem.*] On sijoitettava n työntekijää m :ään työhön ($n \geq m$) siten, että töihin käytetty kokonaiskustannus on mahdollisimman pieni. Kun työntekijä i tekee työn j , siitä aiheutuu kustannus c_{ij} . Kutakin työtä voi tehdä vain yksi työntekijä, ja hän tekee saamansa työn loppuun. Kenellekään ei anneta useampaa kuin yksi työ ja kaikille töille on löydettävä tekijä. Verkkomallissa voidaan nyt valita virtaavaksi suureksi työntekijät, jotka menevät (”virtaavat”) siihen työhön, johon heidät valitaan.

[68]

ESIMERKKI 4.6

Tieverkosta on haettava lyhin reitti kahden paikan välille. Miten mallintaisit ongelmaa minimikustannusvirtauksella?

4.6 Yleistetyt verkot

Edellä tarkastetut verkkomallit ovat olleet ns. *puhtaita verkkomalleja*, koska niissä virtaus ei ole kaaria pitkin kulkiessaan voinut kadota eikä lisääntyä. Virtausta on syntynyt vain lähdesolmuissa ja poistunut vain kohdesolmujen kautta. Usein on kuitenkin tarpeen mallintaa virtausta, joka lisääntyy (esimerkiksi rahavirta kasvaa korkoa) tai vähenee (kaari vuotaa) kaarella. Tällaisia verkkoja sanotaan *yleistetyiksi verkoiksi* (*generalized networks, network flows with gains and losses*).

Puhtailta verkkomalleilla oli se ratkaisemisen kannalta huomattava etu, että jos kaikki parametrit olivat verkossa kokonaislukuja, myös optimaali-

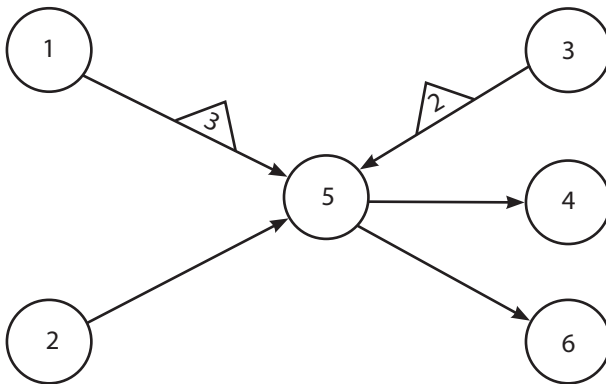
seksi virtaukseksi löytyi automaattisesti aina kokonaislukuarvoinen virtaus. Yleistettyjen virtausten tapauksessa tämä etu menetetään, mistä on haittaa silloin, kun virtauksen tulisi olla vain kokonaislukuarvoista (esimerkiksi binääristä). Toisaalta yleistettyjen verkkojen käytön etuina ovat laajemat mallintamisen mahdollisuudet. Esimerkiksi virtaus voi muodollisesti muuttua paitsi määrältään myös laadultaan toiseksi, raaka-aineiden virtaus puolivalmisteiksi ja ne edelleen lopputuotteiksi jne.

Yleistetyn verkon kaaren, ns. *yleistetyn kaaren*, virtausta voidaan muuttaa *muunnoskertomella*. Virtaus on solmusta i lähtiessään määrältään x_{ij} ja muunnoskertomella k_{ij} kertomisen jälkeen se on solmuun j saapuessaan määrältään $k_{ij}x_{ij}$. Muunnoskerroin voi olla *laadullinen*, jolloin myös virtauksen laatu muuttuu. Muunnoskerrointa voidaan graafisessa esityksessä kuvata kaaren vieressä pienellä kolmiolla, kuten kuvassa 4.8. Kaareen liittyvät virtauksen ala- ja ylärajat sekä kustannus liittyvät sopimuksen mukaan aina *lähtevään* virtaukseen eli *kaaren alkupäähän*.

Jos esimerkiksi solmuun v saapuu kolmelta eri taholta raaka-ainevirtaukset x_i ja tuotteen valmistamiseen menee materiaalia i määrät m_i kg tuoteyksikköä kohti ($i = 1, 2, 3$), tuotetta valmistuu $k_1x_1 + k_2x_2 + k_3x_3$ yksikköä ($k_i = 1/m_i$), joka virtaa solmusta v eteenpäin esimerkiksi varastoitavaksi. Jos kaaren muunnoskerroin ei muuta laatua mutta on aidosti suurempi kuin yksi, kyseessä on virtauksen *vahvistus* (*gain*), ja jos se on aidosti pienempi kuin yksi, kaarella on virtauksen *häviö* (*loss*).

[69]

Yleistetyn verkon algebrallinen esitys on muuten samanlainen kuin tavallisen verkon, mutta säilymsyhtälöissä **solmuun saapuvan virtauksen kerroin = kaaren muunnoskerroin**. Siten siis solmussa j lähtevän virtauksen x_{jm} kerroin = -1 jokaisella solmulla m , johon solmusta j on virtaus, ja



Kuva 4.8. Yleistetty verkko solmun 5 osalta.

saapuvan virtauksen x_{ij} kerroin $= k_{ij}$ jokaisella solmulla i , josta solmuun j tulee virtaus. Esimerkiksi kuvan 4.9 osaverkon algebrallinen esitys on solmun 5 osalta

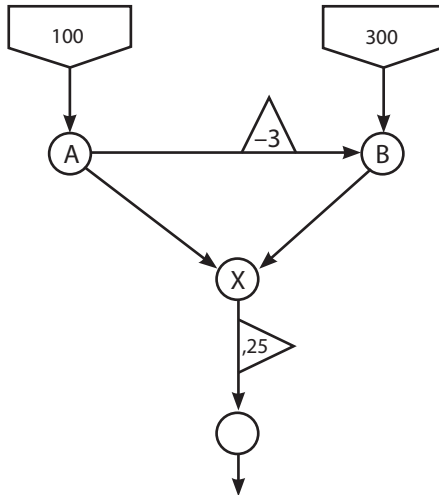
$$3x_{15} + x_{25} + 2x_{35} - x_{56} - x_{54} = 0.$$

Algebrallinen esitys ei aseta mitään esteitä sille, että muunnoskerroin olisi negatiivinen. Jos solmuun j solmusta i tulevan virtauksen muunnoskerroin $k < 0$, niin solmuun j ei itse asiassa tulekaan virtausta tätä kaarta pitkin vaan siitä lähtee. Silloin kaaren (i, j) molemmissa päissä olevista solmuista lähtee virtausta kaarelle, jossa kyseinen virtaus sitten lopulta katoaa. Tämä on sallittua yleistetyssä verkossa.

ESIMERKKI 4.7

Kuvan 4.9 mukaisessa yhdistetyssä verkossa solmuun A tulee 100 yksikköä virtausta ja solmuun B vastaavasti 300. Jos solmusta B jatkaa solmuun X 210, niin solmusta A on lähdettävä 30 solmuun B, jolloin solmusta A lähtee solmuun X 70. Suhdeluku $300/100 = 210/70$ säilyy samana.

[70]



Kuva 4.9. Kaaren muunnoskerroin voi olla myös negatiivinen.

4.7 Laskennallisesta vaativuudesta

Seuraavassa esitetään lyhyt katsaus laskennalliseen kompleksisuuteen kokonaislukuoptimoinnin näkökulmasta. Syvällisempi teoreettinen käsittely edellyttäisi *Turingin koneen* käsitteen hallintaa. Se ei kuitenkaan ole välttämätöntä laskennallisen vaativuuden seurausten ymmärtämisen kannalta.

Oletamme, että mallin ratkaiseminen on nyt optimiratkaisun tai ainakin käyvän ratkaisun hakemista. Erotamme *optimointiprobleeman* ja sen *instanssin* toisistaan. Edellinen on esimerkiksi lineaarisen optimoinnin ongelma $\min z = \mathbf{c}^T \mathbf{x}$, $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$, josta konkreettisilla lukuarvoilla saadaan eri tapauksia eli instansseja.

Tiettyyn ongelmaan voi olla tarjolla erilaisia algoritmeja. *Algoritmien hyvyttä* voidaan kuvata ainakin seuraavilla kriteereillä:

1. aikavaativuus pahimmassa tapauksessa
2. aikavaativuus keskimäärin
3. tilavaativuus pahimmassa tapauksessa
4. tilavaativuus keskimäärin.

[71]

Muitakin vertailuperiaatteita voi olla, mutta nämä ovat tärkeimmät. Kriteerit riippuvat ongelman *instanssin koosta* n , joka voi puolestaan riippua muuttujien ja/tai rajoitusehtojen lukumäärästä tai myös tehtävän parametrien esittämiseen tarvittavien merkkien määrästä.

Tarkastellaan lähemmin tietyn algoritmin *aikavaativuutta*. Se on ilmeisesti funktio instanssin koosta ja sitä kautta tarvittavista laskutoimituksista. Nämä taas riippuvat lukujen esittämistavoista, alkeislaskutoimituksista, algoritmin iterointien sisältämistä operaatioista ja iterointien lukumäärästä. Fyysinen aika sinällään riippuu tekniikan tasosta ja laskentavälineistä, eli se ei ole kovin vertailukelpoinen suure. *Aikakompleksisuusfunktio* on siksi ongelman koosta n riippuva operaatioiden lukumäärästä johdettu funktio $f(n)$. Näitä vertailtaessa ollaan kiinnostuneita vain *asymptoottisesta* käyttäytymisestä, kertalukueroista.

Kertalukuarvioita ilmaistaan pääasiassa O -merkinnällä $O(g(n))$, jossa

$$f(n) = O(g(n))$$

tarkoittaa kaikkia niitä funktioita f , joilla

$$|f(n)| \leq Cg(n)$$

eräästä n_0 alkaen. Esimerkiksi $f(n) = O(n^2)$ kertoo, että suurilla muuttujan n arvoilla funktio f käyttäytyy kuin vakio C kertaa n^2 . Vakion $C > 0$ luku-arvolla ei ole tässä oleellista merkitystä.

Osoittautuu, että funktion kertaluvussa on merkitsevää, onko se *polynomi-* vai *eksponenttifunktio*. Jos esimerkiksi tehtävä A:n aikakompleksisuus on n^2 ja tehtävä B:n vastaavasti 2^n , niin tuhat kertaa tehokkaampi kone nostaa tehtävä A:n tietyssä ajassa ratkaistavien instanssien kokoluokan noin 32 kertaa suuremmaksi ($32n$), mutta tehtävä B:n instansseja voidaan samassa ajassa ratkaista vain noin kymmenellä *lisätyssä* kokoluokassa ($n+10$).

Probleeman aikakompleksisuudella tarkoitetaan siihen soveltuvan parhaan algoritmin kompleksisuutta. Esimerkiksi lineaarisella optimoinnilla simplex-algoritmi (Danzig 1948) on pahimmassa tapauksessa eksponentiaalinen mutta ellipsoidialgoritmi (Hatsian 1977) polynomiainen.

Probleemoiden vaatavuutta luokiteltaessa optimointiprobleemat esitetään *tunnistustehtävinä*, jossa vastaus kiteytyy *kyllä- tai ei-* vastaukseksi. *Luokka P* koostuu *deterministisesti polynomiakaisista* tehtävistä: aikakompleksisuus on $O(g(n))$ jollakin polynomilla $g(n)$. *Luokka NP* sisältää *epädeterministisesti polynomiakaiset* tehtävät (arvattu ratkaisu voidaan tunnistaa polynomiajassa). Tässä *NP* ei siis tarkoita ”non-polynomial”. *Luokka co-NP* on *komplementäärisesti epädeterministisesti polynomiakaiset* tehtävät. Siinä käsitellään tunnistustehtäviä, joiden *komplementti* (kyllä- ja ei-vastaukset vaihdetaan) kuuluu luokkaan *NP*.

[72]

Sisältyvyydet $P \subseteq NP$ ja $P \subseteq co-NP$ ovat voimassa. Yksi matematiikan suurimmista avoimista kysymyksistä on, ovatko nämä sisältyvyydet aitoja. Hypoteesina on, että ovat, mutta hypoteesia ei ole onnistuttu todistamaan tai kumoamaan. Ei myöskään tiedetä, onko $NP = co-NP$ (luultavasti ei ole).

Probleema A voidaan *muuntaa* toiseksi probleemaksi B polynomialisesti, jos jokainen probleema A:n instanssi saadaan polynomiajassa muunnettua probleema B:n instanssiksi. Silloin, jos probleema B:llä on olemassa polynomiainen algoritmi, sellainen saadaan probleema A:lle.

Luokka NPC on *NP-täydellisten* probleemoiden luokka. Ne ovat tehtäviä, jotka ovat luokassa *NP*:ssä ja joihin jokainen muukin luokan *NP* tehtävä voidaan muuntaa polynomiajassa. *NP-vaikeita* ovat sellaiset probleemit, joihin jokainen luokan *NP* tehtävä voidaan muuntaa polynomiajassa (mutta voivat itse olla vaikeampiakin eli eivät välttämättä kuulu luokkaan *NP*). Luokka *NPC* koostuu siis *NP-vaikeista* luokkaan *NP* kuuluvista tehtävistä.

Jos jollekin *NP-täydelliselle* tehtävälle löydettäisiin deterministisesti polynomiainen algoritmi, sellainen olisi *kaikilla* luokkaan *NP* kuuluvilla tehtävillä, joten silloin $NP = P$. Näiden erittäin vaikeina pysyvien tehtävien luokittelu alkoi yli 30 vuotta sitten, ja *NP-täydellisiä* tehtäviä on nykyisin luetteloitu yli tuhat.

Optimoinnissa lineaarinen optimointi (jatkuvin muuttujin) kuuluu luokkaan P . Sen eniten käytetty algoritmi simplex-algoritmi on kuitenkin aikakompleksisuudeltaan eksponentiaalinen (worst case), vaikka sen keskimääräinen aikavaativuus on erittäin hyvä, lineaarinen. Jos lineaariseen optimointiin lisätään kokonaislukuvaatimuksia, tehtävä muuttuu NP -täydelliseksi. Jotkut erikoisrakenteiset kokonaislukuoptimointitehtävät voivat olla polynomialisia (edellä mainituista kuljetusongelma, verkon minimikustannusvirtaus, kohdistusongelma). Kuitenkin lukumääräisesti suurin osa sovelluksissa esiintyvistä kokonaislukuja sisältävistä optimointitehtävistä on osoitettu NP -täydelliseksi. Edellä esiintyneistä sellaisia ovat mm. kauppamatkustajan ongelma, toimipisteiden sijoitteluongelma ja reppu-ongelma.

Todettakoon, että soveltajalle riittää (nykyisen tietämyksen valossa ongelmaan $N \stackrel{?}{=} NP$ nähden) osoittaa ongelmansa NP -vaikeaksi (NP -hardness Proofs) eikä tarvitse tutkia mahdollisen NP -täydellisyyden vaatimaa kuulumista luokkaan NP . Useimmiten arviot saadaan tehtyä vertailemalla esillä olevaa ongelmaa tunnettuihin standardimalleihin. Jos esimerkiksi käsiteltävä instanssi on osa minimikustannusvirtausmallia, se on laskennallisesti ”helppo” eli luokassa P . Jos taas tutkimuksen alainen ongelmatyyppi sisältää erityistapauksinaan kaikki knapsack-ongelmat, se on NP -vaikea.

[73]

4.8 Harjoitustehtäviä

1. Ehtojen A_i ($i = 0, 1, \dots, n; n > 4$) toteutumista kuvataan binäärimuuttujilla x_i , jotka saavat arvon 1, jos A_i toteutuu, ja muuten arvon 0. Esitä seuraava looginen ehto algebrallisessa muodossa lineaarisilla yhtälöillä tai epäyhtälöillä (joita saa tarvittaessa olla useampiakin):

Jos ehto A_0 toteutuu, niin korkeintaan kaksi ehdoista A_1, A_2, A_3 ja ainakin yksi ehdoista A_4, \dots, A_n toteutuu.

(Algebrallinen muoto tarkoittaa sitä, että mukana muotoilussa ei saa olla logiikan symboleja, esimerkiksi implikaatiota. Kaikki on ilmaistava muuttujia x_i sitovilla lineaarisilla lausekkeilla yhtälöin tai epäyhtälöin, jolloin ne kelpaavat MILP-tehtävän rajoitusehdoiksi. Esimerkiksi

Jos A_0 toteutuu, niin ainakin toinen ehdoista A_1 ja A_2 toteutuu” saa muodon ” $x_0 \leq x_1 + x_2$ ”.

2. Tee kokonaislukeoptimointimalli Sudoku-pelien ratkaisemiseksi. Katso pelistä esimerkiksi osoitteesta <http://fi.wikipedia.org/wiki/Sudoku>. Tehtävässä voidaan rajoittaa tavalliseen 9×9 -kokoon. Ideana on siis kuvata Sudokun loogiset vaatimukset binäärimuuttujien lineaarisilla lausekkeilla (ainakin kolmen indeksin muuttujilla tämä onnistuu). Mallin ratkaisemista ei nyt edellytetä, mutta periaatteessa jokaisen MILP-algoritmin on siihen pystyttävä. Mallin tarkoitus on siis generoida käypiä sudokuristikoida, kun esitetyt ruudut on annettu. MILP-ratkaisijat edellyttävät yleensä jonkin kohdefunktion, joten sellaisen (keinotekoisena) tähän joutuu keksimään.

3. Yrityksessä toimiva ostaja kiertää eri paikkakunnilla (n kpl) ostamassa tuotteita (joita on m eri lajia). Kutakin tuotetta on saatavana tietyiltä paikkakunnilta (ei välttämättä kaikilta). Hinta vaihtelee paikkakunnittain. Tuotteita on hankittava tietyt määrät ja kullakin paikkakunnalla on tietty kapasiteetti toimittaa tuotteita. Miten ostajan on suunniteltava ostoreitinsä, jotta matkakustannusten ja ostohintojen summa olisi minimissään?

[74]

(a) Muotoile ongelmalle kokonaislukeoptimoinnin malli.

(b) Mitä voit sanoa tämän ongelman laskennallisesta vaativuudesta?

4. Automaattivaraston keräilyrobotti poimii tilaukseen kuuluvia tuotteita eri puolilla olevista tavarapinoista. Samaa tavaraa voi olla useita pinoja. Robotti on kiinnitetty varaston kattoon ja se liikkuu pinosta toiseen vaakatasossa suoraviivaisesti ”linnuntietä” vakiokorkeudella. Se poimii tuotteen ylhäältäpäin pinon päältä, ja tilauksen kannalta on samantekevää, minkä pinon se valitsee kunkin tuotelajin useista pinoista. Tilaukset on mitoitettu eriin, jotka mahtuvat kerralla robotin koriin.

Missä järjestyksessä yhteen tilaukseen kuuluvat tuotteet kannattaa kerätä ja mistä kohtaa pinoista valita, jotta robotin vaakasuorassa pinojen yläpuolella kulkema kokonaismatka minimoituu? Liikkeitä ei tarvitse huomioida korkeussuunnassa (poiminnan alas-/ylös-vaiheessa). Tee ongelmasta lineaarisen binäärioptimoinnin malli. Etäisyytenä voi käyttää euklidista etäisyyttä. Pinojen viemät, pinta-alaltaan suureh-

kotkin alueet varaston lattiasta ovat yhtenä datana, samoin kulloiseenkin tilaukseen kuuluvat tuotteet. Muotoile mahdollinen muu tarvittava data ja laadi malli.

5. Oletetaan tunnetuksi, että assignment-probleema on helppo (kuuluu luokkaan P) ja TSP sekä knapsack-ongelma ovat NP-vaikeita. (Harjoittelun vuoksi oletetaan pelkästään näin.)
 - (a) Perustele tämän tiedon nojalla seuraava väittämä: Yleinen lineaarinen kokonaislukuoptimointi IP on NP-vaikea, samoin yleinen BIP.
 - (b) Mikä on tehtävässä 4 esitettyyn ongelmaan laatimasi mallin laskennallinen vaativuus?

Kirjallisuutta

- [1] H.A. Eiselt and C.-L. Sandblom. *Integer Programming and Network Models*. Springer, 2000.
- [2] A.J. Hoffman and J.B. Kruskal. Integral boundary points of convex polyhedra. In *Linear inequalities and related systems*. Annals of Mathematics Studies, no. 38. Princeton University Press, Princeton, NJ, 1956, pp. 223–246.
- [3] B. Korte and J. Vygen. *Combinatorial Optimization. Theory and Algorithms*. Springer, 2nd edition, 2001.
- [4] G. Nemhauser and L. Wolsey. *Integer and Combinatorial Optimization*. Wiley, 1988.
- [5] A. Schrijver. *Combinatorial Optimization. Polyhedra and Efficiency. Vol. A–C*. Springer, 2003.
- [6] P.D. Seymour. *Journal of Combinatorial Theory (B)*, 28:305–359, 1980.
- [7] L. Wolsey. *Integer programming*. Wiley, 1998.

5

Datapohjaiset mallit

JORMA MERIKOSKI, ESKO TURUNEN, KIMMO RAIVIO ja TIMO MANTERE

5.1 Data ja sovitteet

[77]

5.1.1 Lagrangen interpolointi

Matematiikan soveltaja joutuu usein sovittamaan dataan tietyn tyyppisen käyrän eli määrittämään datalle *sovitteen*. Kuvitelkaamme esimerkiksi, että tietyn paikkakunnan lämpötila tietyssä päivänä on mitattu tunnin väliajoin, mutta meteorologi, jolla on näin saatu data, tarvitsee lämpötiloja eräinä muinakin ajanhetkinä. Miten hän saa ne likimäärin selville?

Olkoon f välillä I määritelty yhden reaalimuuttujan reaalifunktio, joka on muuten tuntematon paitsi tunnemme sen arvot (eri) *solmupisteissä* x_0, x_1, \dots, x_n eli arvot

$$y_0 = f(x_0), y_1 = f(x_1), \dots, y_n = f(x_n). \quad (5.1)$$

Kun x on välin I mielivaltainen piste, meidän on näiden tietojen perusteella määritettävä likiarvo luvulle $f(x)$. Kyseessä on *interpolointi*, jos $x_{\min} < x < x_{\max}$, ja *ekstrapolointi*, jos $x < x_{\min}$ tai $x > x_{\max}$. Tässä x_{\max} on suurin ja x_{\min} pienin luvuista x_0, x_1, \dots, x_n .

Meidän on siis muodostettava sellainen yhtälöt (5.1) toteuttava funktio, joka on riittävän yksinkertainen mutta antaa f :lle riittävän tarkan likiarvon. Näiden usein ristiriitaisten vaatimusten välillä täytyy tehdä kompromissi.

Polynomit ovat yksinkertaisimpia funktioita. Koska kaksi pistettä määrittää suoran ja kolme paraabelin, on luonnollista valita enintään n -asteinen polynomi

$$p(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_nx^n$$

ja yrittää määrittää sen kertoimet niin, että yhtälöt (5.1) toteutuvat. Näin saamme yhtälöryhmän

$$\begin{aligned} a_0 + a_1x_0 + a_2x_0^2 + \dots + a_nx_0^n &= y_0 \\ a_0 + a_1x_1 + a_2x_1^2 + \dots + a_nx_1^n &= y_1 \\ &\vdots \\ a_0 + a_1x_n + a_2x_n^2 + \dots + a_nx_n^n &= y_n. \end{aligned} \tag{5.2}$$

Tuntemattomien a_0, a_1, \dots, a_n kerroinmatriisin determinantti, ns. *Vandermonden determinantti*, on

$$\begin{vmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \dots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \dots & x_1^n \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \dots & x_n^n \end{vmatrix} = \prod_{i>j} (x_i - x_j) \neq 0,$$

[78]

joten yhtälöryhmällä (5.2) on yksikäsitteinen ratkaisu a_0, a_1, \dots, a_n . Näin saamamme polynomi p on pisteiden x_0, x_1, \dots, x_n määräämä funktion f *Lagrange'n interpolointipolynomi*. Se voidaan esittää eksplisiittisesti *Lagrange'n interpolaatiokaavalla*

$$p(x) = y_0l_0(x) + y_1l_1(x) + \dots + y_nl_n(x), \tag{5.3}$$

missä

$$l_i(x) = \frac{(x - x_0) \dots (x - x_{i-1})(x - x_{i+1}) \dots (x - x_n)}{(x_i - x_0) \dots (x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1}) \dots (x_i - x_n)} \quad (i = 0, \dots, n).$$

On helppo huomata (miten?), että p todellakin toteuttaa yhtälöt (5.1).

Lagrange'n interpolaatiokaava (5.3) sopii teoreettisiin tarkasteluihin, mutta p :n muodostaminen sillä on liian työlästä. Sen sijaan yhtälöryhmä (5.2) voidaan helposti ratkaista matemaattisella tietokoneohjelmistolla. Tosin Vandermonden matriisi on suurilla n :n arvoilla *huonolaatuinen* eli *häiriöaltis* (ks. esim. [16]), jolloin pienet muutokset lähtöarvoissa ja siis myös pyöristysvirheet saattavat aiheuttaa suuria muutoksia tuloksissa. Kuten kuitenkin pian huomaamme, Lagrange'n interpolointia ei suurilla n :n arvoilla kannata ollenkaan käyttää.

Esitämme p :n muodostamiseksi vielä menetelmän, jonka kompleksisuus on pienempi kuin yhtälöryhmän (5.2) ratkaisemisen. Määrittelemme *erotusosamäärät* seuraavasti. *Nollannet erotusosamäärät* ovat funktion arvot

$$f[x_0] = f(x_0), f[x_1] = f(x_1), \dots, f[x_n] = f(x_n).$$

Ensimmäiset erotusosamäärät ovat ”tavalliset” erotusosamäärät

$$f[x_0, x_1] = \frac{f[x_1] - f[x_0]}{x_1 - x_0}, \dots, f[x_{n-1}, x_n] = \frac{f[x_n] - f[x_{n-1}]}{x_n - x_{n-1}}.$$

Edelleen määrittelemme *toiset erotusosamäärät*

$$f[x_0, x_1, x_2] = \frac{f[x_1, x_2] - f[x_0, x_1]}{x_2 - x_0}, \dots, \\ f[x_{n-2}, x_{n-1}, x_n] = \frac{f[x_{n-1}, x_n] - f[x_{n-2}, x_{n-1}]}{x_n - x_{n-1}}.$$

Vastaavasti määrittelemme k :nnet *erotusosamäärät* palautuskaavalla

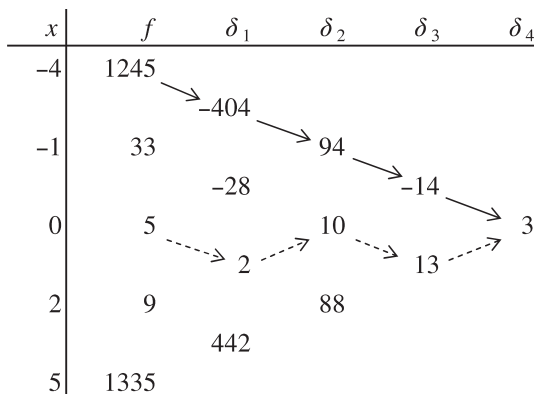
$$f[x_i, x_{i+1}, \dots, x_{i+k}] = \frac{f[x_{i+1}, x_{i+2}, \dots, x_{i+k}] - f[x_i, x_{i+1}, \dots, x_{i+k-1}]}{x_{i+k} - x_i},$$

[79]

missä $i = 0, \dots, n-k$.

Newtonin interpolaatiokaavan (todistus, ks. esim. [28, luku 2.1.3]) mukaan

$$p(x) = f[x_0] + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1) + \dots + f[x_0, x_1, \dots, x_n](x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_{n-1}).$$



Kuva 5.1. Erotusosamääräkaavio.

Erotusosamäärien laskeminen sujuu parhaiten *erotusosamääräkaaviolla*.

ESIMERKKI 5.1

Muodosta pisteiden -4 , -1 , 0 , 2 ja 5 määräämä funktion f Lagrangen polynomi p , kun $f(-4) = 1245$, $f(-1) = 33$, $f(0) = 5$, $f(2) = 9$ ja $f(5) = 1335$.

Muodostamme erotusosamääräkaavion pystyriveittäin (kuva 5.1). Kulke-
malla nuolilla \rightarrow merkittyä reittiä saamme

$$\begin{aligned} p(x) &= 1245 - 404(x+4) + 94(x+4)(x+1) - 14(x+4)(x+1)x \\ &\quad + 3(x+4)(x+1)x(x-2) \\ &= 1245 - 404x - 1616 + 94x^2 + 470x + 376 - 14x^3 \\ &\quad - 70x^2 - 56x + 3x^4 + 9x^3 - 18x^2 - 24x \\ &= 3x^4 - 5x^3 + 6x^2 - 14x + 5. \end{aligned}$$

Sama tulos saadaan muillakin reiteillä, esimerkiksi reitillä \dashrightarrow (tehtävä 1).

Jos pisteet x_0, x_1, \dots, x_n ovat tasavälisiä, niin f :n erotusosamäärien sijasta kannattaa tarkastella f :n *erotuksia*. Olkoon

[80]

$$x_1 - x_0 = x_2 - x_1 = \dots = x_n - x_{n-1} = h.$$

Funktion f *nollas erotus* pisteessä x on $\Delta^0 f(x) = f(x)$, *ensimmäinen erotus* on

$$\Delta f(x) = f(x+h) - f(x),$$

toinen erotus on

$$\begin{aligned} \Delta^2 f(x) &= \Delta \Delta f(x) = \Delta(f(x+h) - f(x)) = f(x+2h) - f(x+h) - \\ &\quad (f(x+h) - f(x)) = f(x+2h) - 2f(x+h) + f(x), \end{aligned}$$

ja yleisesti k :s *erotus* on

$$\Delta^k f(x) = \Delta \Delta^{k-1} f(x) \quad (1 \leq k \leq n).$$

Erotusosamäärien ja erotusten välillä on (tehtävä 2) yhteys

$$f[x_0, x_1, \dots, x_k] = \frac{\Delta^k f(x_0)}{k!h^k} \quad (k = 0, 1, \dots, n), \quad (5.4)$$

joten Newtonin interpolaatiokaava erotusten avulla on

$$p(x) = f(x_0) + \frac{\Delta f(x_0)}{h}(x - x_0) + \frac{\Delta^2 f(x_0)}{2!h^2}(x - x_0)(x - x_0 - h) + \dots + \frac{\Delta^n f(x_0)}{n!h^n}(x - x_0)(x - x_0 - h) \cdots (x - x_0 - (n - 1)h).$$

Erotuskaaviota käytetään kuten erotusosamääräkaavioita. Koska $\Delta^k f =$ vakio $\neq 0$ ja $\Delta^{k+1} f = \Delta^{k+2} f = \dots = 0$, jos (ja vain jos) f on n :nnen asteen polynomi (tehtävä 3), polynomien p arvoja voidaan taulukoida erotuskaaviolla muodostamatta p :n lauseketta.

ESIMERKKI 5.2

(a) Muodosta pisteiden $-1, 0, 1, 2$ ja 3 määräämä funktion $f(x) = x^4$ erotuskaavio. (b) Laske sitä täydentämällä $f(4)$.

(a) Saamme kuvassa 5.2 esitetyssä erotuskaaviossa kolmion rajoittaman osan.

(b) Koska f on neljännen asteen polynomi, sen kaikki neljännet erotukset ovat samat kuin kaavion antama $\Delta^4 f(-1) = 24$. Erityisesti $\Delta^4 f(0) = 24$. Merkitsemme sen kaavioon ja täydennämme siitä alas vasemmalle lähtevän viistorivin, jolloin saamme tulokseksi $f(4) = 256$.

[81]

Kuvitelkaamme, että meillä on tasavälisin muuttujanarvoin tehtyjä havaintoarvoja tuntemattomasta funktiosta f . Jos erotuskaaviossa kaikki tietyt

x	f	Δ	Δ^2	Δ^3	Δ^4
-1	1				
0	0	-1			
1	1	1	2		
2	16	15	14	12	
3	81	65	50	36	24
4	256	175	110	60	24

Kuva 5.2. Erotuskaavio.

kertaluvun erotukset ovat likimäärin nollia, niin voimme ottaa f :n likiarvopolynomiksi sen Lagrangen polynomin, jonka asteluku on tämän erotuksen kertaluku miinus yksi. Tällöin voimme ekstrapoloida f :ää niin, että laskeamme p :n arvoja täydentämällä erotuskaaviota, kuten teimme esimerkissä 5.2. Lauseketta $p(x)$ ei siis tarvitse silloin muodostaa.

Harjoitustehtäviä

1. Ratkaise esimerkin 5.1 tehtävä kulkemalla erotusosamääräkaaviossa nuolilla $--\rightarrow$ merkittyä reittiä.
2. Todista erotusosamäärien ja erotusten välinen yhteys (5.4).
3. Todista: Funktion f k :nnet erotukset ovat samat ja nolosta eroavat sekä korkeammat erotukset ovat nollia (mielivaltaisella $h \neq 0$), jos ja vain jos f on k :nnen asteen polynomi.
4. Laske esimerkin 5.2 erotuskaaviota täydentämällä $f(5)$.
5. Mikä on jonon 30, 68, 130, 222, 350 ”seuraava luku”?
6. Luvuista 6724, 6889, 7065, 7225, 7396, 7569 yksi on ”väärä”. Mikä?
7. Yliopistojen opetus- ja tutkimushenkilöstön kuukausipalkat euroina ilman henkilökohtaisia lisiä olivat 1.6.2006 seuraavan taulukon mukaiset.

[82]

<i>Vaativuustaso</i>	<i>Palkka</i>
1	1 512,89
2	1 619,36
3	1 785,65
4	2 071,60
5	2 382,90
6	2 761,12
7	3 173,82
8	3 784,49
9	4 333,84
10	4 954,40
11	5 683,47

- (a) Minkä tason palkka eroaa eniten siitä, jonka sen pitäisi olla ottaen huomioon muiden tasojen palkat?
- (b) Mikä tämän palkan pitäisi olla?
- (c) Jos ”huippuprofessoreille” asetettaisiin vielä uusi vaativuustaso 12, minkä palkan määrittäisit heille?

5.1.2 Interpolointi kuutiosplinillä

Olisi houkuttelevaa otaksua, että Lagrangen interpolointi saataisiin mieltävaltaisen tarkaksi lisäämällä solmupisteitä tarpeeksi. Kuitenkin asteluvun kasvaessa tapahtuu usein *Rungen ilmiö* (ks. esim. [26]), jolloin p heilahtelee erittäin voimakkaasti solmupisteiden välillä, vaikka ne olisivat lähellä toisiaan. Siksi suuriasteista interpolointipolynomia ei kannata käyttää, vaan on parempi jakaa tarkasteltava väli I osaväleihin ja käyttää kuhunkin osaväliin sopivaa pienempiasteista interpolointipolynomia.

Olkoot solmupisteet $x_0 < x_1 < \dots < x_n$, missä n on parillinen. Muodostamme osavälillä $[x_k, x_{k+2}]$, missä k on parillinen, f :n kuutiosplinin määrittelemällä interpolointipolynomin s paloittain

$$\begin{aligned} s(x) &= s_{k+1}(x) = a_{k+1} + b_{k+1}x + c_{k+1}x^2 + d_{k+1}x^3 & (x_k \leq x < x_{k+1}), \\ s(x) &= s_{k+2}(x) = a_{k+2} + b_{k+2}x + c_{k+2}x^2 + d_{k+2}x^3 & (x_{k+1} \leq x \leq x_{k+2}). \end{aligned}$$

Vaadimme, että s yhtyy f :ään solmupisteissä ja on kahdesti derivoituva x_{k+1} :ssa, jolloin saamme yhtälöryhmän

$$\begin{aligned} a_{k+1} + b_{k+1}x_k + c_{k+1}x_k^2 + d_{k+1}x_k^3 &= f(x_k) \\ a_{k+1} + b_{k+1}x_{k+1} + c_{k+1}x_{k+1}^2 + d_{k+1}x_{k+1}^3 &= f(x_{k+1}) \\ a_{k+2} + b_{k+2}x_{k+1} + c_{k+2}x_{k+1}^2 + d_{k+2}x_{k+1}^3 &= f(x_{k+1}) \\ a_{k+2} + b_{k+2}x_{k+2} + c_{k+2}x_{k+2}^2 + d_{k+2}x_{k+2}^3 &= f(x_{k+2}) \\ b_{k+1} + 2c_{k+1}x_{k+1} + 3d_{k+1}x_{k+1}^2 &= b_{k+2} + 2c_{k+2}x_{k+1} + 3d_{k+2}x_{k+1}^2 \\ 2c_{k+1} + 6d_{k+1}x_{k+1} &= 2c_{k+2} + 6d_{k+2}x_{k+1}. \end{aligned}$$

Koska yhtälöitä on kuusi ja tuntemattomia kahdeksan, voimme asettaa kaksi lisäehtoa.

Olkoon aluksi $x_k \neq x_0, x_n$. Vaadimme, että s on siinä derivoituva. Vertaamalla s :n oikeanpuolista derivaatta ja välillä $[x_{k-2}, x_k]$ vastaavasti saadun s :n vasemmanpuolista derivaattaa tässä pisteessä saamme lisäehdon

$$b_{k+1} + 2c_{k+1}x_k + 3d_{k+1}x_k^2 = b_kx_k + 2c_kx_k + 3d_kx_k^2.$$

Pisteen x_0 antama lisäehto voidaan asettaa kahdella eri tavalla. *Luonnollisen splini* asetuu tässä pisteessä vapaasti ”luonnolliseen suuntaan” $s'(x_0)$, johon f :n pienet muutokset muissa solmupisteissä eivät vaikuta. Toisin sanoen $s''(x_0) = 0$ eli

$$2c_1 + 6d_1x_0 = 0. \quad (5.5)$$

Jos $f'(x_0)$ tunnetaan, niin voidaan muodostaa *pakotettu splini* (clamped spline), joka asetuu tässä pisteessä samaan suuntaan kuin f :n kuvaaja. Toisin sanoen $s'(x_0) = f'(x_0)$ eli

$$b_1 + 2c_1x_0 + 3d_1x_0^2 = f'(x_0). \quad (5.6)$$

Pisteen x_n antama lisäehto asetetaan vastaavasti (tehtävä 8).

Käymällä läpi kaikki välit $[x_0, x_2], [x_2, x_4], \dots, [x_{n-2}, x_n]$ saamme $(n/2) \cdot 8 = 4n$ yhtälöä. Myös tuntemattomia on $4n$, nimittäin kertoimet $a_1, a_2, \dots, a_n, b_1, b_2, \dots, b_n, c_1, c_2, \dots, c_n, d_1, d_2, \dots, d_n$.

[84]

Spliniaprosimoinnin yleinen teoria ja yleiset menetelmät saadaan *B-splini*en (ks. esim. [18]) avulla.

Harjoitustehtäviä

- Muodosta pisteen x_n antamat yhtälöitä (5.5) ja (5.6) vastaavat yhtälöt.
- Tiedetään, että $f(-1) = 13$, $f(0) = 7$ ja $f(1) = 9$. Muodosta funktion f luonnollinen kuutiosplini, kun solmupisteet ovat $-1, 0$ ja 1 .
- (Lähde: [3, luku 11.16, esim. 1].) Veden tiheydestä eräissä lämpötiloissa tiedetään seuraavaa [15]:

Lämpötila ($^{\circ}\text{C}$)	Tiheys (g/cm^3)
-10	0,99815
0	0,99987
10	0,99973
20	0,99823
30	0,99567

- (a) Missä lämpötilassa veden tiheys on näiden tulosten perusteella suurimmillaan?
- (b) Kuinka suuri se silloin on?
11. (a) Suunnittele ja piirrä veneen poikkileikkaus käyttämällä kuutio splinejä. Hahmota aluksi poikkileikkauksen muoto päättämällä leveyden ja korkeuden suhde sekä valitsemalla sopivat solmupisteet. Käytä laskuissa jotakin valmista tietokoneohjelmaa tai ohjelmoi itse. Edellä esitetyn yhtälöryhmän ratkaiseminen jollakin valmiilla ohjelmalla sopii tällaiseen harjoitustehtävään, mutta toimii huonosti oikeissa sovelluksissa, joissa n on suuri. Tehokkaammat algoritmit sekä luonnollisen että pakotetun kuutio splinein laskemiseksi, ks. esim. [4, 28].
- (b) Suunnittele ja piirrä veneen pitkittäisleikkaus.

5.1.3 Pienimmän neliösumman menetelmä

[85]

Jos funktiosta f tiedetään vain yhtälöt (5.1) ja vaaditaan, että ne ovat tarkasti voimassa, niin tavallisesti ei löydy yhtä koko välillä käyttökelpoista interpolointipolynomia, vaan, kuten edellä huomasimme, interpolointi on suoritettava paloittain. Jos kuitenkin riittää, että nämä yhtälöt ovat likimäärin voimassa, jolloin interpoloinnin sijasta *approksimoidaan* f :ää niiden perusteella, tilanne muuttuu. Tarkastelemme nyt approksimointia, jolloin on mukavampi numeroida pisteet 1:stä eteenpäin eikä 0:sta. Tiedämme siis f :stä, että

$$y_1 = f(x_1), y_2 = f(x_2), \dots, y_n = f(x_n). \quad (5.7)$$

Jos pisteet $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)$ näyttävät myötäilevän jotakin suora, f :lle kannattaa muodostaa *lineaarinen malli* eli ensimmäisen asteen polynomi $p(x) = ax + b$. (Meille ”lineaarinen funktio p ” tarkoittaa siis funktiota $p(x) = ax + b$ toisin kuin lineaarialgebrassa, jossa se tarkoittaa vain funktiota $f(x) = ax$.) *Pienimmän neliösumman* (seuraavassa ”p.n.s.”) *menetelmässä* a ja b valitaan niin, että poikkeamien neliösumma

$$s(a, b) = (y_1 - ax_1 - b)^2 + (y_2 - ax_2 - b)^2 + \dots + (y_n - ax_n - b)^2$$

on mahdollisimman pieni. Laskemalla s :n osittaisderivaatat a :n ja b :n suhteen, merkitsemällä ne nolliksi ja ratkaisemalla syntyneen yhtälöparin saamme (tehtävä 12)

$$a = \frac{n \sum_i x_i y_i - (\sum_i x_i)(\sum_i y_i)}{n \sum_i x_i^2 - (\sum_i x_i)^2}, \quad b = \frac{(\sum_i x_i^2)(\sum_i y_i) - (\sum_i x_i y_i)(\sum_i x_i)}{n \sum_i x_i^2 - (\sum_i x_i)^2}. \quad (5.8)$$

Muitakin funktioita kuin ensimmäisen asteen polynomeja voidaan käyttää. Jos pisteet $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)$ näyttävät myötäilevän jotakin paraabelia, niin f :lle kannattaa muodostaa *kvadraattinen malli* eli toisen asteen polynomi $p(x) = ax^2 + bx + c$. Koska p.n.s:n menetelmän mukaiset kerrointen a , b ja c yleiset lausekkeet ovat nyt liian monimutkaiset, käsittelemme vain tapauksen, jossa paraabelin huippu näyttää olevan origon tienoilla. Tällöin $b = c = 0$ ja siis $p(x) = ax^2$. Poikkeamien neliösumma

$$s(a) = (y_1 - ax_1^2)^2 + (y_2 - ax_2^2)^2 + \dots + (y_n - ax_n^2)^2$$

on mahdollisimman pieni, kun s :n derivaatta on nolla, mikä tapahtuu (tehtävä 13), kun

[86]

$$a = \frac{\sum_i y_i x_i^2}{\sum_i x_i^4}. \quad (5.9)$$

Tarkastelemme seuraavaksi *eksponentiaalista mallia* $p(x) = ae^{bx}$. Parametrien a ja b määrittämiseksi on minimoitava

$$s(a, b) = (y_1 - ae^{bx_1})^2 + (y_2 - ae^{bx_2})^2 + \dots + (y_n - ae^{bx_n})^2,$$

mutta merkitsemällä s :n osittaisderivaatat nolliksi saadaan epälineaarinen yhtälöpari. Jos kaikilla x_i :llä ja y_i :llä on tietyt lukuarvot, niin tämä yhtälöpari voidaan ratkaista koneellisesti (ja vaihtoehtona on ratkaista minimointiongelmia suoraan jollakin optimointialgoritmilla), mutta a :lle ja b :lle ei saada yleisiä lausekkeita. Helpompaa on muodostaa funktiolle $\ln f$ lineaarinen malli $\ln p(x) = bx + \ln a$, jolloin b :lle ja $\ln a$:lle saadaan yleiset lausekkeet. Kuitenkin eksponentiaalinen p.n.s.-malli saadaan tällä tavalla vain likimäärin. Nimittäin se, että p on f :n p.n.s.-malli, ei ole yhtäpitävä sen kanssa, että $\ln p$ on $\ln f$:n p.n.s.-malli.

Vastaavasti voimme käsitellä f :n *potenssifunktio* mallia $p(x) = ax^b$, sillä funktion $\ln f$ malli $\ln p(x) = b \ln x + \ln a$ on lineaarinen muuttujan $\ln x$ suhteen.

Harjoitustehtäviä

12. Johda lineaarisen mallin $p(x) = ax + b$ parametreille a ja b lausekkeet (5.8).
13. Johda kvadraattisen mallin $p(x) = ax^2$ parametrille a lauseke (5.9).
14. (a) Selvitä kirjallisuuden tai netin perusteella taikka keksi itse, mitä muita kriteerejä paitsi neliösumma voidaan asettaa mallin hyvyydelle.
- (b) Pohdi syitä sille, miksi neliösumma on yleisin kriteeri.
- (c) Anna esimerkki tapauksesta, jossa tietty toinen kriteeri sopii mittaamaan mallin hyvyyttä paremmin kuin neliösumma.
15. Yhdysvaltojen väkiluku kehittyi vuosina 1900–1990 seuraavasti ([10], s. 356).

<i>Vuosi</i>	<i>Väkiluku (tuhansina)</i>
1900	75 995
1910	91 972
1920	105 711
1930	122 755
1940	131 669
1950	150 697
1960	179 323
1970	203 212
1980	226 505
1990	248 710

- (a) Ennusta tällä perusteella Yhdysvaltojen väkiluku vuonna 2000.
- (b) Tutki ennusteen hyvyttä ottamalla selvää väkiluvusta silloin.

16. (Lähde: [10, teht. 6.1].) Bornstein ja Bornstein [3] tutkivat 1970-luvulla, näkyykö suurten kaupunkien (tai vastaavien asutuskeskusten) kiireinen elämänmeno siten, että niiden asukkaat kävelevät pienempien kaupunkien asukkaita nopeammin. He mittasivat eri kaupunkien pääkaduilla 50 jalan matkan ja määrittivät kaupunkilaisten keskinopeuksien keskiarvon sillä. Tulokset olivat seuraavat.

<i>Kaupunki tai vastaava</i>	<i>Väkiluku (tuhansina)</i>	<i>Nopeus (jalkaa/s)</i>
Brno, Tsekkoslovakia	342	4,81
Praha, Tsekkoslovakia	1 093	5,88
Corte, Korsika	5,5	3,31
Bastia, Ranska	49	4,90
München, Länsi-Saksa	1 340	5,62
Psyko, Kreeta	0,4	2,76
Itea, Kreikka	2,5	2,27
Heraklion, Kreikka	78	3,85
Ateena, Kreikka	867	5,21
Safed, Israel	14	3,70
Dimona, Israel	24	3,27
Natania, Israel	71	4,31
Jerusalem, Israel	305	4,42
New Haven, Yhdysvallat	138	4,39
Brooklyn, Yhdysvallat	2 602	5,05

[88]

- (a) Mallinna kävelynopeuden riippuvuus väkiluvusta.
- (b) Mikä on mallin mukainen kävelynopeus opiskelukaupungissasi?
- (c) Testaa tätä tulosta kokeellisesti.
17. Miesten yleisurheilun (sileiden henkilökohtaisten) juokslajien (ulkoratojen) maailmanennätykset olivat 17.10.2009 seuraavat [32]. Ne on pyöristetty kymmenesosasekunnin tai sekunnin tarkkuudelle. Maantie- ja ratajuoksun ennätyksistä on valittu parempi.

<i>Laji</i>	<i>Ennätys</i>
100 m	9,6
200 m	19,2
400 m	43,2
800 m	1.41,1
1 000 m	2.12,0
1 500 m	3.26,0
1 maili	3.43,1
2 000 m	4.44,8
3 000 m	7.20,7
5 000 m	12.37,4
10 000 m	26.17,5
15 000 m	41.29
20 000 m	55.48
Puolimaraton	58.33
Tunnin juoksu	21 285 m
25 000 m	1.12.45
30 000 m	1.27.44
Maraton	2.03.59
100 km	6.13.33

[89]

(a) Mallinna ennätyksen riippuvuus matkan pituudesta.

(b) Mikä ennätys on mallin mukaan paras ja mikä huonoin?

5.2 Probabilistisia malleja

5.2.1 Markovin ketjut

Kuvitelkaamme, että yritykset Y_1 ja Y_2 kilpailevat erällä markkinoilla. Vuoden alussa Y_1 :n markkinaosuus oli 44,6 % ja Y_2 :n 55,4 %. Tammikuussa Y_1 säilytti 96 % asiakkaistaan ja siis menetti 4 % Y_2 :lle. Vastaavat luvut Y_2 :lla olivat 99 % ja 1 %. Miten markkinaosuuksien käy, jos tuleva kehitys on sama?

Se, että Y_1 menettää suuremman osan markkinoistaan Y_2 :lle kuin Y_2 menettää Y_1 :lle, saattaisi houkutellessa otaksumaan, että ajan mittaan Y_1 katoaa kokonaan markkinoilta. Näin ei kuitenkaan ole, sillä Y_2 :n osuuden tultua tarpeeksi suureksi 1% siitä on suurempi kuin 4% Y_1 :n osuudesta, jolloin Y_1 :n osuus alkaa kasvaa. Asiaa on siis tutkittava tarkemmin.

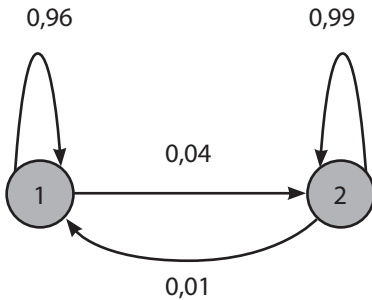
Olkoon K mielivaltaisesti valittu kuluttaja. Sanomme, että tehtäväämme mallintava *Markovin ketju* M on tilassa 1 tai 2 sen mukaan, onko K yrityksen Y_1 vai Y_2 asiakas. *Siirtymämatriisin*

$$P = \begin{pmatrix} 0,96 & 0,04 \\ 0,01 & 0,99 \end{pmatrix}$$

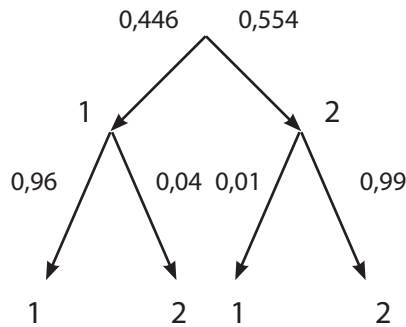
alkio p_{ij} on todennäköisyys, jolla M siirtyy tilasta i tilaan j (tai pysyy tilassa i , kun $i = j$). *Alkutilavektori* $\mathbf{x}_0 = (0,446 \quad 0,554)$ ilmoittaa tilojen alkuperäiset todennäköisyydet.

Markovin ketjua voidaan havainnollistaa *tiladiagrammilla* tai *puudiagrammilla*. Tiladiagrammi D on painotettu digraafi, jonka solmuina ovat tilat ja kaarina tilojen väliset siirtymät (kuva 5.3). Kaaren (i, j) paino on p_{ij} . Koska P :n vaakarivisummat ovat 1 (tehtävä 18a), kustakin D :n solmusta lähtevien kaarien painojen summa on 1. Tiloja voi olla enemmän kuin kaksi, jolloin P :n kertaluku ja D :n solmujen lukumäärä ovat vastaavasti suuremmat.

[90]



Kuva 5.3. Tiladiagrammi D .



Kuva 5.4. Puudiagrammi T .

Puudiagrammi T on painotettu juurellinen puu (kuva 5.4). Sen juuresta lähtevien kaarien painot ovat alkutilavektorin \mathbf{x}_0 alkioit, ja juuresta siirrytään tiloja vastaaviin solmuihin näillä todennäköisyyksillä. Solmuista lähtevien kaarien painot ovat \mathbf{P} :n alkioit vaakariveittäin, niistä siirrytään eteenpäin näillä todennäköisyyksillä ja jatketaan vastaavasti.

Puudiagrammin avulla (tai muulla tavalla) päätelemme, että esimerkin alkutilaa seuraavan tilan todennäköisyyksien *tilavektori*

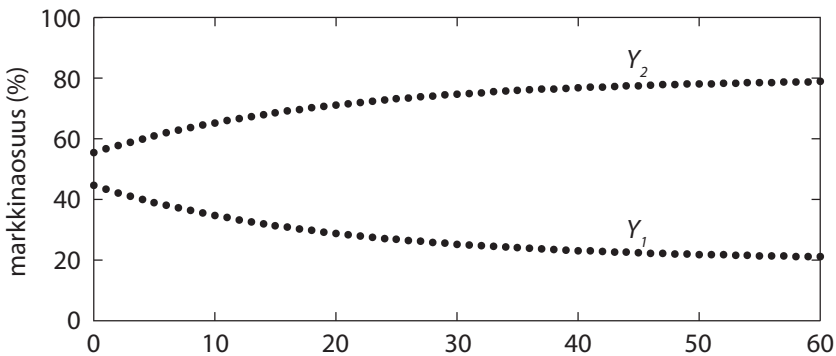
$$\mathbf{x}_1 = \mathbf{x}_0 \mathbf{P} = (0,446 \quad 0,554) \begin{pmatrix} 0,96 & 0,04 \\ 0,01 & 0,99 \end{pmatrix} = (0,434 \quad 0,566).$$

Markkinaosuudet tammikuun lopussa ovat siis $Y_1: 43,4\%$, $Y_2: 56,6\%$. Seuraava tilavektori $\mathbf{x}_2 = \mathbf{x}_1 \mathbf{P} = \mathbf{x}_0 \mathbf{P}^2 = (0,422 \quad 0,578)$, joten tilanne helmikuun lopussa on $Y_1: 42,2\%$, $Y_2: 57,8\%$. Yleisesti

$$\mathbf{x}_t = \mathbf{x}_{t-1} \mathbf{P} = \dots = \mathbf{x}_0 \mathbf{P}^t.$$

Koska $\mathbf{x}_{12} = \mathbf{x}_0 \mathbf{P}^{12} = (0,333 \quad 0,667)$, markkinaosuudet vuoden lopussa ovat $33,3\%$ ja $66,7\%$. Nyt herää kysymys, mitä markkinaosuuksille tapahtuu ”pitkän ajan kuluttua”, eli mitä voidaan sanoa rajavektorista $\lim_{t \rightarrow \infty} \mathbf{x}_t$. Vuoden lopun tilanne saattaa houkutelaa otaksumaan, että rajavektori on $(\frac{1}{3} \quad \frac{2}{3})$. Niin ei kuitenkaan ole, sillä viiden vuoden kuluttua markkinaosuudet ovat $21,1\%$ ja $78,9\%$. Kymmenen vuoden kuluttua ne ovat $20,1\%$ ja $79,9\%$, mikä puolestaan houkuttelee otaksumaan, että rajavektori onkin $(\frac{1}{5} \quad \frac{4}{5})$. Huomaamme pian, että se on oikein (kuva 5.5).

[91]



Kuva 5.5. Markkinaosuudet (%).

Markovin ketju M on *stabiili*, jos $\mathbf{x}_t (= \mathbf{x}_0 \mathbf{P}^t)$ lähestyy \mathbf{x}_0 :sta riippumattomasta *tasapainovektoria* \mathbf{x} , kun $t \rightarrow \infty$. Voidaan todistaa (ks. esim. [25]), että näin käy, jos \mathbf{P} on (alkioittain) positiivinen, ja eräillä yleisemmilläkin oletuksilla. Antamalla $t \rightarrow \infty$ yhtälössä $\mathbf{x}_t = \mathbf{x}_{t-1} \mathbf{P}$ saamme \mathbf{x} :lle yhtälön

$$\mathbf{x} = \mathbf{xP}, \quad (5.10)$$

joka on esimerkissämme

$$\begin{pmatrix} x_1 & x_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0,96 & 0,04 \\ 0,01 & 0,99 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 & x_2 \end{pmatrix}$$

eli

$$\begin{aligned} 0,96x_1 + 0,01x_2 &= x_1 \\ 0,04x_1 + 0,99x_2 &= x_2. \end{aligned}$$

Sen ratkaisu on $x_1 = c$, $x_2 = 4c$, missä c on valittava niin, että $x_1 + x_2 = 1$. Siis $c = \frac{1}{5}$, joten $\mathbf{x} = \left(\frac{1}{5} \quad \frac{4}{5}\right)$.

Transponoimalla yhtälön (5.10) saamme

$$[92] \quad \mathbf{P}^T \mathbf{x}^T = \mathbf{x}^T.$$

Siis tasapainovektori (pystyvektorina) on siirtymämatriisin transpoosin ominaisarvoa 1 vastaava ominaisvektori. Yleensäkin \mathbf{P} :llä (ja siis myös \mathbf{P}^T :lla) on ominaisarvona 1 (tehtävä 18b). Jos M on stabiili, niin *Peronin–Frobeniuksen lauseen* (ks. esim. [17]) mukaan ominaisarvo 1 on itseisarvoltaan suurempi kuin kaikkien muiden ominaisarvojen itseisarvot.

Seuraavaksi olkoon kaksitilaisen Markovin ketjun M siirtymämatriisi

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0,5 & 0,5 \end{pmatrix}.$$

Jos M joutuu tilaan 1, niin se jää sinne lopullisesti. Siksi tämä tila on *absorboiva*. Tasapainovektori $\mathbf{x} = (1 \quad 0)$ (tehtävä 19a), joten M on stabiili.

Tarkastelemme vielä kaksitilaista Markovin ketjua M , jonka siirtymämatriisi

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Kummastakin tilasta lähdetessä sinne palataan varmasti. Siksi kumpikin tila on *palautuva*. Jos alkutilavektori $\mathbf{x}_0 = (u \quad v)$, missä $u \neq v$, niin $\mathbf{x}_1 = (v \quad u)$, $\mathbf{x}_2 = \mathbf{x}_0$, $\mathbf{x}_3 = \mathbf{x}_1$, ..., joten jono (\mathbf{x}_t) ei lähesty mitään rajavektoria, ja siis M ei ole stabiili. Yhtälöllä $\mathbf{x} = \mathbf{xP}$ on kylläkin ratkaisu $\mathbf{x} = \left(\frac{1}{2} \quad \frac{1}{2}\right)$.

Määrittelemme nyt Markovin ketjun täsmällisesti. *Stokastinen prosessi* F on joukko satunnaismuuttujia $\{X(t) \mid t \in T\}$. Koska t tarkoittaa usein aikaa, kutsumme joukkoa T *aika-avaruudeksi*. Aika-avaruuden jokaiseen hetkeen t liittyy siis satunnaismuuttuja $X(t)$. Kaikkien satunnaismuuttujien $X(t)$ kaikkien arvojen joukko on F :n *tila-avaruus* S .

Olkoon $T = \{0, 1, 2, \dots\}$, jolloin merkitsemme $X_t = X(t)$, ja olkoon $S = \{1, 2, \dots, n\}$. Jos $X_t = i$ (eli satunnaismuuttujan X_t arvo on i), niin sanomme, että F on ajanhetkellä t tilassa i . Jos siitä seuraa, että F on hetkellä $t + 1$ tilassa j ajasta t riippumattomalla todennäköisyydellä p_{ij} , niin F :llä on *Markovin ominaisuus*. Siis Markovin ominaisuus tarkoittaa, että

$$P(X_{t+1} = j \mid X_t = i, X_{t-1} = i_{t-1}, \dots, X_1 = i_1, X_0 = i_0) = P(X_{t+1} = j \mid X_t = i) = p_{ij}$$

kaikilla $t \in T$ ja kaikilla $j, i, i_{t-1}, \dots, i_0 \in S$. Tällöin X_{t+1} :n ehdollinen jakauma riippuu vain X_t :n arvosta (eli F :n tilasta ajanhetkellä t) eikä siis aiemmasta historiasta. *Markovin ketju* on sellainen stokastinen prosessi, jolla on Markovin ominaisuus. Sen siirtymämatriisi $\mathbf{P} = (p_{ij})$.

Harjoitustehtäviä

[93]

18. Osoita, että jokaisen siirtymämatriisin (a) kaikki vaakarivisummat $= 1$, (b) ominaisarvona on 1.
19. (a) Osoita, että Markovin ketjun, jonka siirtymämatriisi

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix},$$

tasapainovektori $\mathbf{x} = (1 \quad 0)$.

- (b) Onko se Markovin ketju stabiili, jonka siirtymämatriisi on

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} \end{pmatrix}?$$

20. (Lähde: [31, esim. 6–6.1].) Gabriel ja Neumann [9] tutkivat, voidaanko siitä, sataako Tel Avivissa tänään vai ei, ennustaa, sataako siellä huomenna vai ei. Vuosilta 1923/24–1949/50 heillä oli aineisto, joka oli marraskuuden osalta seuraava. Sadepäiviä oli 195 ja 117 tapauksessa seuraavakin päivä oli sateinen.

Poutapäiviä oli 615 ja 535 tapauksessa seuraavakin päivä oli poutainen. Oletetaan, että Tel Avivissa on sateinen marraskuun päivä. Millä todennäköisyydellä siellä sataa (a) ylihuomenna, (b) viikon kuluttua, (c) koko viikon, (d) vuoden kuluttua?

21. Oxfordin ja Cambridgen yliopistojen välinen soutukilpailu on nykyajan urheilutapahtumista maailman vanhimpia ellei vanhin. Se pidettiin ensimmäisen kerran vuonna 1829. Kaikki tulokset ovat nettiosoitteessa [24]. Voidaanko niitä sopivalla aikavälillä mallintaa Markovin ketjulla?
22. Omistat kolme autohuoltamoita, joista yksi on kaupungissa A , yksi kaupungissa B ja yksi kaupungissa C . Tavanomaisen huoltamotoiminnan lisäksi tarjoat autoja vuokrattavaksi. Asiakas voi palauttaa vuokraamansa auton mille tahansa näistä kolmesta huoltamosta. Sinulla on tähän toimintaan käytössä vain muutama auto, jotka eivät riitä tyydyttämään kasvannutta kysyntää. Siksi olet päättänyt lisätä autojen lukumäärän sataan, mutta niin suuret määrät eivät mahdu huoltamoiden tiloihin, joten sinun täytyy rakentaa kunkin huoltamon yhteyteen lisätiloja. Selvittääksesi tilojen tarpeen eri kaupungeissa olet tutkinut, minne kustakin kaupungista vuokrattu auto palautetaan, ja saanut seuraavat tulokset: Kaupungista A vuokrattu auto palautetaan sinne todennäköisyydellä 0,8 ja kaupunkiin B ja C kumpaankin todennäköisyydellä 0,1. Jos auto on vuokrattu B :stä, niin se palautetaan sinne todennäköisyydellä 0,2, A :han todennäköisyydellä 0,3 ja C :hen todennäköisyydellä 0,5. Kaupungista C vuokrattu auto palautetaan sinne todennäköisyydellä 0,2, A :han samoin todennäköisyydellä 0,2 ja B :hen todennäköisyydellä 0,6. Kuinka monen auton tilat rakennat kuhunkin kaupunkiin?
23. (*Satunnaiskävely*, ks. esim. [25, esimerkit 4.5 ja 4.13].) Kävelijä K on ajanhetkellä $t = 0$ origossa. Hän astuu sekunnin väliajoin yhden yksikön pituisen askeleen x -akselilla positiiiviseen suuntaan todennäköisyydellä p ($0 < p < 1$) ja negatiiviseen suuntaan todennäköisyydellä $q = 1 - p$. Olkoon K :n kävelyä mallintava Markovin ketju M .

(a) Mikä on M :n (i) aika-avaruus T , (ii) tila-avaruus S ?

(b) Miten määritellään satunnaismuuttuja X_t ?

(c) Mitä voidaan sanoa ”siirtymämatriisin” \mathbf{P} dimensioista?

- (d) Muodosta P .
- (e) Millä todennäköisyydellä K on ajanhetkellä $t (> 0)$ palannut origoon?
- (f) Osoita, että K palaa varmasti origoon, jos ja vain jos $p = \frac{1}{2}$.
(Tässä kohdassa tarvitaan sellaisia tietoja, joita ei ole tässä kirjassa.)
24. (*Uhkapelurin vararikko-ongelma*, ks. esim. [25, luku 4.5.1].) Peluri G voittaa erään pelin yhdellä kierroksella yhden euron todennäköisyydellä p ($0 < p < 1$) ja häviää sen todennäköisyydellä $q = 1-p$. Alunperin hänellä on k (≥ 0) euroa. Hän päättää pelata niin kauan, kunnes hänellä on m ($> k$) euroa (tai hän joutuu vararikkoon).
- (a) Millä todennäköisyydellä G pääsee tavoitteeseensa?
- (b) Jos G pääsi tavoitteeseensa mutta ei malta lopettaa, miten hänen käy?
25. (*Leslien väestönkasvumalli*, ks. esim. [3, luku 11.13].) Tämä mallinnus ei johda oikeaan Markovin ketjuun, koska ”tilavektorin” alkiot eivät ole todennäköisyyksiä ja ”siirtymämatriisin” alkioiden vaakarivisummat eroavat yhdestä, mutta se sopii silti tähän yhteyteen.
- Kanadalaisten alle 50-vuotiaiden naisten hedelmällisyys ja vitaalisuus olivat vuonna 1965 seuraavan taulukon mukaiset [2].

<i>Ikäryhmä i</i>	<i>Hedelmällisyys a_i</i>	<i>Vitaalisuus b_i</i>
[0, 5[0,00000	0,99651
[5, 10[0,00024	0,99820
[10, 15[0,05861	0,99802
[15, 20[0,28608	0,99729
[20, 25[0,44791	0,99694
[25, 30[0,36399	0,99621
[30, 35[0,22259	0,99460
[35, 40[0,10457	0,99184
[40, 45[0,02826	0,98700
[45, 50[0,00240	–

Tässä a_i ilmoittaa, kuinka monta tytärtä nainen keskimäärin synnyttää ikäryhmässä i olonsa aikana, ja b_i on todennäköisyys sille, että ikäryhmän i nainen siirtyy aikanaan ikäryhmään $i + 1$.

- (a) Olkoon ikäryhmien lukumäärä n . Mikä merkitys on *Leslien matriisilla*

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & a_3 & \dots & a_{n-1} & a_n \\ b_1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & b_2 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & b_{n-1} & 0 \end{pmatrix} ?$$

- (b) Perronin-Frobeniuksen lauseen mukaan matriisilla \mathbf{L} on *Perronin ominaisarvo* λ , joka on reaalinen ja positiivinen sekä suurempi kuin kaikkien muiden ominaisarvojen itseisarvot, ja sitä vastaa (alkioittain) positiivinen *Perronin ominaisvektori* \mathbf{u} . Kanadan datan \mathbf{L} :lle on $\lambda = 1,0762$ ja (skaalattuna niin, että ensimmäinen alkio = 1)

[96]

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} 1,0000 \\ 0,9259 \\ 0,8588 \\ 0,7964 \\ 0,7380 \\ 0,6836 \\ 0,6328 \\ 0,5848 \\ 0,5390 \\ 0,4943 \end{pmatrix} .$$

Miten nämä tulokset ennustavat Kanadan väestönkasvua?

26. (Lähteet: [6, 16, 20, 21].) Googlen *PageRank*-algoritmi perustuu Markovin ketjuun. Olkoon kaikkien nettisivujen lukumäärä n . Annetaan niille numerot $1, 2, \dots, n$. Tarkastellaan sivun i pistemäärän määrittämistä algorithmeilla

$$r_i^{(0)} = \frac{1}{n}, \quad r_i^{(k+1)} = \sum_{j \in I_i} \frac{r_j^{(k)}}{o_j} \quad (k = 0, 1, 2, \dots),$$

missä I_i on sivulle i linkitettyjen sivujen joukko ja o_j on sivulta j linkitettyjen sivujen lukumäärä.

Olkoon $\mathbf{r}_k = (r_1^{(k)} \ r_2^{(k)} \ \dots \ r_n^{(k)})$. Määritellään $n \times n$ -matriisi $\mathbf{H} = (h_{ij})$ niin, että $h_{ij} = 1/0_i$, jos sivulta i on linkki sivulle j , ja $h_{ij} = 0$ muulloin.

(a) Osoita, että $\mathbf{r}_{k+1} = \mathbf{r}_k \mathbf{H}$.

Engelmana on, että tämä algoritmi saattaa hajaantua, ja vaikka se suppenisikin, rajavektori saattaa riippua alkuvektorista \mathbf{r}_0 . Niitä sivuja, joista ei lähde yhtään linkkiä, vastaa \mathbf{H} :ssa nollarivi, mikä on ongelman yksi syy. Siksi PageRankin tekijät Brin ja Page (sic!) korvasivat nollarivien nollat $1/n$:llä. Näin \mathbf{H} tulee korvatuksi matriisilla

$$\mathbf{S} = \mathbf{H} + \frac{1}{n} \mathbf{a} \mathbf{e}^T,$$

missä $\mathbf{e} = (1 \ 1 \ \dots \ 1)$, ja vektorille $\mathbf{a} = (a_1 \ a_2 \ \dots \ a_n)$ on $a_i = 1$, jos \mathbf{H} :n i :s vaakarivi on nollarivi, ja $a_i = 0$ muulloin.

(b) Osoita, että \mathbf{S} on Markovin ketjun siirtymämatriisi.

Asia ei ole vielä tällä selvä, sillä saatu Markovin ketju ei ole välttämättä stabiili. Stabiilisuuden saavuttamiseksi järjestetään siirtymämatriisi positiiviseksi.

[97]

(c) Osoita, että Googlen matriisi

$$\mathbf{G} = q\mathbf{S} + (1 - q)\mathbf{E},$$

missä $0 < q < 1$ ja $\mathbf{E} = \mathbf{e} \mathbf{e}^T / n$, on positiivinen Markovin ketjun siirtymämatriisi.

(d) Mikä merkitys on q :lla? Tavallisesti $q = 0,85$ ([6, 21]).

(e) Tarkastellaan Googlen matriisin $\mathbf{G} = (g_{ij})$ Markovin ketjua M . Mikä on g_{ij} :n merkitys nettisivujen i ja j kannalta?

(f) Miksi nettisivujen pistemääräksi kannattaa ottaa M :n tasapainovektorin alkio?

27. (Loppukevennys.) Markovin ketjuilla voidaan ”säveltää musiikkia”, ”keksiä uusia sanoja”, ”kirjoittaa runoja”, ”kertoa uutisia” ja tehdä paljon muutakin. Tutustu tähän aihepiiriin esimerkiksi lähteen [21] tai [23] perusteella.

5.2.2 Poissonin prosessi

Kuvitelkaamme, että tutkimme, kuinka paljon

- (a) tiettyyn kauppaan tulee asiakkaita t :ssä päivässä,
- (b) tietyssä maassa syntyy lapsia t :ssä vuodessa,
- (c) tietty jalkapalloilija tekee maaleja t :ssä ottelussa.

Olkoon I tarkastelemamme tapahtuma. Mallinamme sitä satunnaismuuttujalla $N(t)$, joka ilmoittaa, kuinka monta kertaa I on tapahtunut ajanhetken t mennessä. Näin meillä on stokastinen prosessi $N = \{N(t) \mid t \geq 0\}$. Se on *laskentaprosessi*, jos kaikki $N(t)$:t ovat kokonaislukuarvoisia ja

- (i) $N(0) \geq 0$,
- (ii) jos $s < t$, niin $N(s) \leq N(t)$.

[98] Jos $s < t$, niin satunnaismuuttuja $N(t) - N(s)$ ilmoittaa, kuinka monta kertaa I on tapahtunut aikavälillä $]s, t]$. Esimerkit (a), (b) ja (c) voidaan mallintaa laskentaprosesseina.

Laskentaprosessi N on *riippumattomien lisäysten prosessi*, jos erillisinä aikaväleinä tapahtuvien I :den lukumäärät eivät riipu toisistaan. Toisin sanoen:

- (iii) Jos $0 \leq s_1 < t_1 < s_2 < t_2$, niin satunnaismuuttujat $N(t_1) - N(s_1)$ ja $N(t_2) - N(s_2)$ ovat riippumattomat.

Kysymme nyt, voidaanko esimerkkimme laskentaprosesseja pitää riippumattomien lisäysten prosesseina.

- (a) Voidaan tiettyjä erikoistilanteita (tehtävä 28) lukuun ottamatta.
- (b) Voidaan lyhyehköllä aikavälillä mutta ei pitkällä. Nimittäin syntyneiden lasten lukumäärä vaikuttaa syntyvien lasten lukumäärään, kun nämä lapset saavat lapsia.
- (c) Voidaan, ellei pelaajan maalintekoon vaikuta hänen aiempi menestyksensä.

Laskentaprosessi N on *stationaaristen lisäysten prosessi*, jos tietyllä aikavälillä sattuvien I :den lukumäärän jakauma riippuu vain aikavälin pituudesta. Toisin sanoen:

- (iv) Jos $s \geq 0$ ja $t > 0$, niin satunnaismuuttujan $N(t + s) - N(s)$ jakauma riippuu vain t :stä eikä siis s :stä.

Kysymme, onko esimerkkiemme prosesseilla tämä ominaisuus.

- (a) On (tiettyjä erikoistilanteita lukuun ottamatta), jos asiakkaiden halukkuus ostoksille ei riipu päivästä.
- (b) Saattaa olla lyhyehkällä aikavälillä mutta ei pitkällä, koska maapallon väkiluvun kasvaessa myös väestönkasvu kasvaa.
- (c) On, jos pelaajan mahdollisuus menestyä eri otteluissa on suunnilleen sama. Näin voitaneen olettaa lyhyehkällä aikavälillä. Sen sijaan pitkällä aikavälillä tätä oletusta ei yleensä voitane tehdä, koska pelaajan uraan kuuluneet sekä hyviä että huonoja kausia. Ks. myös tehtävä 30.

[99]

Riippumattomien lisäysten prosessi N on *Poissonin prosessi*, jonka *kasvukerroin* on λ ,

- (v) jos $N(0) = 0$ ja jokaisella t :n pituisella aikavälillä sattuvien I :den lukumäärä noudattaa Poissonin jakaumaa parametrilla λt . Toisin sanoen:

- (vi) Jos $s \geq 0$ ja $t > 0$, niin kaikilla $n = 0, 1, 2, \dots$ on

$$P(N(t + s) - N(s) = n) = e^{-\lambda t} \frac{(\lambda t)^n}{n!}.$$

Selvästi N on stationaaristen lisäysten prosessi. Sijoittamalla $s = 0$ saamme

$$p_n(t) = P(N(t) = n) = e^{-\lambda t} \frac{(\lambda t)^n}{n!}.$$

Satunnaismuuttuja $N(t)$ noudattaa siis Poissonin jakaumaa parametrilla λt , joten sen odotusarvo $E(N(t)) = \lambda t$ ja myös varianssi $D^2(N(t)) = \lambda t$.

Olkoon $\lambda > 0$. Voidaan todistaa (ks. esim. [25]), että kasvukertoimen λ omaava Poissonin prosessi on ainoa sellainen riippumattomien ja stationaaristen lisäysten prosessi, jolle $N(0) = 0$ ja kaikilla $h > 0$

$$(vii) \quad P(N(h) = 1) = \lambda h + o(h), \quad p(N(h) \geq 2) = o(h).$$

Tässä o on jokin sellainen funktio, jolle

$$\lim_{h \rightarrow 0^+} \frac{o(h)}{h} = 0.$$

Havainnollisesti tämä tarkoittaa, että h :n ollessa ”pieni” on

$$P(N(h) = 1) \approx \lambda h, \quad P(N(h) \geq 2) \approx 0.$$

Todennäköisyys sille, että I tapahtuu tietyllä ”pienellä” aikavälillä, on siis verrannollinen välin pituuteen, eikä I voi silloin tapahtua useammin kuin kerran.

[100]

Määrittelimme Poissonin prosessin ehdoilla (v), (ii), (iii) ja (vi) (jolloin (iv) on automaattisesti voimassa). Huomasimme edellä, että yhtäpitävä luonnehdinta on (v), (ii), (iii), (iv) ja (vii).

Olkoon nyt X_n satunnaismuuttuja, joka ilmoittaa, milloin I tapahtuu n :nnen kerran. Edelleen olkoon T_n satunnaismuuttuja, joka ilmoittaa I :n ($n-1$):nnen ja n :nen tapahtumisen välisen ajan. Siis $T_n = X_n - X_{n-1}$ ($X_0 = 0$).

Voidaan todistaa (ks. esim. [25]), että Poissonin prosessin *väliajat* T_1, T_2, \dots ovat riippumattomia ja noudattavat eksponenttijakaumaa parametrilla λ . Siis $P(T_n \leq t) = 1 - e^{-\lambda t}$, $P(T_n > t) = e^{-\lambda t}$, odotusarvo $E(T_n) = 1/\lambda$ ja varianssi $D^2(T_n) = 1/\lambda^2$.

ESIMERKKI 5.3

Autokauppias myy keskimäärin kolme autoa kahdessa päivässä.

- Millä todennäköisyydellä hän myy kolmessa päivässä (täsmälleen) neljä autoa?
- Millä todennäköisyydellä viidennen ja kuudennen kaupan väli ylittää kaksi päivää?
- Missä ajassa hän keskimäärin myy yhdeksän autoa?

Mallinamme kaupantekoa Poissonin prosessilla $N = \{N(t) \mid t \geq 0\}$, missä satunnaismuuttujan $N(t)$ arvo on t :ssä päivässä myytyjen autojen lukumäärä. Jos N :n kasvukerroin on λ , niin $E(N(t)) = \lambda t$. Koska $E(N(2)) = 3$, on $\lambda = \frac{3}{2}$.

(a) Kysytty todennäköisyys on

$$p_4(3) = e^{-\frac{3}{2} \cdot 3} \frac{(\frac{3}{2} \cdot 3)^4}{4!} \approx 0,2.$$

(b) Kysytty todennäköisyys on

$$P(T_6 > 2) = e^{-\frac{3}{2} \cdot 2} \approx 0,05.$$

(c) Satunnaismuuttujalle X_n voidaan johtaa jakauma, mutta siihen perustuva ratkaisu on liian mutkikas. Helpompi on huomata, että yleisesti $X_n = T_1 + T_2 + \dots + T_n$, joten

$$E(X_n) = E(T_1 + T_2 + \dots + T_n) = E(T_1) + E(T_2) + \dots + E(T_n) = n \frac{1}{\lambda} = \frac{n}{\lambda}.$$

[101]

Kysytty aika (päivinä) on siis

$$E(X_9) = \frac{9}{\frac{3}{2}} = 6.$$

Harjoitustehtäviä

28. Olkoon satunnaismuuttuja $N(t)$ tiettyyn kauppaan t :ssä päivässä tulleiden asiakkaiden lukumäärä. Anna esimerkki tapauksesta, jossa stokastista prosessia $\{N(t) \mid t \geq 0\}$ ei voida pitää riippumattomien lisäysten prosessina.
29. Anna esimerkki stokastisesta prosessista, joka on (a) riippumattomien mutta ei stationaaristen, (b) stationaaristen mutta ei riippumattomien lisäysten prosessi.
30. Tarkastellaan stokastista prosessia $N = \{N(t) \mid t \geq 0\}$, missä $N(t)$ on tietyn jalkapalloilijan t :ssä ottelussa tekemien maalien lukumäärä. Tuntuu luonnolliselta ajatella, että kaikkien vastustajien täytyy olla suunnilleen samantasoisia, jotta N :ää

voitaisiin pitää stationaaristen lisäysten prosessina. Kuitenkin N :n pitämistä tällaisena prosessina voidaan perustella myös vastustajien ollessa eritasoisia. Miten?

31. Eemeli on ongella. Olkoon satunnaismuuttuja $N(t)$ hänen ajanhetkeen t mennessä saamiensa kalojen lukumäärä. Onko (mahdollisesti tarpeellisten lisäoletusten vallitessa) stokastinen prosessi $\{N(t) \mid t \geq 0\}$ (a) laskentaprosessi, (b) riippumattomien lisäysten prosessi, (c) stationaaristen lisäysten prosessi, (d) Poissonin prosessi?
32. Kauppaan tulee miesasiakkaita kasvukertoimen α ja naisasiakkaita kasvukertoimen β omaavan Poissonin prosessin mukaisesti. Nämä prosessit oletetaan toisistaan riippumattomiksi.
- (a) Millä todennäköisyydellä kauppaan ei aikana T tule yhtään (i) miestä, (ii) naista, (iii) miestä eikä naista?
- (b) Mikä on kaikkien asiakkaiden saapumista kuvaavan Poissonin prosessin kasvukerroin?
- (c) Millä todennäköisyydellä kauppaan seuraavaksi tuleva asiakas on (i) mies, (ii) nainen?
- (d) Mikä on sen ajan odotusarvo, jonka kuluttua sinne saapuu k :s asiakas?
33. Omistat kaupungin A rautatieasemalla lehtikioskin, joka on auki kello 10–20. Siellä myydään mm. A :n *sanomia*, joita ostat kustantajalta 1 eurolla kappale ja myyt 1,50 eurolla. Niiden päivittäinen menekki on keskimäärin 40.
- (a) Milloin ensimmäinen asiakas keskimäärin ostaa lehden?
- (b) Kuinka monta lehteä olet keskimäärin myynyt kello 16 mennessä?
- (c) Kuinka monta lehteä ostat kustantajalta päivittäin, kun et voi palauttaa myymättä jääneitä lehtiä?
- (d) Mitä täytyy olettaa, jotta tämä tehtävä voitaisiin käsitellä siinä olevilla tiedoilla?

34. (Lähde: [27].) Jääkiekkoilija Wayne Gretzky teki vuosina 1979–1988 Edmonton Oilersissa pelaamassaan 696 NHL:n sarjapelissä kaikkiaan 1669 pistettä. Olkoon satunnaismuuttuja $N(t)$ hänen tietyssä ottelussa tekemiensä pisteiden (eli maalien ja maalisyöttöjen) lukumäärä, kun peliaikaa (kaikkiaan, ei siis Gretzky'n kentällä oloaikaa) on kulunut t minuuttia. Saadaan siis stokastinen prosessi $N = \{N(t) \mid 0 \leq t \leq 60\}$.

- (a) Mitä täytyy olettaa, jotta N :n tarkastelu olisi mielekäästä?
- (b) Pidetään N :ää Poissonin prosessina. Laske (tai oikeastaan estimoi) sen kasvukerroin.
- (c) Laske saadusta mallista todennäköisyydet p_0, p_1, \dots, p_9 , kun p_n on todennäköisyys sille, että Gretzky tekee tietyssä ottelussa täsmälleen n pistettä.
- (d) Ennusta tällä perusteella, kuinka monessa ottelussa hänen pistemääränsä oli $0, 1, 2, \dots, 9$.
- (e) Tutki mallin hyvyttä vertaamalla saamaasi jakaumaa alla olevaan oikeaan jakaumaan.

[103]

<i>Pisteitä</i>	<i>Otteluita</i>
0	69
1	155
2	171
3	143
4	79
5	57
6	14
7	6
8	2

- (f) Kun Gretzky tekee pisteen, kuinka pitkän ajan kuluttua hän keskimäärin tekee seuraavan pisteensä (tämän mallin mukaan)?

(g) Olkoon d edellisen kohdan vastaus. Kuvitellaan, että Oilersin valmentaja on opiskellut matemaattista mallinusta ja haluaa soveltaa oppejaan käytäntöön. Gretzky on juuri tehnyt pisteen. Valmentaja ajattelee: ”Minun täytyy nyt pitää huoli siitä, että Gretzky on kentällä d :n minuutin kuluttua, koska hän on silloin parhaimmillaan”. Mitä mieltä olet tästä suunnitelmasta?

(h) Jos Poissonin prosessi sopii mallintamaan jääkiekkoilijan pisteitä, millainen pelaaja hän on?

35. Haluat ajaa tietyllä suoralla maantiellä sellaista tasaista nopeutta, että mahdollisimman harvoin joudut ohittamaan tai sinut ohitetaan. Miten menettelet? Sinulla on mahdollisuus tehdä etukäteen havaintoja muista tiellä liikkujista. (Ohje: [25, esim. 5.15].)

36. Chew ja Greenspun [5] tutkivat MIT:n (Massachusetts Institute of Technology) opiskelijoiden itsemurhia vuosina 1964–1991. Niiden tapahtumapäivät (tai pelkät kuukaudet, jos päivä ei ollut tutkijoiden tiedossa) olivat

8.10.1964, ?.11.1964, 17.10.1965, 17.3.1966, 4.6.1967, 19.10.1969,
 ?.7.1970, 19.3.1973, ?.4.1973, ?.5.1973, 24.5.1973, 26.7.1974,
 27.7.1975, 12.12.1975, 2.2.1976, 16.10.1977, 3.4.1978, 8.2.1983,
 30.11.1983, 21.6.1984, 18.5.1986, 4.10.1986, 20.10.1986, 2.10.1987,
 3.10.1987, 22.10.1987, 8.4.1988, ?.4.1988, ?.6.1988, ?.6.1988,
 ?.10.1990, ?.6.1991, ?.6.1991.

He tekivät tällä perusteella seuraavat hypoteesit. (Suluissa on tämän luvun kirjoittajan kommentteja.)

(1) Näitä itsemurhia voidaan mallintaa Poissonin prosessina.

(2) Pitkän itsemurhattoman kauden jälkeen ensimmäinen itsemurha voidaan mallintaa Poissonin prosessina, mutta sen tapahtuminen lisää itsemurhan riskiä seuraavan noin kolmen kuukauden aikana, minkä kuluttua alkuperäinen

malli taas alkaa toimia. (Siis hypoteesin 1 kanssa ristiriitainen hypoteesi.)

- (3) Nixonin presidenttikautena 1969–1974 ja Reaganin kautena 1981–1989 itsemurhan vaara oli suurempi kuin muulloin.
- (4) Tenttikaudet lukukausien puolivälissä ja lopussa ovat muita vaarallisempia aikoja.
- (5) Itsemurhat voidaan kylläkin mallintaa Poissonin prosessina, mutta sen kasvukerroin kasvaa ajan mukana. (Siis kyseessä onkin *epähomogeeninen* Poissonin prosessi, jossa λ riippuu t :stä.)
- (6) Huumeet ja hippiaate estävät itsemurhia (!), koska niitä oli vähän hippyyden kulta-aikana 1967–1972.
 - (a) Kommentoi näitä hypoteeseja.
 - (b) Sen jälkeen katso lähteestä [5] tutkijoiden tekemät johtopäätökset.
 - (c) Oletko heidän kanssaan samaa mieltä?

[105]

5.3 Mallinnuksen pehmeät menetelmät

Mallinnuksen *pehmeisiin menetelmiin* (engl. *Soft Computing*) luetaan yleensä sumean logiikka, neurolaskenta, geneettiset algoritmit ja probabilistinen päättely, usein myös tiedonlouhinta ja kaaosteoria. Päinvastoin kuin perinteiset 'kovat menetelmät' nämä mallinnuksen uudet lähestymistavat sallivat epätäsmällisen ja epätäydellisen tiedon ja osittaisen totuuden. Metodologisesti pehmeiden menetelmien eri lähestymistavat eivät ole kovinkaan lähellä toisiaan. Niille kaikille on kuitenkin tyypillistä, että ne ovat syntyneet viimeisten 30–50 vuoden aikana (Bayesin kaava tosin jo vuonna 1763 ja Lukasiewiczin moniarvologiikka vuonna 1920), ja että ne tuskin olisivat kehittyneet nykyiseen mittaansa ilman tietokoneiden laskentakapasiteetin huomattavaa kasvua.

Pehmeille menetelmille on tyypillistä, että monet niistä ovat saaneet inspiraationsa elävistä organismeista: neuroverkot jäljittelevät aivojen toimintaa, geneettisten algoritmien toimintaperiaate jäljittelee kehitysevoluutiota,

jossa ominaisuudet siirtyvät risteytysten kautta vanhemmista jälkeläisiin ja jossa tapahtuu satunnaisia mutaatioita, ja sumean logiikassa tavoitteena on mallintaa luonnollisen kielen avulla tapahtuvaa asiantuntijan päättelyä.

Pehmeät menetelmät eivät vielä ole saavuttaneet samanlaista kanonista esitysmuotoa kuin klassiset matemaattiset teoriat, esimerkiksi osittaisdifferentiaaliyhtälöiden teoria tai tilastotiede. Perustutkimus tällä saralla on kesken ja kirjallisuudessa esiintyy samoille käsitteille toisistaan poikkeavia määritelmiä ja monet perusteita koskevat kysymykset ovat ratkaisematta. Tässä luvussa tarkastelemme lähemmin GUHA-tiedonlouhintamenetelmää, neurolaskentaa, geneettisiä algoritmeja ja sumean logiikkaa.

Vuonna 1966 Hájek, Havel ja Chytil julkaisivat artikkelin *The GUHA method of automatic hypotheses determination*, jossa esitellään yksi vanhimmista tiedonlouhintamenetelmistä. Kun tilastollisessa hypoteesin testauksessa verifoidaan annettuja hypoteeseja sitä varten erityisesti kerätyssä dataassa, tiedonlouhinnassa taas lähtökohtana on mikä tahansa data – yleensä äärellinen matriisi – ja halutaan selvittää, tukeeko tämä data jotakin erityistä riippuvuutta tai samanaikaista esiintymistä, tai onko datan joukossa tapauksia, jotka poikkeavat huomattavan paljon muista jne. GUHA-menetelmä perustuu ensimmäisen kertaluvun logiikkaan, jonka formaalissa kielessä on kvanttorien \forall ja \exists lisäksi epästandardeja kvanttoreita. Näillä voidaan kätevästi mallintaa muun muassa epätäydellistä implikaatiota tai ekvivalenssia, osittaista samanaikaista esiintymistä ja keskimääräistä yleisempää tai harvinaisempaa riippuvuutta. LISpMiner-ohjelma louhii tietoa annetusta datamatriisista GUHA-teorian mukaisesti.

[106]

Neurolaskennan katsotaan saaneen alkunsa McCullochin ja Pittsin neuronimallista, joka julkaistiin vuonna 1943 artikkelissa *A Logical calculus of the ideas immanent in nervous activity*. Myös neurolaskennan lähtökohtana on data; neuroverkko voidaan opettaa yhdistämään annettu syöte haluttuun vasteeseen. Opettaminen voi olla ohjattua tai itseohjautuvaa.

Geneettisten algoritmien syntymävuosi on 1975, jolloin Holland julkaisi tutkimuksensa *Adaptation in Natural and Artificial Systems*, tosin jo vuonna 1962 Fogel esitti samansuuntaisia ajatuksia paperissaan *Autonomous Automata*. Geneettiset algoritmit etsivät annettuun ongelmaan globaalisti parasta ratkaisua. Erilaiset ratkaisut muodostavat populaation, jota voidaan risteyttää. Ne jälkeläisistä, joilla on parhaat toivotut ominaisuudet, selviytyvät jatkoon ja muut karsiutuvat. Mutaatioiden avulla ratkaisupopulaatioon tulee satunnaisvaihtelua. Näin edetään kohti ongelman todennäköisesti parasta ratkaisua.

Vuonna 1965 Zadeh julkaisi artikkelin *Fuzzy Sets*, sumeat joukot, joka merkitsi lähtölaukausta sumeiden ilmiöiden tutkimiseen ja mallintamiseen. Kantavana ajatuksena sumean logiikassa on, että maailma ei ole mustavalkoinen vaan täynnä spektrin värejä, moniarvoisuutta ja osittaisia totuuksia. Sumeus eroaa todennäköisyydestä: jos tiedämme, että luokan 30 oppilaan

joukossa on kaksi punatukkaista, voimme laskea todennäköisyyden, jolla satunnaisesti muodostettu viiden oppilaan joukko sisältää täsmälleen yhden punatukkaisen oppilaan. Tällöin ajattelemme, että punatukkaisuus on joko-tai-ominaisuus. Jos tarkastelemme oppilaita tarkemmin, huomaamme että punatukkaisuudessakin on aste-eroja kirkuvan punaisista miedosti hennattuihin ja ei lainkaan punatukkaisiin. Näin tehdessämme olemme siirtyneet sumean logiikan puolelle. Sumean logiikan kovana ytimenä on matemaattisesti hyvin määritelty moniarvologiikka, josta nykyään käytetään nimeä *matemaattinen sumean logiikka*, ja johon jatkossa tutustumme tarkemmin.

5.3.1 GUHA-tiedonlouhintamenetelmä

Määritelmän¹ mukaan *Knowledge discovery in databases* (KDD) on triviaali prosessi etsiä valideja, uusia, ehkä hyödyllisiä ja ennen kaikkea ymmärrettäviä piirteitä eli hahmoja datasta². Tiedonlouhinta on se askel KDD-prosessissa, joka hyödyntää tietokoneilla toteutettuja tiedonlouhinta-algoritmeja näiden hahmojen tai piirteiden löytämiseksi. Siten tiedonlouhinta on KDD-prosessin keskiössä. KDD-prosessin muut askeleet ovat datan valmistelu louhittavaan muotoon sekä löydettyjen piirteiden eli tulosten tarkempi analysointi. Erilaiset olemassa olevat tiedonlouhintamenetelmät perustuvat yleensä tilastotieteeseen, heuristisiin tekniikoihin ja logiikkaan. Yksi vanhimmista tiedonlouhintamenetelmistä on *GUHA (General Unary Hypotheses Automaton)*, jonka avulla voidaan muun muassa löytää isoissa tietomassoissa olevia yleisiä lainalaisuuksia tai pieniä osajoukkoja koskevia riippuvuuksia, joita on hankalaa tai mahdotonta löytää perinteisillä menetelmillä. GUHA-menetelmän perustana on ensimmäisen kertaluvun äärellismallinen logiikka, jonka kieli sisältää epästandardeja kvanttoireita. GUHA-menetelmä on implementoitu LISPMiner-ohjelmistoksi, jonka voi ladata ilmaiseksi osoitteesta <http://lispminer.vse.cz>.³

Tarkastellaan asiaan johdattelevana esimerkkinä kuvitteellista dataa, joka on saatu keräämällä havaintoja päiväkodin allergisista lapsista (taulukko 5.1). Datassa on 15 *vaakariviä*, yksi jokaista lasta kohti, ja 5 *pystyriiviä* vastaten kutakin allergiaa. Merkkien 0/1 merkitys vaaka- ja pystyriivien risteyskohdissa on ilmeinen; esimerkiksi Oskar on allerginen omenalle, appelsiinille ja maidolle, mutta ei ole allerginen tomaatille eikä juustolle. Symbolisesti asia voidaan ilmaista kirjoittamalla tomaatti(Oskar) = 0, omena(Oskar) = 1 jne., jolloin tomaatti(), omena() jne., ovat *predikaatteja* (tai *attribuutteja*) ja Oskar on *variaabeli* (eli *muuttuja*).

1 Fayyad, Piatetsky-Shapiro, Smyth, 1996.

2 Datalla tarkoitetaan tässä $m \times n$ -matriisia, jonka soluissa voi olla mitä tahansa symboleja.

3 Tätä kurssia varten riittää *4ft-Minerin* lataaminen.

Taulukko 5.1. Havainnot päiväkodin allergisista lapsista.

Lapsi	Tomaatti	Omena	Appelsiini	Juusto	Maito
Roza	1	1	0	1	1
Olga	1	1	1	0	0
Suvi	1	1	1	1	1
Oskar	0	1	1	0	1
Silva	0	1	0	1	1
Roni	1	1	0	0	1
Toni	0	1	1	1	1
Aku	1	0	0	0	0
Meri	1	1	0	1	1
Pete	1	0	1	0	0
Miko	1	0	1	0	1
Jouni	0	1	1	0	1
Raisa	0	1	0	1	1
Elsa	1	1	0	0	1
Siiri	0	1	1	1	1

[108]

Data tukee väitettä 'Jokainen lapsi, joka on allerginen juustolle, on allerginen myös maidolle'. Tämä voidaan ilmaista klassisen predikaattilogiikan keinoin lauseena $\forall x(\text{juusto}(x) \Rightarrow \text{maito}(x))$. Sen sijaan data ei tue väitettä $\forall x(\text{maito}(x) \Rightarrow \text{juusto}(x))$, sillä esimerkiksi $\text{maito}(\text{Roni}) = 1$, mutta $\text{juusto}(\text{Roni}) = 0$. Data tukee myös väitettä 'Useimmat appelsiinille allergiset lapset ovat allergisia myös omenalle'. Tämä lause ei ole ilmaista tavallisen predikaattilogiikan keinoin, sillä se sisältää epästandardin kvanttorin 'useimmat'.

Tilannetta kuvaa seuraava nelikenttä

	omena	ei omena	Σ
appelsiini	6	2	8
ei appelsiini	6	1	7
Σ	12	3	15

Appelsiiniallergiaa potevia lapsia on kaikkiaan kahdeksan, joista vain kahdella ei ole omena-allergiaa. Epästandardit kvanttorit ja nelikentät ovat GUHA-menetelmän ja LISpMiner-ohjelmiston keskeisiä käsitteitä. Seuraavat määritelmät on esitetty yksinkertaisimmassa mahdollisessa muodossa (täydellinen esitys, ks. [13]).

MÄÄRITELMÄ 5.1

Havaintopredikaattikieli L_n koostuu

- (i) (unaarisista) predikaateista P_1, \dots, P_n ja äärettömästä jonosta x_1, x_2, \dots muuttujia (l variaabeleja),
- (ii) loogisista konnektiiveista \wedge (konjunktio, ja), \vee (disjunktio, tai), \rightarrow (implikaatio), \neg (negaatio) ja \leftrightarrow (ekvivalenssi),
- (iii) klassisista (unaarisista) kvanttoreista \forall (kaikilla) ja \exists (on olemassa),
- (iv) epästandardeista (binäärisistä) kvanttoreista⁴ Q_1, \dots, Q_b jotka määritellään erikseen.

Annetun havaintopredikaattikielen L_n atomikaavat (\neg -formulat) ovat symbolit $P(x)$, missä P on predikaatti ja x on variaabeli. Atomikaavat ovat kaavoja (formuloita) ja jos φ, ψ ovat kaavoja, niin

$$\neg\varphi, \quad \varphi \wedge \psi, \quad \psi \rightarrow \varphi, \quad \psi \leftrightarrow \varphi, \quad \forall x\varphi(x), \quad \exists\varphi(x) \quad \text{ja} \quad Qx(\varphi(x), \psi(x))$$

[109]

ovat kaavoja. *Vapaat* ja *sidotut muuttujat* määritellään kuten klassisessa predikaattilogiikassa. Kaavat, jotka sisältävät vapaan muuttujan, ovat *avoimia kaavoja*, *suljetut kaavat* eli *lauseet* eivät sisällä vapaata muuttujaa. Tiedonlouhinnan kannalta mielenkiintoisia ovat muotoa $Qx(\varphi(x), \psi(x))$ olevat lauseet, joissa Q on epästandardi kvanttori ja kaavat $\varphi(x)$ ja $\psi(x)$ ovat eri atomikaavoja tai muodostettu eri atomikaavoista \wedge -konnektiivin avulla; keskitymme jatkossa niihin.

Esimerkiksi allergisia lapsia kuvaava havaintopredikaattikieli L_5 sisältää 5 predikaattia, ja siinä voidaan määritellä epästandardi kvanttori Q (*useimmiten*). Lause $Qx(\text{appelsiini}(x) \wedge \text{maito}(x), \text{omena}(x))$ on silloin tämän kielen lause, joka voidaan lukea 'Useimmiten lapsilla, joilla on appelsiini- ja maitoallergia on myös omena-allergia'.

Predikaattilogiikan peruskäsitteisiin kuuluvat käsitteet *malli* M ja *kaavan* φ *totuus mallissa* M . GUHA-logiikassa kiinnitetyn havaintopredikaattikielen L_n *malli* on jokainen $m \times n$ -matriisi M ($m > 0$), jonka jokaisessa solussa on symboli 0 tai 1⁵. Matriisin M i . pystyrivi ($i = 1, \dots, n$) vastaa predikaattia P_i ja j . vaakarivi muuttujaa x_j . Jos i . pystyrivin ja j . vaakarivin risteyskohdassa on symboli 1, sanotaan, että atomiformula $P_i(x_j)$ on tosi

4 Myös nimeä *yleistetty kvanttori* (engl. Generalized quantifier) voidaan käyttää.

5 GUHA-teorian laajemmassa määritelmässä ja LISpMiner-ohjelmistossa solu voi olla myös tyhjä.

mallissa M , merkitään $v_M(P_i(x_j)) = \text{TOSI}$. Jos risteyskohdassa on symboli 0, $P_i(x_j)$ on epätosi mallissa M , merkitään $v_M(P_i(x_j)) = \text{EPÄTOSI}$. Laajennetaan seuraavaksi totuus mallissa M koskemaan kaikkia havainto-predikaattikielen L_n formuloita. Jos formula ei sisällä epästandardeja kvanttoreita, palautuu totuusarvon TOSI/EPÄTOSI määritelmä klassiseen predikaattilogiikkaan (harjoitustehtävänä). Epästandardin kvanttorin Q sisältämän lauseen $Qx(\varphi(x), \psi(x))$ totuusarvon (mallissa M) määräämiseksi tarvitaan nelikenttä

M	ψ	$\neg\psi$	Σ
φ	a	b	$r = a + b$
$\neg\varphi$	c	d	$s = c + d$
Σ	$k = a + c$	$l = b + d$	$m = a + b + c + d$

jossa

- a on niiden tapausten lukumäärä, joissa $v_M(\varphi(x_j)) = v_M(\psi(x_j)) = \text{TOSI}$,
- b on niiden tapausten lukumäärä, joissa $v_M(\varphi(x_j)) = v_M(\neg\psi(x_j)) = \text{TOSI}$,
- c on niiden tapausten lukumäärä, joissa $v_M(\neg\varphi(x_j)) = v_M(\psi(x_j)) = \text{TOSI}$,
- d on niiden tapausten lukumäärä, joissa $v_M(\neg\varphi(x_j)) = v_M(\neg\psi(x_j)) = \text{TOSI}$.

[110]

Kuten klassisessa logiikassa, myös GUHA-logiikassa voidaan puhua *tautologioista* eli kaavoista, jotka ovat tosia kaikissa malleissa. Samoin voidaan määritellä *päätelysääntö* ja *metatodistus* sekä todistaa GUHA-logiikan *täydellisyys* eli että todistuvat lauseet ja vain ne ovat tautologioita. GUHA-metodin teoreettisena perustana on pitkälle kehitetty looginen koneisto, jonka tuloksia käytetään LISPMiner-ohjelmistossa. Ohjelmiston käyttäjälle riittää kuitenkin tietää muotoa $Qx(\varphi(x), \psi(x))$ olevien lauseiden totuuden määräytyminen annetun datan määräämässä mallissa.

Datasta malliksi

Louhittavan datan ei tarvitse olla 0/1-muotoista; soluissa voi olla kokonaislukuja, liukulukuja, nimiä tai muita symboleja, jolloin käyttäjän on valmisteltava data louhittavaan muotoon. LISPMiner-ohjelmistossa tämä tapahtuu automaattisesti käyttäjän antamien käskyjen mukaisesti ja mah-

dollisuuksia on monia. Tarkastellaan esimerkkinä seuraavaa yksinkertaista dataa (taulukko 5.2). Tässä henkilöt ovat muuttujia, ainoana predikaattina on ikä. Käyttäjä voi esimerkiksi päättää, että jokainen ikä on oma kategoriansa, jolloin ikää vastaa viisi kategoriaa, tai että kategorioita on kolme – alle 20-vuotiaat, 20 muttei 50 täyttäneet, ja 50 täyttäneet – tai tehdä jonkin muun jaon. LISpMiner-ohjelmistossa louhittava data muuttuu silloin automaattisesti 0/1-matriiseiksi, jotka on esitetty taulukoissa 5.3 ja 5.4.

Taulukko 5.2

<i>Henkilö</i>	<i>Ikä</i>
A	18
B	20
C	35
D	15
E	50

Taulukko 5.3

[111]

<i>Henkilö</i>	<i>Ikä(15)</i>	<i>Ikä(18)</i>	<i>Ikä(20)</i>	<i>Ikä(35)</i>	<i>Ikä(50)</i>
A	0	1	0	0	0
B	0	0	1	0	0
C	0	0	0	1	0
D	1	0	0	0	0
E	0	0	0	0	1

Taulukko 5.4

<i>Henkilö</i>	<i>Ikä(20 <)</i>	<i>Ikä(20–49)</i>	<i>Ikä(49 <)</i>
A	1	0	0
B	0	1	0
C	0	1	0
D	1	0	0
E	0	0	1

Mallista nelikentiksi

Käytännön tiedonlouhintatehtävässä etsitään muotoa $Qx(\varphi(x), \psi(x))$ olevia tosia lauseita. Tätä varten käyttäjän on päätettävä muun muassa

- kuinka monta \wedge -konnektiivilla yhdistettyä predikaattia otetaan lauseen *etuosaan* eli kaavaksi $\varphi(x)$, jos predikaatteja on kaikkiaan n kpl, voidaan valita enintään k kpl, jossa $0 < k < n$. Valinta voi olla täsmälleen k kpl tai arvot väliltä k_1, \dots, k_2 , jossa $0 < k_1 < k_2 < n$.
- kuinka monta \wedge -konnektiivilla yhdistettyä predikaattia otetaan lauseen *takaosaan* eli kaavaksi $y(x)$. Kun k on kiinnitetty, voi valinta t olla enintään $n - k$ predikaattia. Siten jokainen predikaatti voidaan valita vain joko lauseen etuosaan tai takaosaan mutta ei molempiin tai jättää kokonaan valitsematta.

Näiden valintojen perusteella LISpMiner-ohjelmisto muodostaa kaikki mahdolliset nelikentät.

[112]

Epästandardin kvanttorin valinta

Käyttäjä valitsee epästandardin kvanttorin Q . LISpMiner-ohjelmistossa on tätä kirjoitettaessa 12 mahdollisuutta, yksinkertaisin niistä on *perusimplikaatio*⁶ $\Rightarrow_{p, Base}$ joka vastaa klassista assosiaatiosääntöä. Arvot $p \in (0, 1]$ ja $Base \in \{1, \dots, m\}$ määrää käyttäjä. Lause $\Rightarrow_{p, Base}(\varphi(x), \psi(x))$ on tosi mallissa M eli $v_M(\Rightarrow_{p, Base}(\varphi(x), \psi(x))) = \text{TOSI}$, jos

$$\frac{a}{a+b} \geq p \quad \text{ja} \quad a \geq Base.$$

Tämä merkitsee, että vain ne datan muuttujista x , joilla on ominaisuus φ (eli $v_M(\varphi(x)) = \text{TOSI}$) ovat merkitseviä, ja että kyseisiä muuttujia on ainakin arvon $Base$ verran koko tutkittavassa datassa, ja että ainakin $100p$ prosentilla näistä muuttujista on myös ominaisuus ψ (eli $v_M(\psi(x)) = \text{TOSI}$). Kun p on lähellä arvoa 1, voidaan jossakin käyttäjän määräämässä intuitiivisessa mielessä sanoa lauseen merkitsevän, että '*lähes kaikilla muuttujilla x , joilla on ominaisuus φ on myös ominaisuus ψ* '.

Kun syötteenä oleva data on annettu, tuottaa LISpMiner-ohjelmisto vasteena kaikki mahdollisesti mielenkiintoiset⁷ annetuilla ehdoilla määräyty-

6 Myös nimeä *tosiasioihin perustuva implikaatio* käytetään.

7 Dilemmaa *kaikki* eli mahdollisimman monta ja *mahdollisesti mielenkiintoiset* eli ei liian monta on GUHA-menetelmässä ratkaistu mm. siten, että vasteena tulostetaan pituudeltaan kompakteimmat lauseet.

vät todet lauseet. Jos vasteena on lause $Qx(\varphi(x), \psi(x))$ sanotaan, että *data tukee riippuvuutta (lausetta) $Qx(\varphi(x), \psi(x))$* . Esimerkiksi lasten allergia-data tukee riippuvuutta $\Rightarrow_{0.7,5}(\text{appelsiini}(x), \text{omena}(x))$, mutta ei tue riippuvuutta $\Rightarrow_{0.7,5}(\text{tomaatti}(x) \cup \text{omena}(x), \text{juusto}(x))$, sillä jälkimmäistä lausetta vastaava nelikenttä

	juusto	$\neg(\text{juusto})$	Σ
tomaatti \wedge omena	3	3	6
$\neg(\text{tomaatti} \wedge \text{omena})$	4	5	9
Σ	7	8	15

ei toteuta kumpaakaan totuusehtoa:

$$\frac{a}{a+b} = \frac{3}{3+3} < 0.7, \quad \text{Base} = 3 < 5.$$

Keskeisiä epästandardeja kvanttoreita

Keskeisiä LISpMiner ohjelmaan implementoituja epästandardeja kvanttoireita⁸, joissa käyttäjä valitsee parametrit p ja $\text{Base} \in \{1, \dots, m\}$, ovat muun muassa

- *kaksoisperusimplikaatio*⁹ $\Leftrightarrow_{p, \text{Base}}$, $p \in (0, 1]$. Määritellään

$$v_M(\Leftrightarrow_{p, \text{Base}}(\varphi(x), \psi(x))) = \text{TOSI}, \quad \text{jos } \frac{a}{a+b+c} \geq p \text{ ja } a \geq \text{Base}.$$

Merkitseviä muuttujista x havaintoaineistossa ovat ne, joilla on ominaisuus φ tai $\varphi(v_M(\varphi(x))) = \text{TOSI}$ tai $v_M(\psi(x)) = \text{TOSI}$. Molemmat ehdot täyttäviä muuttujia on ainakin $100p$ prosenttia tässä joukossa, ja näitä molemmat ehdot toteuttavia muuttujia on ainakin arvon Base verran. Kun p on lähellä arvoa 1 voidaan lause tulkita siten, että *lähes kaikilla muuttujilla x , joilla on ominaisuus φ on myös ominaisuus ψ ja kääntäen, lähes kaikilla muuttujilla x , joilla on ominaisuus ψ on myös ominaisuus φ .*

⁸ Täydelliset määritelmät ovat verkosta ladattavassa LISpMiner-ohjelmiston manuaalissa.

⁹ Myös nimeä *tosiasioihin perustuva kaksoisimplikaatio* käytetään.

- *perusekvivalenssi*¹⁰ $\equiv_p, p \in (0, 1]$. Määritellään

$$v_M(\equiv_p (\varphi(x), \psi(x))) = \text{TOSI}, \quad \text{jos } \frac{a+d}{a+b+c+d} \geq p.$$

Kaikki muuttujat x ovat merkitseviä, ja ainakin $100p$ prosentilla muuttujista on joko ominaisuus φ ja ψ tai ei ole kumpakaan ominaisuutta. Kun p on lähellä arvoa 1 on perusteltua sanoa lauseen merkitsevän, että *'ominaisuudet φ ja ψ ovat loogisesti lähes ekvivalentit'*.

- keskiarvon yläpuolella -kvanttori¹¹ $\approx_p, p > 1$. Määritellään

$$v_M(\approx_p (\varphi(x), \psi(x))) = \text{TOSI}, \quad \text{jos } \frac{a}{a+b} \geq (1+p) \frac{a+c}{a+b+c+d}.$$

Kaikki muuttujat x ovat merkitseviä. Lause merkitsee, että *'siinä osajoukossa, jonka alkioilla on ominaisuus φ , on ominaisuus ψ $100p$ prosenttia yleisempi kuin se on koko havaintodatassa'*.

[114]

GUHA-menetelmällä voi toteuttaa myös monia tilastolliseen testaukseen perustuvia tiedonlouhintatehtäviä, muun muassa Fisherin testiin ja χ^2 -testiin perustuvat epästandardit kvanttorit on implementoitu LISpMiner-ohjelmistoon. Tulosten tulkinnessa kannattaa kuitenkin olla varovainen: LISpMiner ei varmista näiden hypoteesin testaukseen tarkoitettujen välineiden taustalla olevia oletuksia datan jakaumista, tapausten lukumäärästä jne. Kannattaa myös pitää mielessä, että GUHA-menetelmä – nimensä mukaisesti – tuottaa havaintodatan tukemia riippuvuuksia, mutta nämä riippuvuudet eivät välttämättä ole tilastollisesti merkitseviä. Parhaimmillaan GUHA-menetelmän tuottamat tulokset inspiroivat tutkijaa tarkempaan analyysiin tai auttavat tutkimuksen kohdentamisessa tai sumean JOS-NIIN-päätelykoneen rakentamisessa.

Harjoitustehtäviä

37. Kirjoita (a) totuustaulut (b) totuuden määritelmä \forall - ja \exists -kvanttoreille äärellisissä malleissa.

¹⁰ Tämä kvanttori tunnetaan myös nimellä *tosiasioihin perustuva ekvivalenssi*.

¹¹ LISpMiner-ohjelmassa on myös *keskiarvon alapuolella -kvanttori*.

38. Etsi allergiadatasta muotoa $Qx(\varphi(x), \psi(x))$ oleva tosi lause, kun epästandardina kvanttorigina Q on (a) perusimplikaatio, (b) kaksoisperusimplikaatio, (c) perusekvivalenssi ja (d) keskiarvon yläpuolella -kvanttori. Kuinka monta nelitalua allergiadatasta voi muodostaa (keskenään symmetriset voi samaistaa)?

5.3.2 Neuraalilaskenta

Neuraalilaskennan avulla voidaan mallintaa datan kuvausta syöteavaruudesta vasteavaruuteen. Neuroverkko pystyy opetusdatan avulla oppimaan approksimoimaan mielivaltaista kuvausta. Tämä kuvaus voi olla myös data-näytteiden kuvaus luokkiin. Tällöin on keskeistä, millaisia piirteitä datasta muodostetaan ennen varsinaista luokittelua.

Keinotekoinen neuroverkko koostuu yksinkertaisista adaptiivisista laskentayksiköistä, joita kutsutaan neuroneiksi [14]. Kytkemällä neuroneja toisiinsa muodostuu neuroverkko, jossa laskentaa voidaan suorittaa rinnakkain kerroksittain. Neuroverkkojen ominaisuuksista keskeisiä ovat epälineaarisuus, syöte-ulostulokuvaus ja adaptiivisuus. Epälineaarisuudet mahdollistavat epälineaaristen funktioiden ja prosessien kuvauksen. Nämä epälineaarisuudet ovat levittäytyneet koko verkkoon. Epälineaarisuudet vaikeuttavat verkkojen analysointia ja synnyttävät optimoitavaan funktioon lokaaleja minimejä. Neuraalilaskennan käyttäjien taustalla on vaikutusta siihen, miksi ja miten neuraalilaskentaa pyritään hyödyntämään. Neurobiologien tavoitteena on selvittää ihmisaivojen toimintaa keinotekoisien neuroverkkojen avulla, kun taas insinöörit käyttävät neuraalilaskentaa monimutkaisten ongelmien ratkaisuun.

Datan mallinnuksen kannalta neuroverkkojen tärkein ominaisuus on, että ne kykenevät oppimaan näytteistä, joko opettajan avulla tai ilman. Opittu informaatio tallennetaan synaptisiin painoihin, jotka ovat joko neuronien välisten kytkentöjen voimakkuuksia tai neuroneihin tallennettuja mallivektoreita. Ensimmäisessä tapauksessa on kyse myötäkylkyntäisestä (engl. feedforward) verkosta, joista tunnetuin on monikerrosperseptroni ja jälkimmäisessä kilpailuoppimiseen perustuvasta ohjaamattoman oppimisen menetelmästä kuten itseorganisoituvasta kartasta (engl. self-organizing map (SOM)) [19].

Ohjatussa oppimisessa syöte-vastekuvaus opitaan opetusdatasta. Tällöin käytettävissä on syötteitä vastaava haluttu vaste, joka voi olla luokittelutulos tai vektorimuotoinen vastesignaali. Neuroverkkoa opetettaessa käytetään yleensä jotain tilastollista kriteeriä, jonka perusteella verkon synaptisia painoja säädetään siten, että valittu kriteeri optimoituu. Tyypillisesti minimoidaan

neliöllisen virheen odotusarvoa ja haetaan optimia käyttäen hyväksi kriteerin negatiivisen gradientin suuntaa. Verkon synaptisia painoja tai sen vapaita parametreja voidaan aina opettaa uudestaan uudella datalla. Näin neuroverkko pystyy myös adaptoitumaan epästationäärisessä ympäristössä, kunhan muutokset ovat tarpeeksi hitaita.

Neuroni

Neuroverkoissa informaationkäsittelyn perusyksikkö on neuroni. Neuroni koostuu synapseista, summaimesta ja aktivaatiofunktioista sekä toisinaan mukana olevasta bias-termistä (5.6a). Synapseja eli yhdistäviä linkkejä kuvataan painoilla (voimakkuuksilla). Merkitään nyt x_j llä synapsin j syötesignaalia. Kun kytkeydytään neuroniin k , x_j kerrotaan synaptisella painolla w_{kj} . Painot ovat yleensä reaalilukuja. Summaimessa lasketaan yhteen painotetut syötteet $w_{kj}x_j$. Aktivaatiofunktioita käytetään neuronin vasteessa rajoittamassa sen arvoa. Se on yleensä epälineaarinen funktio, joka vaimentaa vastetta. Ulkoista bias-termiä merkitään b_k .

Neuronin k toimintaa voidaan kuvata seuraavilla yhtälöillä:

$$[116] \quad u_k = \sum_{j=1}^m w_{kj}x_j, \quad y_k = \varphi(u_k + b_k).$$

Tässä u_k on summaimen vaste, $\varphi(\cdot)$ on aktivaatiofunktio, y_k on neuronin vaste, x_1, x_2, \dots, x_m ovat m syötesignaalia, ja $w_{k1}, w_{k2}, \dots, w_{km}$ ovat vastaavat m synaptista painoa.

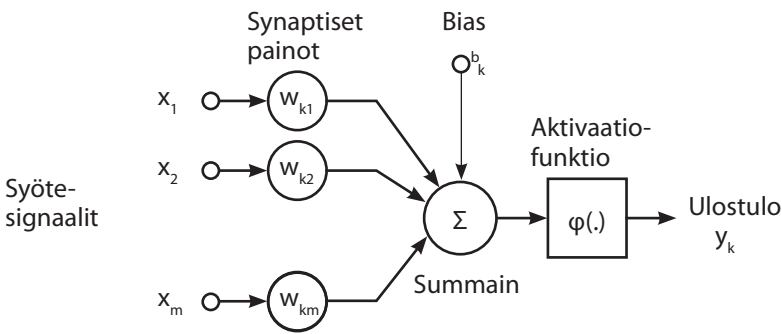
Neuroverkoissa käytetyistä epälineaarista aktivaatiofunktioista yleisimpiä ovat kynnysfunktio, paloittain lineaarinen funktio ja sigmoidi-funktio. Näistä sigmoidi-funktio on useimmiten käytetty aktivaatiofunktio. Kuvassa 5.6b on logistinen sigmoidi-funktio, joka määritellään $\phi(v) = \frac{1}{1+e^{-av}}$, jossa a on ns. kulmaparametri. Kun $a \rightarrow \infty$, logistinen sigmoidi lähestyy kynnysfunktioita. Sigmoidi-funktio on jatkuva ja sillä on lineaarinen ja epälineaarinen alue. Kun funktiota käytetään muodossa $\phi(v) = \tanh(av)$, niin aktivaatiofunktio voi saada myös negatiivisia arvoja.

Verkkoarkkitehtuureja

Edellä kuvatusta neuronista muodostuvia arkkitehtuureja on kolmea eri tyyppiä. Näitä ovat yksikerrosverkot, monikerrosverkot ja rekurrentit eli takaisinkytkennällä varustetut verkot. Muita verkkoarkkitehtuureja ovat esimerkiksi kilpailuoppimiseen perustuvat verkot, kuten itseorganisoituva kartta.

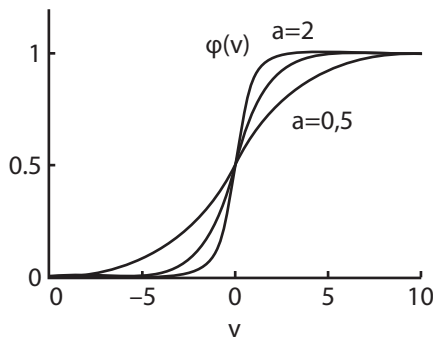
Neuroverkoista yksinkertaisin on yksikerrosverkko. Syöteyksiköille tulevat syötteet kuvataan laskentayksiköiden vastetasolle. Kuvassa 5.7a on yksikerrosverkko, jossa on neljä yksikköä sekä syöte- että vastekerroksessa. Syötekerrosta ei lasketa kerrokseksi, koska siellä ei suoriteta varsinaista laskentaa.

Monikerrosverkossa (engl. multilayer networks) on yksi tai useampia kätettyjä tasoja (kts. kuva 5.7b). Niiden laskentayksiköitä kutsutaan kätetyiksi neuroneiksi. Kätettyjen neuronien avulla voidaan havaita monimutkaisempia tilastollisia ominaisuuksia. Kunkin kerroksen syötesignaalit ovat edellisen kerroksen vastesignaaleja. Kuvassa 5.7b on feedforward-tyyppinen verkko, jossa on yhdeksän syötesolmua, neljä kätettyä neuronua ja kaksi ulostulokerroksen neuronua (9-4-2). Tunnetuimpia monikerrosverkkoja ovat monikerrosperseptroni (engl. multilayer perceptron (MLP)) ja säteittäi-



[117]

a) Neuron



b) Aktivaatiofunktio

Kuva 5.6. Sigmoidi-funktio.

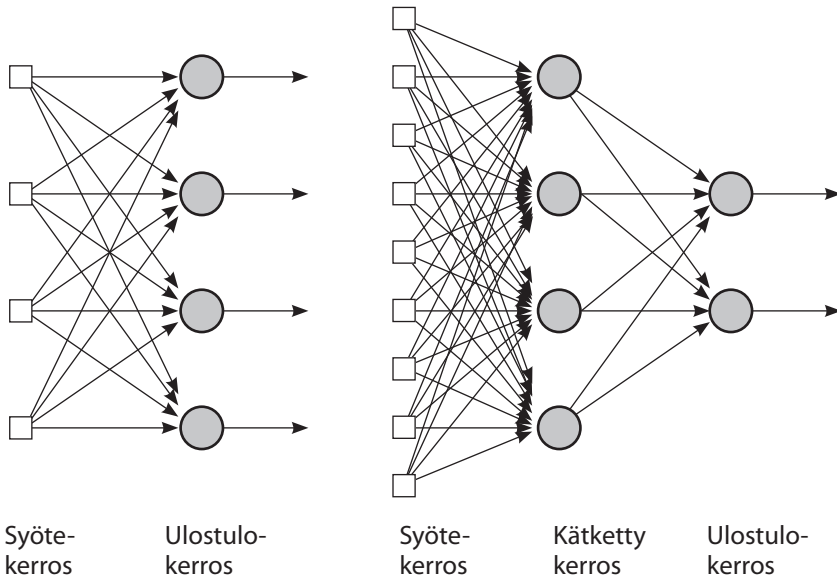
siin kantafunktioihin perustuvat verkot (engl. radial basis function (RBF) networks).

Kilpailuoppimiseen perustuvissa neuroverkoissa jokaiseen neuroniin on tallennettu dataa mallintava vektori. Nämä mallivektorit kilpailevat keskenään siitä, mikä antaa suurimman vasteen tietylle syötevektorille eli aktivoituu eniten. Voittajaneuroni on valitun etäisyysmitan suhteen lähinnä syötettä. Opetuksessa voittajaa vahvistetaan eniten, minkä seurauksena voittaja on entistä varmempi voittaja silloin, kun sama näyte syötetään uudelleen.

Monikerrosperseptroni

Verkko koostuu syötekerroksesta, yhdestä tai useammasta kätketystä kerroksesta ja vastekerroksesta. Sitä opetetaan yleensä backpropagation-algoritmilla, joka on ohjattu virhettä korjaava opetusalgoritmi. Verkossa syötesignaali kulkee eteenpäin kerros kerrokselta syötetasolta kohti vastetta. Opetuksessa vasteen virhe levitetään taaksepäin (engl. backpropagate) verkon painoihin laskemalla neuroneille niin kutsuttu lokaali gradientti. Sen avulla saadaan laskettua kuinka paljon kutakin painoa on korjattava, jotta vasteen virhekriteeri minimoituu.

[118]



a) Yksikerrosverkko

b) Monikerrosverkko

Kuva 5.7. Verkkoarkkitehtuureja.

Backpropagation-algoritmi Opetuksessa verkon painoja päivitetään seuraavasti:

$$\underbrace{\Delta w_{ij}(n)}_{\text{Painon korjaus}} = \underbrace{\eta}_{\text{Opetus-parametri}} \underbrace{\delta_j(n)}_{\text{Lokaali gradientti}} \underbrace{y_i(n)}_{\text{Neuronin syötesignaali}} .$$

Tässä lokaali gradientti määritellään

$$\delta_j(n) = e_j(n) \varphi'_j(v_j(n)),$$

kun neuroni j on ulostulokerroksella. Kätkeyllä kerroksella lokaali gradientti

$$\delta_j(n) = \varphi'_j(v_j(n)) \sum_k \delta_k(n) w_{kj}(n)$$

lasketaan rekursiivisesti ulomman tason lokaaleista gradienteista.

Itseorganisoituva kartta

[119]

Itseorganisoituva kartta (Self-Organizing Map (SOM)) perustuu kilpailuoppimiseen. Kartan neuronit ovat kaksidimensioisessa hilassa, joka on joko heksagonaalinen tai neliömäinen. Opetuksen seurauksena neuronit adaptoituvat kohti syötteitä ja järjestyvät siten, että samankaltaiset syötteet luokitellaan lähellä toisiaan oleviin neuroneihin. Neuronit tulevat siis herkiksi tietynlaisille syötteille. Syötteistä muodostuu topografinen kartta. Neuronien sijainnit tällä kartalla kuvaavat syötteiden tilastollisia ominaisuuksia. Vastaavia topologisesti järjestyneitä alueita on myös ihmisaivoissa. Tällaisia ovat esimerkiksi näkö- ja kuulohavainnoille herkäät aivokuoren alueet. Toisiaan lähellä olevat neuronit kuvaavat siis ominaisuuksia, jotka ovat keskenään samankaltaisia.

Itseorganisoituva kartta muodostaa epälineaarisen kuvauksen syöteavaruudesta kaksidimensioiselle hilalle siten, että signaalit ovat topologisesti järjestäytyneitä. Kun karttaa on opetettu tarpeeksi kauan, kukin signaali aiheuttaa yleensä aktivaatiota vain tietyllä kartan alueella. Mitä lähempänä syötevektori on neuronin mallivektoria, sitä suurempi aktivaatio. Itseorganisoituva kartta on tyypillinen ohjaamattoman oppimisen menetelmä.

SOM-algoritmi Algoritmi koostuu seuraavista vaiheista:

1. *Initialisointi.* Valitaan satunnaiset alkuarvot neuronien l painovektoreille $\mathbf{w}_j(0)$, $j = 1, 2, \dots, l$.

2. *Näytteenotto.* Valitaan näytevektori $\mathbf{x}(n)$ syöteavaruudesta.
3. *Haetaan lähin neuroni.* Jos $i(\mathbf{x})$ on lähimmän neuronin indeksi kun syötevektori on \mathbf{x} , niin iteraatiolla n , $i(\mathbf{x})$ löytyy minimoimalla Euklidista etäisyyttä

$$i(\mathbf{x}) = \arg \min \|\mathbf{x}(n) - \mathbf{w}_j\|, \quad j = 1, 2, \dots, l.$$

4. *Päivitys.* Päivitetään kaikkien neuronien painovektoreita käyttäen sääntöä

$$\mathbf{w}_j(n+1) = \mathbf{w}_j(n) + \eta(n)h_{j,i(\mathbf{x})}(n)[\mathbf{x}(n) - \mathbf{w}_j(n)].$$

Sekä opetusparametri $\eta(n)$ ($0 < \eta(n) < 1$) että naapurustofunktio $h_{j,i(\mathbf{x})}(n)$ pienenevät opetuksen aikana.

5. Jatketaan kohtaan 2 kunnes kartta on konvergoitunut.

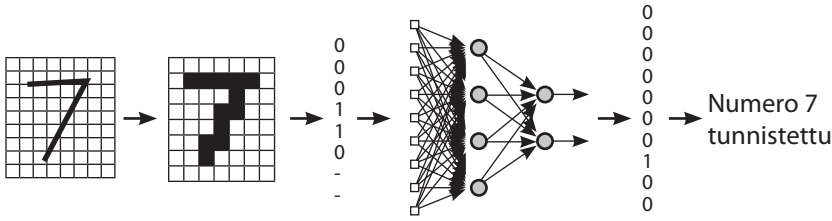
[120]

Sovellusalueita

Neuraalilaskennan tärkeimpiä sovellusalueita ovat hahmontunnistus, funktion approksimointi ja suodatus. Hahmontunnistuksessa voidaan edelleen erottaa klusterointi ja luokittelu. Lisäksi neuroverkko voidaan opettaa esimerkiksi säätämään prosessia.

Hahmontunnistus Hahmontunnistusta voidaan soveltaa muun muassa puheen, kasvojen, sormenjälkien ja esineiden tunnistukseen. Syöte on yleisesti ottaen vain signaalia, joka esikäsitellään sopivaan muotoon. Kun neuroverkkoa käytetään hahmontunnistukseen, se opetetaan näytteillä, joiden luokka tunnetaan. Tämän jälkeen voidaan jaotella opeteltuihin luokkiin sellaisetkin näytteet, joiden luokista ei ole etukäteen tietoa.

Neuraaliset luokittimet ovat joko selkeästi kaksivaiheisia tai monikerrosverkkoon perustuvia. Kaksivaiheisessa tunnistusjärjestelmässä on ohjaamattomasti opetettu verkko piirteiden erottamiseksi ja ohjatusti opetettu verkko luokittelua varten. Ohjatusti opetetussa monikerrosverkossa kätkeyty taso erottelee piirteitä. Tällainen verkko pystyy siis toteuttamaan kaksivaiheisen menetelmän molemmat vaiheet.



Kuva 5.8. Merkkien tunnistus.

Esimerkkinä merkkien tunnistuksesta esitellään käsinkirjoitetun merkin tunnistaminen (kuva 5.8). Käsinkirjoitettu merkki rasteroidaan ja muunnetaan binääriseksi hahmovektoriksi. Tämä vektori syötetään luokittelijaan, jonka haluttu ulostulo on nollista ja ykkösistä muodostuva vektori. Jokaiselle mahdolliselle luokittelutulokselle on oma elementtinsä ulostulovektorissa. Lopullisen luokittelutuloksen määrää se, mitä luokkaa vastaava elementti saa ulostulovektorissa suurimman arvon.

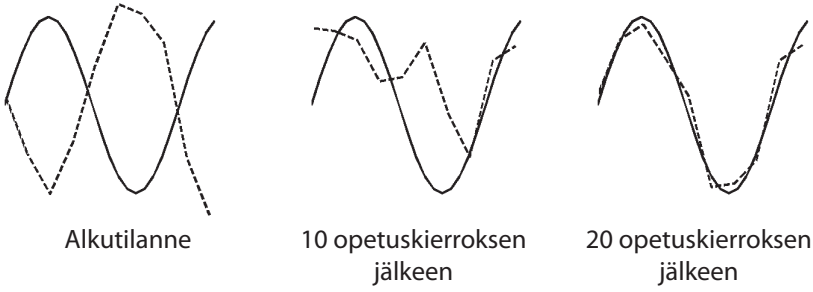
Neuroverkkoihin perustuvat luokittimet ovat osoittautuneet hyvinkin toimiviksi varsinkin, kun mahdollisten luokkien määrä on sopivasti rajoitettu. Tällaisia sovelluksia ovat esimerkiksi rajoitetun sanaston puheen-tunnistimet.

Funktion approksimointi Tarkastellaan syöte-vaste-kuvausta $\mathbf{d} = \mathbf{f}(\mathbf{x})$, jossa \mathbf{x} on syöte ja \mathbf{d} on vaste. Vektoriarvoinen kuvaus $\mathbf{f}(\cdot)$ oletetaan tuntemattomaksi. Tehtävänä on löytää neuroverkko, jonka syöte-vaste-kuvaus $\mathbf{F}(\cdot)$ approksimoi tuntematonta kuvausta $\mathbf{f}(\cdot)$ riittävän hyvin. Tämän saavuttamiseksi minimoidaan euklidista normia

$$\|\mathbf{F}(\mathbf{x}) - \mathbf{f}(\mathbf{x})\| < \varepsilon \quad \text{kaikille } \mathbf{x},$$

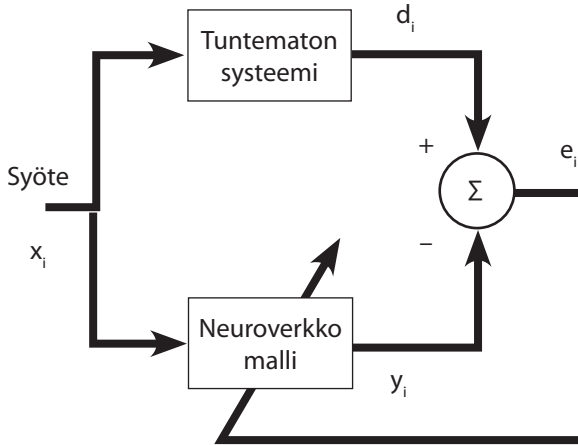
jossa ε on pieni positiivinen luku.

Jos opetusnäytteitä ja opetettavia vapaita parametreja on riittävän monta, on tavoite saavutettavissa monikerrosperseptronilla tai säteittäisiin kantafunktioihin perustuvia verkkoja käyttäen. Nämä verkot ovat universaaleja approksimaattoreita eli niillä voidaan approksimoida mitä tahansa jatkuvaa funktiota mielivaltaisen tarkasti. Esimerkkinä olkoon sinikäyrän approksimointi 1–10–1-monikerrosperseptronilla, jota opetetaan backpropagation-algoritmillä (kuva 5.9).

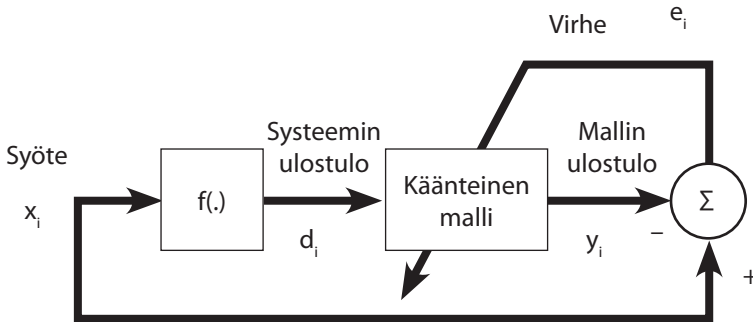


Kuva 5.9. Sinikäyrän approksimointi. (Opetuskerroksen aikana opetusnäytteet käydään läpi kertaalleen.)

[122]



Systemin identifiointi



Käänteisen systeemin identifiointi

Kuva 5.10. Identifiointi.

Neuroverkkojen funktion approksimointikykyä voidaan hyödyntää esimerkiksi systeemin ja käänteisen systeemin identifioinnissa (kuva 5.10). Systeemin identifioinnissa neuroverkko oppii tuntemattoman systeemin syöte-ulostulo-kuvauksen $\mathbf{d} = \mathbf{f}(\mathbf{x})$. Käänteistä systeemiä identifioitaessa tunnetaan $\mathbf{d} = \mathbf{f}(\mathbf{x})$ ja halutaan oppia $\mathbf{x} = \mathbf{f}^{-1}(\mathbf{d})$. Tällaiset menetelmät ovat hyödyllisiä, kun suora käänteisfunktion laskeminen on mahdotonta tai hyvin hidasta, jos \mathbf{f} on liian monimutkainen.

Suodatus Suodatuksessa kiinnostavaa suuretta erotellaan kohinaisista mittauksista hyödyntämällä muita näytteitä: $f(\cdot) = f(x_n, x_{n-1}, x_{n-2}, \dots, x_{n-k})$, $k > 0$. Ongelma voidaan jakaa kolmeen osatehtävään:

1. Suodatus (engl. filtering): estimoidaan nykyhetkeä edeltävien näytteiden avulla $x_n = f(\cdot)$.
2. Tasoitus (engl. smoothing): estimoidaan mennyttä ajanhetkeä sekä tulevien että edeltävien näytteiden avulla $x_{n-d} = f(\cdot)$, $0 < d < k$.
3. Ennustus (engl. prediction): estimoidaan tulevaa ajanhetkeä edeltävien näytteiden avulla $x_{n+d} = f(\cdot)$, $d > 0$.

[123]

Neuroverkoista suodatukseen soveltuvat etenkin ohjatusti opetetut monikerrosverkot. Näiden rakennetta on helppo muokata siten, että ne kykenevät ottamaan vastaan viivästettyjä signaaleja.

Ohjelmistoja

Ohjelmistoja on saatavilla runsaasti. Näistä tunnetuin on opetus ja tutkimuskäyttöön parhaiten soveltuva Matlabin Neural Network toolbox. Matlabiin on tarjolla myös useita public domain -työkaluja kuten SOM toolbox, NNSYSID, FastICA ja Netlab sekä kolmansien osapuolien kaupallisia toolboxeja. Näiden lisäksi on tarjolla useita muita sekä public domain että kaupallisia neuroverkko-ohjelmistoja datan analysointiin ja mallintamiseen. Public domain -ohjelmistoja ovat muun muassa SOM_PAK ja LVQ_PAK.

Kaupallisia ohjelmistoja ovat esimerkiksi Neurodimension ja Brainmaker. Myös Exceliin on tarjolla paketteja, jotka mahdollistavat neuroverkkojen käytön datan analysoinnissa. Tällaisia ovat esimerkiksi NeuroXL ja Tiberius.

5.3.3 Geneettiset algoritmit

Geneettiset algoritmit (GA) kuuluvat suurempaan joukkoon menetelmiä, joita kutsutaan yleisnimellä *evoluutioalgoritmit*. Näihin luetaan GA:n lisäksi muun muassa geneettinen ohjelmointi, evoluutiostrategiat, evoluutio-ohjelmointi ja differentiaalievoluutio. Alan konferensseissa aihealueeseen niputetaan myös muita luonnosta mallinsa hakeneita optimointi- tai mallinnusmenetelmiä (mm. particle swarm optimization, ant colony optimization, cultural algorithms, DNA computing, learning classifier systems, artificial life, artificial immune systems).

Evoluutioalgoritmeista luonnon evoluutiota ja DNA:n (deoxyribonucleic acid, deoksiribonukleiinihappo) tapaista koodausta ehkä kaikkein suoravii- vaisimmin pyrkivät jäljittelemään geneettiset algoritmit. DNA:ssa koodaus perustuu neljän emäksen peräkkäisiin järjestyksiin, kun taas alkuperäisessä GA:ssa koodaus oli binäärinen, eli perustui nollien ja ykkösten sarjoihin. Nykyään kuitenkin käytetään yleisesti myös reaalitykoodausta.

GA:ssa ongelma-avaruus koodataan siten, että se voidaan esittää niin kutsuttuna *kromosomina*. Kromosomi sisältää geenejä, joiden arvot yleensä esittävät joko suoraan tai sopivan koodauksen kautta ongelman parametrien arvoja. Tarvittava kromosomin suuruus saadaan useimmiten suoraan ongelman dimensiosta, eli siitä montako parametria ongelmassa on. Koodauksen tulee pystyä aina esittämään jokainen ongelma-avaruuden mahdollinen piste. Lisäksi jokaiseen pisteeseen pitää olla mahdollisuus päästä jokaisesta muusta. Usein ongelma ei ole jatkuva eli koodaus pystyy esittämään myös epäkelvoja pisteitä, jotka tulee joko karsia ratkaisuisista pois tai sitten niitä on rangaistava hyvyysfunktiossa sakkotermillä.

Luonnossa DNA sisältää suuren määrän niin sanottua ”roska-DNA:ta”, jolla ei näyttäisi olevan mitään vaikutusta yksilön ominaisuuksiin (arvioiden mukaan jopa 97% DNA:sta). Tosin ainakin osa tästä lienee sellaista, jonka merkitystä ei vain ole vielä tunnistettu. GA:ssa puolestaan oletetaan, että kaikki geenit ovat merkityksellisiä. Optimoinnissa voi kuitenkin osoit- tautua, että ongelman eri parametrien arvoilla on erilainen merkitys tulok- seen ja joidenkin parametrien arvoilla ei juurikaan ole merkitystä; tämän voi havaita esimerkiksi siitä, että optimiin konvergoituneessa GA-populaa- tiossa jonkin tietyn parametrin (geenin) arvot heittelevät suuresti.

Luonnossa yksilön ominaisuudet (fenotyyppi) eivät ole suoraan johdet- tavissa DNA:sta (genotyyppi). Esimerkiksi eliön ikä muuttaa suuresti eliön ulkoisia ominaisuuksia ja suorituskykyä. Myös elinympäristö vaikuttaa: enemmän ravintoa saanut voi kasvaa suuremmaksi kuin vähällä ravinnolla kasvanut, vaikka geenistö olisi sama. Urheilija voi harjoituksella (tai hor- moneilla) saada itsensä paljon nopeammaksi tai voimakkaammaksi kuin veltoileva identtinen kaksosensa. Myös onnettomuudet ja sairaudet voivat

muuttaa yksilön ominaisuuksia: yksilön käsi voi katketa tai esimerkiksi polio voi halvauttaa yksilön.

Normaalissa GA:ssa koodaus on kuitenkin suora, eli yksilön ominaisuudet voidaan johtaa suoraan kromosomista (eli fenotyyppi vastaa genotyyppiä) ja ominaisuudet pysyvät samoina GA-yksilön koko olemassaoloajan. Poikkeuksena ovat niin kutsutut *memetic algorithms* joissa paikallishauulla etsitään yksilön ympäristöstä parempi piste ja sen tiedot siirretään myös kyseisen yksilön geeneihin, eli yksilön geenistö muuttuu ja myös ”opitut” ominaisuudet voivat periytyä; näinhän ei luonnossa ilmeisestikään tapahdu? (Googleta *epigeneettinen*.)

Keskeiset käsitteet

Risteytys Risteytyksellä tarkoitetaan kahden yksilön perintötekijöiden sekoittamista tarkoituksena luoda uusi yksilö. Luonnossa risteytys perustuu DNA:n kaksoiskierteeseen ja kromosomipareihin. Molemmilta vanhemmilta peritään yksi kromosomikokonaisuus. Luonnon järjestelmissä geenit ovat dominoivia tai peittyviä. Geneettisissä algoritmeissa on asiaa yleensä yksinkertaistettu siten, että kromosomeissa on kutakin geeniä vain yksi kappale, joka peritään toiselta vanhemmista. Myös parirakennetta käyttäviä GA-versioita on kirjallisuudessa esitetty, mutta niillä ei ole saavutettu merkittävää etua yksinkertaisempaan esitystapaan verrattuna.

GA:ssa käytetään useita erilaisia risteytystapoja. Yksipisteristeytyksessä uuden yksilön geenin arvot otetaan toiselta vanhemmalta risteytyspisteeseen saakka, ja sen jälkeen puolestaan toiselta. Kaksipisteristeytyksessä alku ja loppu otetaan toiselta ja pisteiden väli toiselta vanhemmista. Monipisteristeytyksessä arvotaan kunkin geenin kohdalla kummalta vanhemmista arvo otetaan. Nämä menetelmät tuottavat joko yhden tai kaksi uutta yksilöä riippuen siitä, otetaanko vain valitut arvot vai luodaanko myös niin kutsuttu komplementtiyksilö, joka saa arvonsa aina päinvastaiselta vanhemmalta kuin ensimmäinen uusi yksilö.

Reaalilukukoodatussa GA:ssa voidaan käyttää myös aritmeettisiä risteytyksiä, jolloin uuden yksilön geenin arvo on joko normaali tai sopivalla kertoimella painotettu keskiarvo vanhempien vastaavien geenien arvoista. GA:ssa voidaan käyttää myös useampia vanhempia eli uuden yksilön perintötekijöitä voidaan valita kahden vanhemman sijaan esimerkiksi kolmesta tai viidestä eri vanhemmasta.

Mutaatio Mutaatiolla tarkoitetaan perintötekijöiden tiettyyn geeniin tehtyä muutosta. GA:ssa mutaatiotodennäköisyys on paljon suurempi kuin luonnossa. Mutaatio on periaatteessa perintötekijöiden kopioimisessa tapahtuva virhe. Luonnossa organismeilla on erilaisia mekanismeja, joilla ne pyrkivät estämään ja korjaamaan geenien kopioinnin virheitä. Useimmiten

mutaatiot ovat joko neutraaleja tai haitallisia ja saattavat aiheuttaa vakavia vammaisuuksia tai täysin elinkelvottomia yksilöitä. Mutaatio on luonnossa vain harvoin elinkelpoinen ja hyödyllinen. GA:ssa mutaatiot ovat kuitenkin usein hyödyllisiä ja jopa välttämättömiä, sillä ilman mutaatiota GA ei saisi uutta geenimateriaalia ja alkupopulaation geenien paras kombinaatio olisi paras mahdollinen tulos (ei voitaisi päästä kaikkiin ongelma-avaruuden pisteisiin). Luonnon evoluutiossa mutaatioita tapahtuu vain uuden yksilön perimän luonnissa. GA:ssa mutaatiota voidaan käyttää paitsi risteytyksen yhteydessä myös kopioimalla vanhan populaation yksilö uudeksi muuttaen sitä ainoastaan mutaatiota käyttäen.

Valinta ja elitismi Luonnonvalinta tarkoittaa, että kaikkein elinkelpoisimmilla ja vahvimmillä yksilöillä on parhaat mahdollisuudet jäädä henkiin ja tuottaa jälkeläisiä. Valintaa käytetään elitististen GA-versioiden osana. Elitismiä ei kuitenkaan aina välttämättä käytetä, vaan joskus luotetaan populaation kehittymiseen ilman sitäkin. Elitismi takaa, että hyviä ratkaisuja ei menetetä, vaan esimerkiksi paras löydetty ratkaisu säilyy populaatiossa. Elitistisissä GA-versioissa tietty määrä parhaita yksilöitä (vähintään yksi) jää eloon ja jatkaa uuteen populaatioon. Valintatapoja on kehitetty useita, esimerkiksi joko valitaan suoraan tietty määrä parhaita yksilöitä tai sitten valitaan satunnaisesti tietty määrä (kaksi tai enemmän) yksilöitä, jotka kilpailevat keskenään ja näistä paras selviytyy. Monitavoiteoptimoinnissa voidaan valita myös siten, että jokaisen yksittäisen tavoitteen parhaiten toteuttava yksilö valitaan jatkoon. Muut vanhan populaation yksilöt korvataan vanhan populaation yksilöistä, risteytyksillä ja mutaatioilla, luoduilla uusilla yksilöillä.

[126]

Initialisointi, alkupopulaation luominen GA:ssa alkupopulaatio luodaan yleensä satunnaisesti eli arpomalla kunkin parametrin arvo satunnaisgeneraattorilla kyseisen parametrin sallitulle vaihteluvälille. Muitakin initialisointitapoja on, muun muassa tunnettujen hyvien ratkaisujen käyttäminen alkupopulaationa, asiantuntijoiden määrittelemät arvot, systemaattinen täyttö ääriarvoilla ja tasavälisillä väliarvoilla sekä alkupopulaation luominen optimoimalla jollain toisella menetelmällä, esimerkiksi jollain epätarkemmalla mutta nopeammalla menetelmällä.

Hyvyysfunktion evaluointi Optimoinnissa tarvitaan kiinnitetty ominaisuus, jonka mukaan optimointi etenee. Tavallisessa matemaattisessa funktiossa se on funktion arvo, jota pyritään joko maksimoimaan tai minimoimaan. GA ei kuitenkaan edellytä, että ongelma on esitettävissä matemaattisesti vaan vaaditaan vain, että ongelmasta saadaan jokin hyvyttä esittävä numeerinen arvo. Tuo arvo voi olla vaikka tietokoneohjelman suoritus aika, jonkin simulaattorin antama tulos tai ihmisen antama numeerinen arvio. GA:lla on esimerkiksi tehty sovellus rikollisten kasvojen

tunnistamisesta, jossa GA generoi kasvokuvia piirteitä yhdistelemällä ja silminnäkiä valitsee aina sen kasvokuvan, joka muistuttaa eniten rikollista.

Vanhempien valinta Toisin kuin luonnossa GA:ssa ei yleensä ole sukupuolia, vaan jokainen populaation yksilö voi risteytyä minkä tahansa muun populaation yksilön kanssa. Vanhempien valintaan on kuitenkin kehitetty useita menetelmiä, jotka yleensä painottavat hyvien yksilöiden mahdollisuutta päästä vanhemmiksi. Hyvien yksilöiden painotus saattaa perustua suoraan niiden hyvyysarvoon, mutta yleisemmin käytetään hyvyysjärjestykseen perustuvaa painotusta, jossa yksilön todennäköisyys päästä vanhemmaksi saattaa laskea hyvyysjärjestyksessä alaspäin mentäessä joko lineaarisesti tai logaritmisesti.

Vahvuudet ja heikkoudet

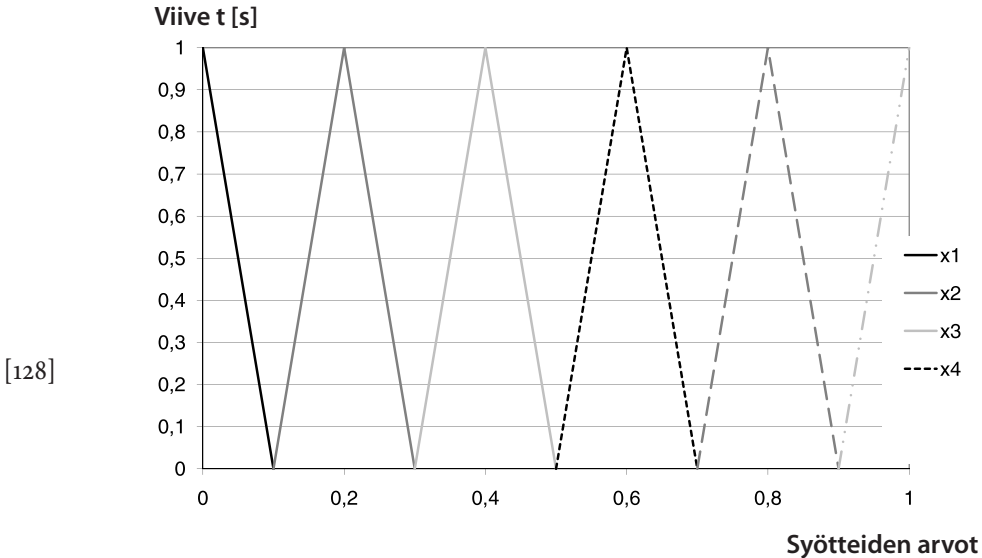
Geneettiset algoritmit soveltuvat parhaiten vaikeiden reaalimaailman ongelmien optimointiin. Jos ongelmaan on olemassa kohtuujassa toimiva täsmällinen matemaattinen ratkaisumenetelmä, GA:ta ei yleensä kannata käyttää. Tavallisia matemaattisia funktioita ratkotaankin GA:lla lähinnä vain testiongelmia, joita käytetään vertailtaessa eri optimointimenetelmien tehokkuutta tai eri evoluutioalgoritmien ratkaisu- tai konvergoitumisnopeutta. GA:t ovat parhaimmillaan ongelmissa, joihin ei löydy täsmällistä matemaattista ratkaisua, epäjatkuissa ongelmissa, monitavoiteoptimoinnissa tai jos ongelmasta on olemassa vain simulaattori tai tietokonemalli tai jos tuloksen hyvyden voi arvioida vain ihminen.

GA-menetelmien heikkous on pätevän teorian puuttuminen. GA:n tehon uskotaan perustuvan ns. ”rakennuspalikkahypoteesiin” eli siihen että hyvät ominaisuudet perustuvat hyviin geeniryppäisiin, joita risteyttämällä saadaan uusia hyviä ratkaisuehdokkaita jolloin periytyvä aines ”jalostuu”. Mutaatioiden puolestaan uskotaan pitävän huolen siitä, että etsintä ei juutu lokaaliin optimiin ja että populaatio saa mutaatioiden avulla uutta geneettistä materiaalia. GA:n toimivuutta ei kuitenkaan ole matemaattisesti todistettu. Suurin todiste geneettisten algoritmien tehosta lienee luonnon monimuotoisuus ja lukemattomat luonnon organismeissa esiintyvät toimivat ratkaisut.

GA-menetelmiä on kritisoitu myös niin kutsutulla ”no free lunch” -teorialla, joka esittää että kaikki menetelmät ovat yhtä tehokkaita, jos niitä verrataan suhteessa kaikkiin mahdollisiin optimointiongelmiin. Tällaisessa ongelma-avaruuksessa on kuitenkin lukematon määrä käytännössä merkityksettömiä ongelmia ja yleensä jokaiseen ongelmaan voidaan löytää juuri sen tyyppiselle ongelmalle tehokas ratkaisumenetelmä. Yleensä jollekin ongelmatyypille räätälöity ratkaisumenetelmä on kuitenkin vastaavasti heikko muille ongelmille, toisin sanoen mikä tarkkuudessa voitetaan se yleistettävyydessä hävitään.

ESIMERKKI 5.4

Eräs viime vuosina paljon tutkittu GA-sovellus on ohjelmistojen, varsinkin ohjelmistojen vasteaikojen testaus. Suuri tietokoneohjelmisto on vaikeasti mallinnettava epädeterministinen kokonaisuus, jonka vasteajat ovat vaikeasti ennakoitavissa eksaktin matemaattisesti. Ohjelmistoja on pyritty testaamaan generoimalla GA:lla syötteitä ohjelmistolle ja mittaamalla vasteajat eli se miten kauan ohjelmisto suorittaa tehtäviä saamiensa syötteiden johdosta.



Kuva 5.11. Testiesimerkki, kukin ohjelman kuudesta syötteestä aiheuttaa ohjelman vasteaikaan kuvan mukaisen viiveen.

Ajatellaan tilanne, jossa ohjelma saa kuusi syötettä joiden arvot ovat välillä $[0, 1]$ ja syötteet aiheuttavat ohjelman vasteeseen viiveen alla olevan kaavan mukaisesti:

$$f(X) = \sum_{i=0}^5 \max\{0; \text{abs}(x_i - 0.2 * i) * 10\}. \quad (5.11)$$

Viivefunktion kuvaajat on esitetty kuvassa 5.11. Viivefunktioista nähdään, että ongelma on täysin separoituva ja siten varsin helposti ratkaistavissa etsimällä kunkin x_i :n arvo erikseen. Tässä kuitenkin ajatellaan, että oikea ohjelma on musta laatikko, joka todellisuudessa käyttäytyy ei-separoituvasti, jolloin yksinkertaiset menetelmät eivät toimisi. Tällä esimerkillä

halutaan havainnollistaa GA:n, satunnaismenetelmän ja systemaattisen menetelmän käyttäytymistä testattaessa tämän kaltaista viiveongelmaa.

Oletetaan, että meillä on rajallinen aika testata ohjelmiston vasteaika. Käytössä oleva aika riittää vain noin 15 000 syötevektorin testaamiseen. Jos testaisimme systemaattisesti tasavälein, kullekin kuudelle muuttujalle annettaisiin vuorotellen arvot $\{0.0, 0.25, 0.5, 0.75, 1.0\}$ eli olisi testattava $5^6 = 15\,625$ vaihtoehtoa. Luodaan nuo 15 625 syötevektoria systemaattisesti tasavälein, Taguchi-menetelmää muistuttavasti satunnaisesti arpoen vuorotellen tasakokoisten ”kuutioiden” sisään $\{[0.0, 0.2], [0.2, 0.4], [0.4, 0.6], [0.6, 0.8], [0.8, 1.0]\}$, täysin satunnaismenetelmällä, tai sitten GA:lla optimoiden. Kappaleen lopussa on esitetty yksinkertainen Java-ohjelmistolla toteutettu GA-koodi, jolla testiongelmamme GA-optimointi on suoritettu. Tässä koodissa populaation koko on 26 yksilöä, elitismien suuruus on yksi ja siinä käytetään suurehkoa mutaatiotodennäköisyyttä yhdistettynä kahteen eri mutaatiotapaan ja -suuruuteen.

Taulukossa 5.5 on esitetty 1 000 testiajon kuvailevat tilastot eri menetelmillä. Systemaattisella menetelmällä tulokset ovat aina identtisiä, mutta satunnaismenetelmillä eri testiajot tuottavat erilaisia tuloksia. GA-menetelmä on heuristinen, joten eri GA-testiajojen välillä on eroja. Taulukosta voidaan nähdä, että yksinkertainen GA on jokaisella testiajolla tuottanut paremman tuloksen kuin mikään muista testatuista menetelmistä parhaimmillaan. Lisäksi GA-ajojen tulosten keskihajonta on paljon pienempi kuin satunnaisilla menetelmillä. Jos esimerkissämme testattavan ohjelmiston suurin sallittu vasteaika olisi ollut 5,0 s, ohjelma olisi läpäissyt vasteaikatestin kaikilla muilla menetelmillä joka kerta. Sen sijaan GA-testissä ohjelmisto olisi epäonnistunut joka kerta. Juuri tämän takia ohjelmistojen vasteaikojen testaus GA:lla on aktiivisen tutkimuksen alla. Testattujen menetelmien lähdekoodit: <http://www.uwasa.fi/~timan/EA>.

[129]

Taulukko 5.5. Vasteaikatestin parhaan ajon kuvailevat tilastot eri menetelmillä 1 000 testiajoa kullakin.

	<i>Systemaattinen</i>	<i>Taguchi</i>	<i>Satunnaismenetelmä</i>	<i>GA</i>
Maksimi	3	4,944822	4,751988	5,994995
Minimi	3	2,946468	2,8051	5,187492
Keskiarvo	3	3,593772	3,445093	5,970166
Mediaani	3	3,53495	3,405283	5,97392
Keskihajonta	0	0,29819	0,288163	0,032822
Yhteensä	1000	1000	1000	1000

Lisätietoja

Suosittelavin oppikirja laajemmaksi johdannoksi eri GA-menetelmiin tutustumiseen on ehkä Eiben ja Smith: *Introduction to evolutionary computing* [7]. Geneettisistä algoritmeista ei ole julkaistu suomenkielellä mitään varsinaista oppikirjaa. Suomeksi on olemassa vain Tekesin raportti GA:n mahdollisuuksista [1], jossa myös hieman selostetaan käsitteitä ja annetaan esimerkkejä. Teoksessa [11] on oma kappale GA:lle, jossa on myös Matlab-esimerkki, joskaan ei varsinaisella Matlabin omalla *Genetic algorithms and Direct search toolbox* -ohjelmalla [22] toteutettu. Matlabin toolboxin lisäksi valmiita GA-ohjelmia on suuri määrä mm. EvoWeb:in sivustoilla [8], jossa on myös GA-esittelyä ja muuta oheismateriaalia.

Harjoitustehtäviä

39. Geneettisiä algoritmeja on sovellettu lähes kaikkeen mahdolliseen maan ja taivaan välillä.
- [130] (a) Selvitä kuinka monta GA-viitettä löydät jonkin oman harrastuksesi alalta (esim. scholar.google.fi) hakusanoilla ”genetic algorithms” + harrastuksesi. Esimerkiksi jos harrastuksesi on musiikki: ”genetic algorithms” + music (tai tarkemmin instrumenttikohtaisesti guitar, piano, violin etc.), tai jos harrastuksesi on moottoripyörä kokeile ”genetic algorithms” + motorcycle tai aivan vastaavasti muille harrastuksille.
- (b) Tutustu tarkemmin johonkin löytämäsi tutkimuspapeeriin, esimerkiksi musiikin tapauksessa löydät varmaan jonkin tutkimuspaperin hakusanoilla ”composing with genetic algorithms” tai kitara hakusanalla ”genetic algorithm for the automatic generation of playable guitar tablature” tai moottoripyörällä ”application of genetic algorithms to a multi-agent autonomous pilot for motorcycles” tai vastaavasti oman harrastuksesi mukaisella hakusanalla löytämäsi GA-artikkeliin.
- (c) Selvitä, onko lukemassasi artikkelissa käytetty perus-GA:ta vai jollain tavoin kyseistä ongelmaa varten räätälöityä erikois-GA:ta. Miten GA:ta on muokattu kyseistä

ongelmaa varten. Selvitä ongelmaspesifit parametrit, operaattorit yms. poikkeukset.

40. Analysoi oheista simpleGA-koodia ja testiesimerkkiongelmää.

- (a) Kuinka kyseisessä koodissa on toteutettu hyvien yksilöiden suosiminen uusien yksilöiden vanhempina?
- (b) Luoko koodi joskus uusia yksilöitä vanhoista käyttäen pelkästään mutaatiota?
- (c) Koodissa käytetään kahta eri mutaatiotapaa. Mitä etua sillä mahdollisesti saavutetaan?
- (d) Montako tasavälein annettua arvoa tulisi systemaattisesti testata jotta löydettäisiin testiesimerkkiongelman maksimi? Mitä tapahtuisi jos arvoja lisättäisiin siitä vielä yhdellä (ja arvot annettaisiin jälleen tasavälein)?
- (e) Miten eri menetelmien teho muuttuisi, jos ongelman huiput siirrettäisiinkin pois esimerkin tasavälisistä pisteistä {0.0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1.0} satunnaisiin pisteisiin, esimerkiksi {0.11, 0.25, 0.57, 0.66, 0.89, 0.97}? Pitäisikö tämän kaltaisen muutoksen vaikuttaa ongelman kompleksisuuden ja ratkaistavuuteen?

[131]

```
import java.util.*; /* simpleGA.java ohjelma 29.1.2009 by TM */

class simpleGA{ // GA parametrit, hyvyys ja populaatiotaulukot
int PARAM = 6, SUKUP = 625, POPSIZE = 26, ELIT = 1, MUTP = 25;
double[] HYV = new double[POPSIZE];
double[][] POP = new double[POPSIZE][PARAM];
Random r = new Random(); // Tarvitsemme satunnaislukuja

public simpleGA(String[] args){
int i, j, s; //Laskurit
for(i = 0; i < POPSIZE; i++){ // Alkupuolaatio satunnaisesti
for(j = 0; j < PARAM; j++) POP[i][j] = Math.random();
HYV[i] = fitness(POP[i]); } // Hyvyyden testaus
for(s = 0; s < SUKUP; s++){ // GA optimointiluuppi
if(s > 0) for(i = POPSIZE - 1; i >= ELIT; i - 1){ // Uudet sukupolvet
ristey(i, r.nextInt(i + 1), r.nextInt(i + 1), (double)MUTP / 100.0);
```

```

        HYV[i]=fitness(POP[i]); }
    sortmax(); // Hyvyyssjärjestykseen ja parhaan tulostus
    System.out.println(s+" "+HYV[o]); }

public void ristey(int n,int x1,int x2,double mutp){
for(int i=0;i<PARAM;i++){ // Monipisteristeytys
POP[n][i]=Math.random()<0.5 ? POP[x1][i]:POP[x2][i];
if(Math.random()<mutp){ // Mutaatiot, suuri tai pieni
    POP[n][i]=Math.random()<0.5 ?
        Math.random():POP[n][i]+r.nextGaussian()/100.0;
    if(POP[n][i]<0.0) POP[n][i]=-POP[n][i]; // Ylivuotojen
    if(POP[n][i]>1.0) POP[n][i]=1.0/POP[n][i];}} // korjaus

public void sortmax(){ // Populaatio hyvyyssjärjestykseen
for(int i=0;i<POPSIZE-1;i++)
    for(int j=1;j<POPSIZE;j++)
        if(HYV[j]>HYV[i]){double ap=HYV[j];HYV[j]=HYV[i];HYV[i]=ap;
            for(int k=0;k<PARAM;k++)
                {apu=POP[i][k];POP[i][k]=POP[j][k];POP[j][k]=apu; }}}

[132] public double fitness(double[] x){ // Hyvyyssfunktio
double tot=0.0; // Palautusarvo
for(int i=0;i<PARAM;i++) // Hyvyyden laskeminen
    tot+=Math.max(0, 1.0-Math.abs(x[i]-0.2*(double)i)*10.0);
return tot;}

public static void main(String args[]) { // PÄÄOHJELMA
    new simpleGA(args); // GA:n kutsuminen
    System.exit(0);} // Lopetus

```

5.3.4 Matemaattinen sumean logiikka

*Sumeiden joukkojen teoria*¹² sai alkunsa vuonna 1965 Zadeh'n julkaisusta *Fuzzy Sets*, jossa laajennetaan naiivia joukko-oppia sallimalla alkion *osittainen* kuuluminen joukkoon: ihmiset eivät ole vain joko vanhoja tai nuoria, vaan kuuluvat erilaisilla jäsenyysasteilla eri joukkoihin. Nykyään puhutaan myös *sumean logiikasta*; se on tutkimuksen ja sovellusten edetessä eriytynyt *yleiseksi sumean logiikaksi* ja *matemaattiseksi sumean logiikaksi*.

¹² *Fuzzy Set Theory* käännetään usein erheellisesti sumeaksi teoriaksi, vaikka oikea käänнос on tietysti sumean teoria. Kyseessä on täsmällinen teoria, joka mallintaa sumeita ilmiöitä. Samoin pitäisi puhua sumean logiikasta, ei sumeasta logiikasta.

Sumean logiikan tärkeimmät sovellukset ovat asiantuntijajärjestelmissä ja säätöteoriassa.

Klassisen lauselogiikan ja Boolean algebran välillä on *Lindenbaumin-Tarskin* teoreemana tunnettu tulos: Jokaisen loogisen teorian T lauseet voidaan niputtaa ekvivalenssiluokiksi asettamalla $p \simeq q$, kun lauseet p ja q ovat loogisesti ekvivalentit. Teoriaa T vastaava Lindenbaumin-Tarskin algebra A saadaan silloin ekvivalenssiluokista, joiden väliset operaatiot generoituvat logiikan konnektiiveista konjunktio, disjunktio ja negaatio. Algebra A on Boolean algebra. Kääntäen jokaista Boolean algebraa B vastaa jokin sellainen klassinen lauselogiikan teoria T , että teoriaa T vastaava Lindenbaumin-Tarskin algebra A on isomorfinen algebran B kanssa. Tämä merkitsee, että jokainen Boolean algebra on isomorfinen jonkin Lindenbaumin-Tarskin algebran kanssa. Myös naiivin joukko-opin ja Boolean algebran välinen yhteys tunnetaan: jokaisen ei-tyhjän joukon C potenssijoukko (joukon C kaikkien osajoukkojen kokoelma) muodostaa Boolean algebran, jonka laskutoimitukset ovat leikkaus, unioni ja joukko-opillinen erotus.

Matemaattisessa sumean logiikassa on voimassa vastaavanlainen tulos. Klassista logiikkaa vastaa siellä BL-logiikka ja Boolean algebraa BL-algebra¹³. Koska sumean logiikka yleistää klassisen logiikan 0/1 arvoisista lauseista intervallin $[0,1]$ -arvoisiksi lauseiksi, on ilmeistä, että tämä yleistys voidaan tehdä monella eri tavalla. Tunnetuimmat ja käytetyimmät yleistyksen kulkevat nimillä *Lukasiewicz*-, *Gödel*- ja *tuloalgebra* (-algebra). Seuraavassa taulukossa on kunkin yleistyksen perusoperaatiot ja niiden tulkinta matemaattisessa sumean logiikassa.

[133]

Operaatio	Merkitys	Lukasiewicz	Gödel	Tulo
tulo $a \otimes b$	a JA b	$\max\{0, a + b - 1\}$	$\min\{a, b\}$	$a \cdot b$
summa $a \oplus b$	a TAI b	$\min\{1, a + b\}$	$\max\{a, b\}$	$a + b - a \cdot b$
jäännös $a \rightarrow b$	JOS a NIIN b	$\min\{1, 1 - a + b\}$	b jos $a > b$, muuten 1	b / a jos $a > b$, muuten 1
komplementti a^*	EI a	$1 - a$	1 jos $a = 0$, muuten 0	1 jos $a = 0$, muuten 0

Lukasiewicz-, Gödel- ja tuloalgebrat ovat esimerkkejä *jatkuvista t-normeista* eli assosiatiivisista, kommutatiivisista, kasvavista ja jatkuvista kuvauksista $T: [0,1]^2 \rightarrow [0,1]$, jotka toteuttavat ehdot $T(x,1) = x$ ja $T(x,0) = 0$, kun $x \in [0,1]$. Voidaan todistaa, että kaikki jatkuvat t -normit saadaan

¹³ Kirjaimet BL ovat lyhenne sanoista *basic logic*.

Lukasiewicz-, Gödel- ja tulo-algebran tulo-operaatioita sopivasti yhdistelemällä.

Loogista järjestelmää voidaan tarkastella *semanttiselta* tai *syntaktiselta* kannalta, kun sallittujen lauseiden joukko P ja totuusarvojen joukko L on kiinnitetty. Klassisessa logiikassa $L = \{0, 1\}$, sumean logiikassa yleensä $L = [0, 1]$. Semanttisessa tarkastelussa määritellään *totuusfunktiot* v tietyt ehdot täyttävinä kuvauksina $v : P \rightarrow L$, ja näiden avulla tautologiat eli lauseet, jotka saavat totuusarvon 1 ('tosi') kaikilla totuusfunktioilla v . Syntaktisessa tarkastelussa otetaan lähtökohdaksi tietyn tyyppiset *aksioomiksi* kutsutut lauseet, joita pidetään tosina, sekä sallitut *päättelysäännöt*, joiden avulla tosista lauseista voidaan johtaa *teoreemoiksi* kutsuttuja tosia lauseita. Tunnetuin päättelysääntö lienee Modus Ponens; lauseista α ja $\alpha \Rightarrow \beta$ voidaan päätellä lause β . Looginen järjestelmä on täydellinen, jos sen teoreemat ja tautologiat muodostavat saman lausejoukon. Lukasiewicz-logiikan täydellisyys osoitti ensimmäisenä Wajsberg vuonna 1935; vuonna 1958 Chang antoi uuden todistuksen ottamalla käyttöön käsitteen *MV-algebra*¹⁴. MV-algebrat ovat kaksoisnegaatiolain $x = x^*$ toteuttavia BL-algebroita. Yleisen BL-logiikan täydellisyys todisti Hajek vuonna 1998.

MÄÄRITELMÄ 5.2

[134]

Sumea (osa)joukko on järjestetty pari $\langle A, \mu_A \rangle$, missä A on ei-tyhjä joukko (tarkasteltavien objektien perusjoukko) ja μ_A (joukon A jäsenyysfunktio) on kuvaus $\mu_A : A \rightarrow [0, 1]$.

Määritelmästä 5.2 nähdään, että sumeiden joukkojen teoria rakentuu klassisen joukko-opin käsitteiden varaan; tarvitaan aina ensin klassinen joukko, jotta voitaisiin puhua sumeista (osa)joukoista. Samalla tavalla sumean logiikan *metalogiikka* (ts. logiikka, jolla todistetaan sumean logiikkaa koskevia matemaattisia totuuksia) on klassista logiikkaa. Sumea joukko määräytyy yksikäsitteisesti jäsenyysfunktionsa avulla. Jos $\forall x \in A : \mu_A(x) \in \{0, 1\}$, on A klassinen joukko ja μ_A joukon A *karakteristinen funktio*. On tärkeää huomata, että sumeat joukot ovat aina sopimuksenvaraisia ja riippuvat ympäristöstä, joissa niitä käytetään: 40°C voi olla korkea lämpötila, jos puhutaan potilaan lämmöstä, mutta alhainen lämpötila, jos puhutaan meesauunin lämpötilasta. Sumeiden joukkojen yhteydessä käytetään usein termiä *kielellinen muuttuja*.

ESIMERKKI 5.5

Nuorten, keski-ikäisten ja vanhojen ihmisten sumeat joukot voidaan määritellä kuvan 5.12 (täysin sopimuksenvaraisten!) jäsenyysfunktioiden avulla.

¹⁴ Kirjaimet MV ovat lyhenne sanoista *many valued*.

Samaan tapaan kuin BL-logiikan lauseita voidaan myös sumeita joukkoja yhdistellä BL-operaatioiden avulla. Jos käytetään esimerkiksi Lukasiewicz-operaatioita ja määritellään $\mu_{\text{kaunis}}(\text{Kalle}) = 0.8$ ja $\mu_{\text{rohkea}}(\text{Kalle}) = 0.7$, niin $\mu_{\text{kaunis JA rohkea}}(\text{Kalle}) = \max\{0, 0.8 + 0.7 - 1\} = 0.5$, $\mu_{\text{kaunis TAI rohkea}}(\text{Kalle}) = \min\{1, 0.8 + 0.7\} = 1$, $\mu_{\text{eikaunis}}(\text{Kalle}) = 1 - 0.8 = 0.2$ jne. Joukossa X määritelty ekvivalenssirelaatio (ts. joukon X refleksiivinen, symmetrinen ja transitiivinen binäärinen relaatio) yleistyy matemaattisessa sumean teoriassa moniarvoiseksi ekvivalenssirelaatioksi eli *sumeaksi samuudeksi* seuraavalla tavalla.

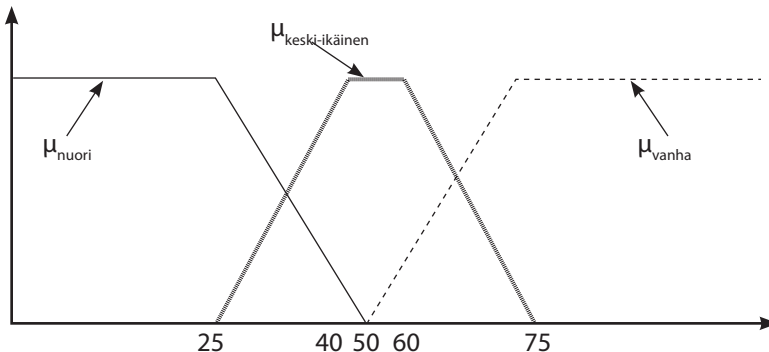
MÄÄRITELMÄ 5.3

Olkoon A ei-tyhjä joukko ja \otimes jokin jatkuva t -normi. Binäärinen kuvaus $\text{sim} : A^2 \rightarrow [0,1]$ on joukossa A määritelty sumea samuus (samanlaisuus, engl. similarity), jos jokaiselle alkion $a, b, c \in A$ pätee

- (i) $\text{sim}(a, a) = 1$ (kaikki alkiot ovat täysin samanlaista itsensä kanssa),
- (ii) $\text{sim}(a, b) = \text{sim}(b, a)$ (samuus on symmetristä),
- (iii) $\text{sim}(a, b) \otimes \text{sim}(b, c) \leq \text{sim}(a, c)$ (samuus on heikosti transitiivista).

[135]

Harjoitustehtävänä on todistaa, että sumea samuus on ekvivalenssirelaation yleistys. Valitsemalla operaatioksi \otimes Lukasiewicz-tulo saadaan sovellusten kannalta seuraava keskeinen tulos, jonka todistus jätetään lukijalle vaativaksi harjoitustehtäväksi.



Kuva 5.12. Jäsenyysfunktio.

LAUSE 5.1

- (i) Jokainen joukossa A määritelty sumea joukko (jäsenyyshank-
tiona μ) määrittelee ehdolla $\forall a, b \in A : \text{sim}_\mu(a, b) = 1 - |\mu(a)$
 $- \mu(b)|$ sumean samuuden joukossa A .
- (ii) Jos erikoisesti $\mu(b) = 1$, niin $\forall a \in A$ pätee $\text{sim}_\mu(a, b) = \mu(a)$.
- (iii) Jos $\text{sim}_1, \dots, \text{sim}_n$ ovat joukossa A määriteltyjä sumeita sa-
muuksia, niin myös kaikki niiden painotetut keskiarvot – ko-
konaissimilaarisuudet – ovat joukossa A määriteltyjä sumeita
samuuksia.

Lause 5.1 pätee vain, kun jatkuvana t -normina \otimes on Lukasiewicz-tulo (tai jokin sen kanssa isomorfinen jatkuva t -normi). Kohdasta (i) nähdään, että sumea samuus on tällöin eräänlainen etäisyyden komplementti. Sumeiden päättelyjärjestelmien ytimenä on muotoa

Sääntö 1: JOS x_1 on A_{11} ja x_2 on A_{12} ja ... ja x_n on A_{1n} NIIN y on B_1

Sääntö 2: JOS x_1 on A_{21} ja x_2 on A_{22} ja ... ja x_n on A_{2n} NIIN y on B_2

⋮

Sääntö m : JOS x_1 on A_{m1} ja x_2 on A_{m2} ja ... ja x_n on A_{mn} NIIN y on B_m

[136]

olevia JOS-NIIN-päätelysääntöjä. Joukot A_{ij} ja B_k ovat sumeita joukkoja, joihin syötteet x_i ja vasteet y kuuluvat eri jäsenyyssasteilla. Säännöt voivat olla asiantuntijan antamia, ne on voitu saada tiedonlouhinnan, geneettisten algoritmien tai neuroverkkojen avulla tai jollakin muulla tavoin.

Algoritmi moniarvoisen päättelyn toteuttamiseksi

- (1) Muodosta JOS-NIIN-säännöt, jotka kuvaavat päättelyn dynamiikan.
- (2) Anna kriteeri, jonka mukaan säännöt voidaan laittaa tärkeysjärjestykseen.
- (3) Määrittele säännöissä ilmenevät sumeat joukot.
- (4) Anna sääntöjen osille tarvittavat painot.
- (5) Anna kriteerit, joilla kunkin NIIN-osan samanasteiset vasteet voidaan asettaa tärkeysjärjestykseen.

Moniarvoisessa päättelyssä intuitiivisena ajatuksena on toteuttaa kussakin tilanteessa kokonaissimilaarisin vaihtoehto. Käytännössä tämä tapahtuu siten, että lasketaan ensin syötevektorin $X = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ kokonaissimilaarisuuden aste a_i kunkin säännön i JOS-osan kanssa – lauseen 5.1 kohdan (ii) perusteella riittää laskea painotettuja keskiarvoja – ja merkitään $a = \max\{a_1, a_2, \dots, a_m\}$. Toteutetaan sitten se NIIN-osa j asteella a , jolle $a_j = a$. Jos mahdollisuuksia on useita, käytetään algoritmin kohtia 2 ja 5.

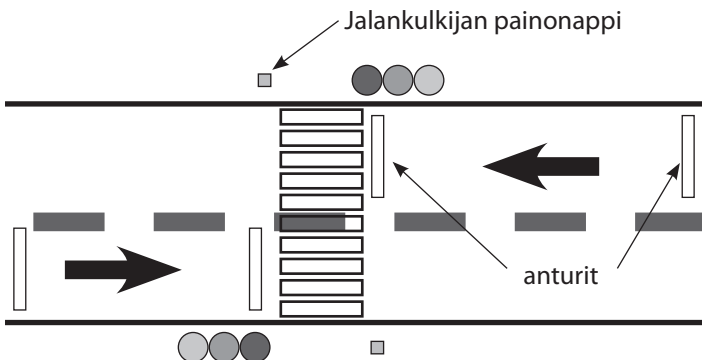
Algoritmi on ydin, jota eri sovelluksissa voi täydentää. Osoitteesta <http://matriisi.ee.tut.fi/~eturunen> voi ladata Maple-koodin, johon algoritmi on implementoitu. Jos algoritmissa korvataan kohdat (2) ja (5) *täsmäntämismenetelmän* (defuzzyfication) valinnalla, puhutaan *sumeasta päättelystä*. Matlab-ohjelmiston *Fuzzy Logic Toolboxin* avulla voi sumeita päättelyjärjestelmiä rakentaa vaivatta: pienellä vaivannäöllä sillä voi konstruoida algoritmin mukaisen moniarvoisen päättelykoneenkin.

Ero sumean päättelyn ja moniarvoisen päättelyn välillä on siinä, että sumeassa päättelyssä vaste lasketaan erilaisia tekniikoita käyttäen useiden sääntöjen avulla, mutta moniarvoisessa päättelyssä vasteen määrää yksi asiantuntijan antaman kriteerin mukaan määräytyvä sääntö.

ESIMERKKI 5.6

Tarkastellaan kuvan 5.13 mukaista liikennevalojärjestelmää. Autoilijoilla on vihreä valo niin kauan kuin jalankulkijoita ei ole ylittämässä katua. Kun jalankulkija painaa nappia pyrkimyksensä ylittää katu, syntyy päätöksentekotilanne: muuttaako autoilijoiden valo punaiseksi vai antaa jalankulkijan odottaa hetken. Tiessä olevien antureiden avulla tiedetään, kuinka monta autoa on lähestymässä liikennevaloja ja mikä on niiden välinen etäisyys. Asiantuntijan kokemuksen mukaan

[137]



Kuva 5.13. Liikennevalojärjestelmä.

- (1) jalankulkijoita ei saa seisottaa liian pitkään, sillä odotetaan tovin jalankulkija luulee, etteivät valot toimi ja lähtee ylittämään katua päin punaista aiheuttaen näin vaaratilanteen
- (2) autojonoja ei saa katkaista keskeltä: varovainen ajaja edessä saattaa keltaisen valon syttyessä painaa jarrua, mutta takana tuleva uhkarohkea kuljettaja taas painaa kaasua, jolloin syntyy mahdollisuus peräänajoon.

Siten – asiantuntijan mukaan – vaikuttavia tekijöitä päätöksenteossa (eli vaihdetaanko autoilijan vihreä valo punaiseksi) on kolme: (1) autojen lukumäärä: *vähän, muutamia* tai *monta*, (2) kahden auton pienin etäisyys: *suuri* tai *pieni* ja (3) jalankulkijoiden odottama aika: *lyhyt, pitkä* tai *liian pitkä*. Näiden sumeiden käsitteiden eli sumeiden joukkojen avulla asiantuntija alkaa muodostaa päättelysääntöjä eli algoritmin askeleen 1 mukaisia JOS-NIIN-sääntöjä, joista tässä muutama esimerkki:

Sääntö 1: JOS odotusaika on lyhyt JA autoja on muutamia JA etäisyys on pieni NIIN autoilijoille väri on vihreä

⋮

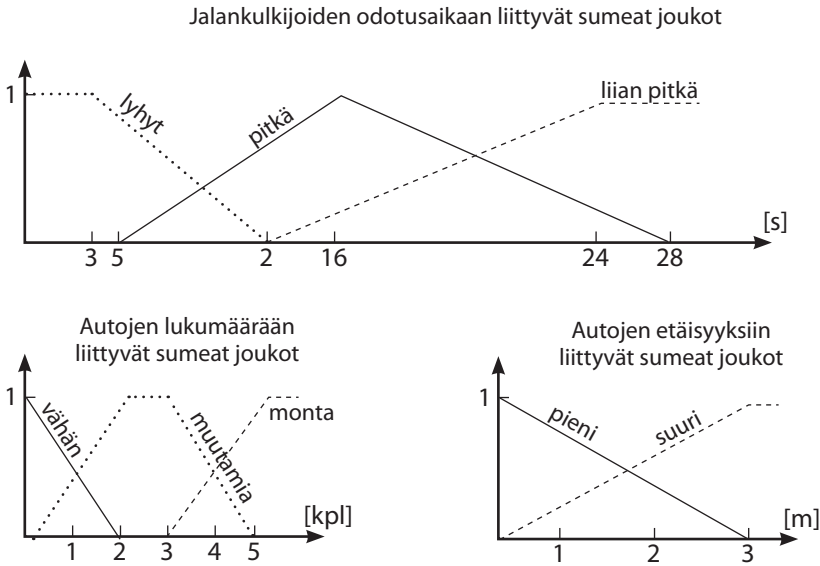
Sääntö 12: JOS odotusaika on pitkä JA autoja on muutamia JA etäisyyden suuri NIIN autoilijoille väri on punainen

⋮

Sääntö 18: JOS odotusaika on liian pitkä JA autoja on monta JA etäisyys on pieni NIIN autoilijoille väri on punainen.

Täydellisessä sääntökannassa on $3 \times 2 \times 3 = 18$ sääntöä, mutta sääntökanta voi myös olla *epätäydellinen* eli sääntöjä ei ole täyttä määrää ja silti päättelyjärjestelmä toimii. Tämä on moniarvoisen ja sumean päättelyn vahvuus. Välttämätön edellytys tietenkin on, ettei sääntökanta ole siinä mielessä *ristiriitainen*, että samaa JOS-osaa seuraa kahdessa säännössä eri NIIN-osat.

Vastaten algoritmin askelia 2 ja 5 asiantuntija päättää olla autoilijamyönteinen: ne säännöt, joiden NIIN-osana on autoilijoille vihreä väri, ovat 50–50-tilanteessa etusijalla. Vastaten algoritmin askelta 4 asiantuntija painottaa autojen lukumäärää yhtä paljon kuin jalankulkijoiden odotusaikaa ja autojen etäisyyksiä yhteensä eli painot ovat jalankulkijoiden odotusajalle 1, autojen lukumäärälle 2 ja autojen pienimmälle etäisyydelle 1. Algoritmin askeleen 3 mukaisesti asiantuntija antaa sumeille joukoille muodot, jotka on esitetty kuvassa 5.14.



Kuva 5.14. Sumeiden joukkojen muodot.

[139]

Moniarvoinen päättelykone on nyt valmis. Konkreettinen liikennetilanne päivittyy sekunnin välein. Tarkastellaan esimerkkinä tilannetta, jossa autoilla on vihreä valo ja jossa

1. jalankulkija on odottanut 14 sekuntia (syötevektorin ensimmäinen komponentti $x_1 = 14$ s)
2. saapuvien autojen lukumäärä on 4 (syötevektorin toinen komponentti $x_2 = 4$ kpl)
3. autojen lyhin etäisyys on 2 metriä (syötevektorin kolmas komponentti $x_3 = 2$ m).

Syötevektorina on $X = (14 \text{ s}, 4 \text{ kpl}, 2 \text{ m})$. Lasketaan kokonaissimilaarisuus $\text{SIM}(X, \text{Sääntö } i)$ erikseen jokaisen säännön ($i = 1, \dots, 18$) JOS-osalle:

$$\begin{aligned} \text{SIM}(X, \text{sääntö1}) &= \frac{1}{4} [1 \cdot \text{sim}_{\text{lyhyt}}(14 \text{ s, lyhyt}) + 2 \cdot \text{sim}_{\text{muutama}}(4 \text{ kpl, muutama}) \\ &\quad + 1 \cdot \text{sim}_{\text{pieni}}(2 \text{ m, pieni})] \\ &= \frac{1}{4} [\mu_{\text{lyhyt}}(14 \text{ s}) + 2 \cdot \mu_{\text{muutama}}(4 \text{ kpl}) + \mu_{\text{pieni}}(2 \text{ m})] \\ &= \frac{1}{4} \left[0 + 2 \cdot \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \right] = \frac{3}{8}, \end{aligned}$$

:

$$\begin{aligned} \text{SIM}(X, \text{sääntö12}) &= \frac{1}{4} [1 \cdot \text{sim}_{\text{pitkä}}(14 \text{ s, pitkä}) + 2 \cdot \text{sim}_{\text{muutama}}(4 \text{ kpl, muutama}) \\ &\quad + 1 \cdot \text{sim}_{\text{suuri}}(2 \text{ m, suuri})] \\ &= \frac{1}{4} [\mu_{\text{pitkä}}(14 \text{ s}) + 2 \cdot \mu_{\text{muutama}}(4 \text{ kpl}) + \mu_{\text{suuri}}(2 \text{ m})] \\ &= \frac{1}{4} \left[\frac{3}{4} + 2 \cdot \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \right] = \frac{9}{16}, \end{aligned}$$

:

$$\begin{aligned} \text{SIM}(X, \text{sääntö18}) &= \frac{1}{4} [1 \cdot \text{sim}_{\text{liian_pitkä}}(14 \text{ s, liian_pitkä}) + 2 \cdot \text{sim}_{\text{monta}}(4 \text{ kpl, monta}) \\ &\quad + 1 \cdot \text{sim}_{\text{pieni}}(2 \text{ m, pieni})] \\ &= \frac{1}{4} [\mu_{\text{liian_pitkä}}(14 \text{ s}) + 2 \cdot \mu_{\text{monta}}(4 \text{ kpl}) + \mu_{\text{pieni}}(2 \text{ m})] \\ &= \frac{1}{4} \left[\frac{1}{10} + 2 \cdot \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \right] = \frac{16}{40} = \frac{2}{5}. \end{aligned}$$

[140]

Jos sääntökantaan otetaan vain säännöt 1, 12 ja 18, liikennetilanne $X = \langle 14 \text{ s, } 4 \text{ kpl, } 2 \text{ m} \rangle$ muistuttaa eniten sääntöä 12, sillä suurin kokonaissimilaarisuuden aste on $\text{SIM}(X, \text{sääntö12}) = \frac{9}{16}$. Toteutetaan siis säännön 12 JOS-osa, joka on *punainen valo autoilijoille*. (Määrätyn ajan kuluttua valo vaihtuu autoilijoille vihreäksi ja tilanne alkaa alusta.¹⁵)

Algoritmi moniarvoisen päättelykoneen rakentamiseksi on erittäin yksinkertainen ja helppo toteuttaa. Sen matemaattisena pohjana on hyvin määritelty, ominaisuuksiltaan tunnetun Lukasiewicz'in moniarvologiikka. Jokaisessa päätöksentekotilanteessa, jossa mahdollisia päätöksiä on useita, päätös perustuu vain kokonaissimilaarisuuteen ja asiantuntijan antamaan perusteltuun kriteeriin (vrt. Mamdani- ja Sugeno-tyyppiset sumeat päättelykoneet Matlabin Fuzzy Logic Toolboxissa, joissa tarvitaan teknisiä, mahdollisesti puutteellisesti perusteltuja täsmennysmenetelmiä). Toisaalta moniarvoisen mallin rakentaminen on työläämpää kuin sumean mallin rakentaminen. Algoritmin rajoituksena on, että ilmiötä, jota halutaan mallintaa, pitää voida luotettavasti hallita enintään muutamalla kymmenellä JOS-NIIN-säännöl-

¹⁵ Kyseinen järjestelmä – ja monia monimutkaisempia – on kehitetty TKK:n liikennelaboratoriossa ja on käytössä useissa pääkaupunkiseudun liikennevaloissa.

lä. Malli toimii, vaikka sääntökanta olisi epätäydellinen. Toisaalta jokainen puuttuva sääntö tietysti vähentää päättelyn luotettavuutta.

Harjoitustehtäviä

41. Osoita, että sekä Lukasiewicz-, Gödel- että tuloalgebra ovat joukon $\{0,1\}$ Boolean algebran yleistyksiä, ts. jos arvot a ja b kuuluvat joukkoon $\{0,1\}$, saadaan klassisen logiikan totuus-
taulut.
42. Klassisessa logiikassa pätevät *de Morganin lakien* nimellä kulkevat yhtälöt
 - (a) $a \text{ JA } b = \text{EI}-(\text{EI}-a \text{ TAI } \text{EI}-b)$,
 - (b) $a \text{ TAI } b = \text{EI}-(\text{EI}-a \text{ JA } \text{EI}-b)$.

Pätevätkö nämä yhtälöt myös kaikissa sumean logiikoissa?

43. Osoita, ettei Gödel- eikä tuloalgebrassa ole voimassa kaksois-negaation laki.
44. Oletetaan, että Pekka kuuluu *laihojen miesten joukkoon* jäsenyysasteella 0.9. Olkoon *lihavien miesten joukon* jäsenyysfunktio laihojen miesten jäsenyysfunktion komplementti. Millä jäsenyysasteella Pekka kuuluu lihavien miesten joukkoon (a) Lukasiewicz-logiikassa, (b) Gödel-logiikassa, (c) tulo-logiikassa? Oletetaan edelleen, että Pekka kuuluu *pitkien miesten joukkoon* jäsenyysasteella 0.8. Jos *isot miehet* ovat *pitkiä tai lihavia*, niin millä jäsenyysasteella Pekka kuuluu isojen miesten joukkoon (d) Lukasiewicz-logiikassa, (e) Gödel-logiikassa, (f) tulo-logiikassa? Jos *massiiviset miehet* ovat *pitkiä ja lihavia*, niin millä jäsenyysasteella Pekka kuuluu massiivisten miesten joukkoon (g) Lukasiewicz-logiikassa, (h) Gödel-logiikassa, (i) tulo-logiikassa?
45. Toista edellisen tehtävän tarkastelut Pätkälle, joka kuuluu *laihojen miesten joukkoon* jäsenyysasteella 0.1 ja *pitkien miesten joukkoon* jäsenyysasteella 0.2.
46. Olkoon \otimes jokin tulo-operaatio ja \rightarrow sitä vastaava jäännösopeeraatio. Osoita, että asettamalla $\text{sim}(x, y) = \min\{a \rightarrow b, b \rightarrow a\}$ saadaan sumea samuus.

47. Tarkastellaan seuraavaa YK-tilastoa vuodelta 1999

Valtio	BKT	pinta-ala	asukas	syntyv	lapsik	elinikä	> 65 %	lukutaito-%	puhelin	auto
Suomi	18;2	130;1	5;1	11	5	74	14	100	1;8	2;7
Tanska	21;7	16;6	5;3	12	5	74	15	100	1;6	3;1
Belgia	19;5	11;8	10;2	12	6	74	16	99	2;2	2;4
Ranska	18;7	210;0	58;0	11	6	75	16	99	2;8	2;4
Italia	18;7	116;3	57;5	10	7	75	17	97	2;3	1;9
Espanja	14;3	195;4	39;2	10	6	75	16	97	2;6	2;8
Slovakia	7;2	18;9	5;4	13	11	69	11	100	4;8	5;4
Bulgaria	4;9	42;9	8;7	8	15	67	16	98	3;3	5;4
Romania	4;6	92;0	21;4	10	23	66	13	97	7;6	10;7
Kolumbia	5;3	440;8	37;4	21	25	70	5	91	10;0	32;5
Tansania	0;8	364;0	29;5	41	105	40	3	68	328;0	589;0
Nepal	1;2	56;8	22;6	37	77	54	3	28	276;0	> 1000

[142]

- BKT = bruttokansantuote 1 000 \$/asukas,
- pinta-ala = pinta-ala tuhansissa neliömaileissa,
- asukas = asukasmäärä miljoonissa,
- syntyv = syntyneiden lasten lukumäärä vuodessa 1 000 asukasta kohti,
- lapsik = alle 1-vuotiaina kuolleiden lasten määrä syntynyttä 1 000 lasta kohti,
- elinikä = syntyneen poikalapsen odotettavissa oleva elinikä,
- +65 % = yli 65-vuotiaiden %-osuus väestöstä,
- lukutaito-% = aikuisväestön lukutaito%,
- puhelin = 1 puhelin × asukasta kohti,
- auto = 1 henkilöauto × asukasta kohti.

- (a) Esitä kukin sarake sumeana joukkona; jäsenyysfunktiot saat esimerkiksi *skaalaamalla*.
- (b) Mitä ovat vastaavat sumeat samanlaisuusrelaatiot?
- (c) Muodosta jokin kokonaissimilaarisuuden lauseke ja etsi toinen maa, joka tämän tilaston valossa muistuttaa eniten (i) Tanskaa, (ii) Ranskaa, (iii) Slovakiaa, (iv) Nepalia.

Kirjallisuutta

- [1] J. T. Alander. Geneettisten algoritmien mahdollisuudet. TEKES teknologiakatsaus 59, 1998. 100 p., <ftp://garbo.uwasa.fi/cs/GA/>
- [2] H. Anton and C. Rorres. *Elementary linear algebra. Applications version*. Wiley, 6th edition, 1991.
- [3] M. H. Bornstein and H. G. Bornstein. The pace of life. *Nature*, 259:557–559, 1976.
- [4] R. L. Burden and J. D. Faires. *Numerical analysis*. Brooks/Cole, 6th edition, 1997.
- [5] E. Chew and P. Greenspun. Is suicide at MIT a Poisson process? <http://philip.greenspun.com/research/suicide-at-mit.pdf>.
- [144] [6] P. Craven. Google's PageRank explained and how to make the most of it. <http://www.webworkshop.net/pagerank.html>.
- [7] E. A. Eiben and J. E. Smith. *Introduction to evolutionary computing*. Springer, 2003. <http://www.cs.vu.nl/gusz/ecbook/ecbook.html>.
- [8] Evoweb – European network of Excellence in Evolutionary Computing. <http://evonet.lri.fr/>.
- [9] K. R. Gabriel and J. Neumann. A Markov chain model for daily rainfall occurrence at Tel Aviv. *Quart. J. R. Met. Soc.*, 88:90–95, 1962.
- [10] F. R. Giordano, M. D. Weir, and W. P. Fox. *A first course in mathematical modeling*. Brooks/Cole, 2nd edition, 1997.
- [11] J. Haataja. *Optimointitehtävien ratkaiseminen*. CSC – Tieteellinen laskenta Oy, 3. uudistettu painos, 2004. <http://www.csc.fi/csc/julkaisut/oppaat/optimointi>.
- [12] P. Hájek. *Metamathematics of fuzzy logic*. Kluwer, 1998.

-
- [13] P. Hájek and T. Havranek. *Mechanising hypothesis formation. Mathematical foundations for a general theory*. Springer, 1978.
- [14] S. Haykin. *Neural networks, a comprehensive foundation*. Macmillan, 1999.
- [15] C. D. Hodgman. *Handbook of chemistry and physics*. Chemical Rubber Publ. Co., 1954.
- [16] L. Hogben, editor. *Handbook of linear algebra*. Chapman & Hall, 2007.
- [17] R. A. Horn and C. R. Johnson. *Matrix analysis*. Cambridge University Press, 1985. Reprint 1996.
- [18] D. Kincaid and W. Cheney. *Numerical analysis*. Brooks/Cole, 2nd edition, 1996.
- [19] T. Kohonen. *Self-organizing maps*. Springer, 1995.
- [20] A. N. Langville and C. D. Meyer. The use of linear algebra by web search engines. *Image. The Bulletin of the International Linear Algebra Society*, 33:2–6, 2004. <http://www.math.technion.ac.il/iic/IMAGE/>. [145]
- [21] Markov chain. <http://en.wikipedia.org/wiki/>.
- [22] The mathworks: Genetic algorithm toolbox. <http://www.mathworks.com/products/gads/>.
- [23] S. Mustonen. *Survo ja minä*. Survo Systems, 1996.
- [24] The Oxford and Cambridge boat race. <http://www.theboatrace.org/>.
- [25] S. M. Ross. *Introduction to probability models*. Academic Press, 7th edition, 2000.
- [26] Runge's phenomenon. <http://en.wikipedia.org/wiki/>.
- [27] B. Schmuland. Shark attacks and the Poisson approximation. <http://www.stat.ualberta.ca/people/schmu/pre-prints/poisson.pdf>.

- [28] J. Stoer and R. Bulirsch. *Introduction to numerical analysis*. Springer, 1980.
- [29] E. Turunen. Asiantuntijan ajattelun mallintaminen sumean logiikan avulla. ladattavissa osoitteesta <http://www.mi.helsinki.fi/MALU/sumea>.
- [30] E. Turunen. *Mathematics behind fuzzy logic*. Springer, 1999.
- [31] G. Williams. *Computational linear algebra with models*. Allyn & Bacon, 2nd edition, 1978.
- [32] Yleisurheilun maailmanennätykset. <http://fi.wikipedia.org/wiki/>.

6

Dimensioanalyysi¹

TIMO TIIHONEN

6.1 Johdanto

[147]

Tarkastellaan systeemiä, jonka käyttäytymisestä on teoreettista tietoa tai ainakin oletuksia. Tämä tieto jäsenyy erilaisiksi ilmiöiksi ja suureiksi ja näiden vuorovaikutuksiksi, mutta välttämättä ei ole käytettävissä eksplisiittisiä yhtälöitä, joilla kuvata kaikkia vuorovaikutuksia. Tällöin dimensioanalyysi voi auttaa eteenpäin ja tekemään teoriasta eksplisiittistä.

Tarkastellaan esimerkkinä yksinkertaista heiluria. Tavoitteena on mallintaa heilahdusaika P muiden vaikuttavien suureiden avulla. Oletetaan, että heilahdusaikaan vaikuttavat vain heilurin massa m , varren pituus l ja gravitaatiokiihtyvyys g . (Milloin oletus kuvaa todellista tilannetta on sitten oma kysymyksensä.)

Oletuksen mukaan heilahdusajalle pätee

$$P = f(m, l, g),$$

missä f on jokin kolmen tuntemattoman reaaliarvoinen funktio. Voidaan-ko f :n rakenteesta saada jollakin tavalla tarkempaa tietoa?

Tarkastellaan tilannetta esimerkiksi SI-järjestelmässä, jossa massan, ajan ja pituuden yksiköt ovat kg, s, ja m. Gravitaatiokiihtyvyys on SI-yksiköissä m/s^2 . Vaihdamme nyt perussuurejärjestelmää niin, että perussuureiden mittayksiköiksi tulee μkg , λm ja τs , missä λ , μ ja τ ovat positiivisia. Tällöin

¹ Tämä luku on tiivistelmä Veli-Matti Hokkasen ja Eero Sarkkisen artikkelista sekä Veli-Matti Hokkasen luentomateriaaleista.

mallin jokaisen suureen mittalukua on skaalattava vastaavasti. Toisaalta heilurin käyttäytyminen ei riipu valituista mittayksiköistä, joten oletuksen mukaan yhtälö on voimassa myös muunnetussa suurejärjestelmässä. Siis

$$\tau^{-1}P = f(\mu^{-1}m, \lambda^{-1}l, \lambda^{-1}\tau^2g).$$

Tämän tulee olla voimassa kaikille λ :n, μ :n, ja τ :n arvoille. Valitaan nyt $\mu = m$, $\lambda = l$ ja $\tau = \sqrt{l/g}$, jolloin

$$P\sqrt{\frac{g}{l}} = f(1, 1, 1) = C,$$

jossa C on jokin vakio. Siten $P = C\sqrt{l/g}$ eli $f(m, l, g) = C\sqrt{l/g}$. Tuntematon kolmen muuttujan funktio redusoituu siis eksplisiittiseen funktioon, jossa on yksi määräämätön vakio. Tämän vakion määrittämiseksi riittää periaatteessa yksi koe yhdelle heilurille, minkä jälkeen heilahdusaika tunnetaan kaikille heilureille. Heilurin liikeyhtälöjen muotoilua, ratkaisemisesta puhumattakaan, ei siis tarvittu ollenkaan. (Niitä voidaan kyllä tarvita, kun pyritään arvioimaan, ovatko oletukset oikeita, eli kun esimerkiksi arvioidaan, pitäisikö amplitudi tai ilmanvastus huomioida heilahdusaikaan vaikuttavina tekijöinä.)

[148]

6.2 Dimensio

Edellä esitetty heiluri oli esimerkki mekaanisesta systeemistä, jonka kuvaamiseen tarvittiin kolmea perussuureta, massaa M , pituutta L ja aikaa T . Nämä muodostavat (yhden mahdollisen) perussuurejärjestelmän. Koulufysiikassa (ja osin matematiikassakin) opetetaan tarkistamaan kaavoja ja ratkaisuja vertaamalla yhtälön oikean ja vasemman puolen yksiköitä toisiinsa. Tätä menettelyä voidaan formalisoida ottamalla käyttöön dimension käsite.

Jokaisella mekaniikan teoriassa esiintyvällä suureella on perussuureiden avulla ilmoitettava yksikkö. Yksiköt ovat itse asiassa aina perussuureiden potenssituloja. Kuvausta, joka kuvaa suureen s suureen dimensiolle $[s]$ sanotaan dimensiokuvaukseksi. Esimerkiksi nopeudelle v , $[v] = M^0L^1T^{-1}$.

Yleisimmin käytettyjä mekaniikan suureita on esitetty taulukossa 6.1. Oletetaan yleisemmin, että on johonkin teoriaan liittyvä suurejärjestelmä, jossa perussuureet ovat M_1, \dots, M_m ja S on jokin suure, jonka mittaluvulle pätee $S = f(M_1, \dots, M_m)$, missä $f: R_+^m \rightarrow R_+$. Järjestelmä toteuttaa niin sanotun Bridgmanin aksiooman, jos pätee, että suureen S kahden eri arvon

Taulukko 6.1. Yleisimmin käytettyjä mekaniikan suureita.

Suure	Dimensio	Perustelu
nopeus	$M^0 L^1 T^{-1}$	$v = l/t$
kiihtyvyyys	$M^0 L^1 T^{-2}$	$a = v/t$
voima	$M^1 L^1 T^{-2}$	$F = ma$
energia	$M^1 L^2 T^{-2}$	$W = \frac{1}{2}mv^2$
työ	$M^1 L^2 T^{-2}$	$W = Fl$
teho	$M^1 L^2 T^{-3}$	$P = W/t$
paine	$M^1 L^{-1} T^{-2}$	$p = F/l^2$

mittalukujen suhde ei muutu, kun kunkin perussuureen M_i mittayksikkö vaihdetaan λ_i^{-1} -kertaisiksi. Toisin sanoen

$$\frac{S}{S'} = \frac{f(M_1, \dots, M_m)}{f(M'_1, \dots, M'_m)} = \frac{f(\lambda_1 M_1, \dots, \lambda_m M_m)}{f(\lambda_1 M'_1, \dots, \lambda_m M'_m)}.$$

[149]

Kaikki suurejärjestelmät eivät toteuta Bridgmanin aksioomaa. Esimerkkeinä voidaan mainita lämpötilalle yleisesti käytetyt Celsius- tai Fahrenheitasteikot tai signaalien voimakkuudelle käytettävät desibeliasteikot.

Niissä suurejärjestelmissä, jotka toteuttavat Bridgmanin aksiooman, suureiden dimensiot voidaan esittää aina perussuureiden potenssituloina. Toisin sanoen jokaiselle suureelle S on reaalityyppiset a_i siten, että

$$[S] = \prod_{i=1}^m M_i^{a_i}.$$

Dimensio kuvaukselle pätee $[S^a R^b] = [S]^a [R]^b$ kaikille järjestelmän suureille S ja R sekä kaikille reaalityyppisille a, b . Reaalityyppisen C dimensio $[C] = 1 (= \prod_{i=1}^m M_i^0)$.

Tarkastellaan nyt erityisesti n suuretta X_1, \dots, X_n perussuurejärjestelmässä M_1, \dots, M_m . Matriisia A sanotaan suureiden X dimensiomatriisiksi, jos

$$\prod_{j=1}^m M_j^{a_{ij}} = [X_i], \quad i = 1, \dots, n.$$

Matriisin riveinä ovat siis suureiden dimensioissa esiintyvät eksponentit.

Dimensiomatriisin avulla on helppo kuvata ja hahmottaa tarkasteltavien suureiden dimensioita kompaktisti. Esimerkiksi, jos tarkastellaan

nopeutta v , kiihtyvyyttä a , liike-energiaa E ja painetta p , joiden dimensiot perussuurejärjestelmässä $\{M, L, T\}$ ovat $[v] = M^0 L^1 T^{-1}$, $[a] = M^0 L^1 T^{-2}$, $[E] = M^1 L^2 T^{-2}$ ja $[p] = M^1 L^{-1} T^{-2}$, näiden dimensiomatriisi voidaan kirjoittaa muodossa

A	M	L	T
v	0	1	-1
a	0	1	-2
E	1	2	-2
p	1	-1	-1

tai lyhyesti

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & -1 \\ 0 & 1 & -2 \\ 1 & 2 & -2 \\ 1 & -1 & -2 \end{pmatrix}.$$

[150]

6.3 Dimensiottomat luvut ja π -teoreema

Tarkastellaan edelleen suureita X_1, \dots, X_n perussuurejärjestelmässä M_1, \dots, M_m . Jos $n > m$, dimensiomatriisin A rivit eivät voi kaikki olla lineaarisesti riippumattomia. Tämä tarkoittaa käytännössä sitä, että A :n riveistä voidaan muodostaa ei-triviaaleja lineaarikombinaatioita, jotka antavat nollavektorin. Toisin sanoen suureista X_i voidaan muodostaa potenssituloja, jotka ovat dimensiottomia. Itse asiassa samanaikaisesti voidaan muodostaa $n-r$ riippumatonta dimensiota potenssituloa (dimensiotonta lukua), missä r on matriisin A aste (korkeintaan m).

Dimensioanalyysin tärkein tulos on Buckinghamin π -teoreema:

LAUSE 6.1

[Buckinghamin π -teoreema.] Olkoot M_1, \dots, M_m teorian perussuureita ja X_1, \dots, X_n näiden avulla määriteltyjä suureita, joille on olemassa dimensio-kuvaus. Merkitään r :llä vastaavan dimensiomatriisin astetta ja $p = n - r$. Olkoon nyt annettu funktio $f: R_+^n \rightarrow R$. Tällöin on olemassa p riippumatonta potenssituloa π_1, \dots, π_p ja kuvaus $F: R_+^p \rightarrow R$ siten, että suureet X_1, \dots, X_n toteuttavat dimensiohomogeenisen yhtälön

$$f(X_1, \dots, X_n) = 0$$

täsmälleen silloin kun

$$F(\pi_1, \dots, \pi_p) = 0.$$

Jos $r < n$ ja $f(\cdot, X_2, \dots, X_n)$ on injektio ja X_1 esiintyy potenssitulossa π_1 , niin $F(\cdot, \pi_2, \dots, \pi_p)$ on injektio. Jos $r = n$, suureet X_i eivät riipu toisistaan.

Sovelletaan aluksi π -teoreemaa alussa esitettyyn heiluriesimerkkiin. Perussuurejärjestelmä on $\{M, L, T\}$ ja tarkasteltavat suureet P, l, m ja g , joita oletetaan sitovan dimensiohomogeeninen yhtälö $f(P, m, l, g) = 0$ niin, että P on periaatteessa ratkaistavissa (eli f on injektio P :n suhteen). Dimensiomatriisi on

A	M	L	T
P	0	0	1
m	1	0	0
l	0	1	0
g	0	1	-2

Koska matriisin aste on 3, on olemassa tasan yksi ($4 - 3 = 1$) dimensioton potenssitulo π_1 siten, että pätee $F(\pi_1) = 0$. Potenssitulo on muotoa $\pi_1 = \prod_{i=1}^4 X_i^{k_i}$, missä vektorin k on toteutettava yhtälö $kA = 0$ (eli $A^t k^t = 0$). Tällaiset vektorit voidaan kirjoittaa muodossa $k = \lambda(2, 0, -1, 1)$. Toisin sanoen voimme valita $\pi_1 = P^2 l^{-1} g^1$. (Toki myös valinta π_1^λ olisi mahdollinen kaikille $\lambda > 0$.)

[151]

Nyt, koska pätee $F(\pi_1) = 0$ ja F on injektio, on π_1 :n oltava vakio. Tällöin P voidaan ratkaista, koska se esiintyy potenssitulossa π_1 . Näin saadaan tuttu lauseke heilahdusajalle. Vastaavalla tavalla voitaisiin ratkaista heilurin pituus tai gravitaatiovakio muiden parametrien funktiona π_1 :stä. Sen sijaan massalle m ei saada lauseketta, koska se ei esiinny dimensiottomassa potenssitulossa.

Jos tarkasteluun lisätään uusia ilmiöitä ja näihin liittyviä suureita, suureiden määrä kasvaa ja samoin tekee mahdollisten dimensiottomien lukujen määrä. Jos esimerkiksi oletetaan, että heilurin amplitudi a , jonka dimensio on $[a] = M^0 L^1 T^0$ vaikuttaa myös systeemin käyttäytymiseen, saadaan tulokseksi, että $F(\pi_1, \pi_2) = 0$, jossa uusi dimensioton luku on esimerkiksi $\pi_2 = a/l$. Tällöin π_1 ei enää ole globaalisti vakio, vaan pätee $\pi_1 = \phi(\pi_2)$. Toisin sanoen heilahdusaika on mitattava jokaiselle amplitudille erikseen tai mallinnettava hyödyntäen syvällisempää tietämystä systeemin käyttäytymisestä – tässä tapauksessa mekaniikan lakeja ja yhtälöitä.

Edellisestä voidaan päätellä, että dimensioanalyysin tulokset ovat vahvimpia, jos tarkasteltavia suureita on yksi enemmän kuin perussuureita. Toisaalta tarkasteltavia suureita ei voi jättää pois, jos niillä on todellista

vaikutusta tutkittavaan ilmiöön. Sen sijaan joskus on mahdollista laajentaa perussuurejärjestelmää mielekkäästi niin, että dimensioanalyysin tulos tarkentuu.

Tarkastellaan esimerkkinä kapillaari-ilmiötä. Olkoon r ohuen putken säde. Putki on alapäästään nesteessä, jonka tiheys on ρ ja pintajännitys γ . Pyritään mallintamaan kapillaaripinnan nousukorkeus h , kun nesteeseen kohdistuu gravitaatiovoima g . Systeemin dimensiomatriisi on perussuurejärjestelmässä

A	M	L	T
h	0	1	0
r	0	1	0
ρ	1	-3	0
γ	1	0	-2
g	0	1	-2

π -teoreeman avulla saadaan korkeudelle lauseke

$$[152] \quad h = r\phi\left(\frac{r^2\rho g}{\gamma}\right),$$

jossa $\phi: R_+ \rightarrow R_+$ on tuntematon funktio.

Tarkastellaan tilanteen geometriaa vähän yksityiskohtaisemmin ja jaetaan pituus pystysuoraan ja vaakasuoraan komponenttiin Z ja R . Nyt h ja g vaikuttavat Z -suunnassa. Putken säde r on puolestaan R -suuntainen, ρ sisältää sekä Z :n että R :n suuntaisia pituuksia. Pintajännitys γ edellyttää hieman pohdintaa. Viimekädessä pintajännitys kohdistaa nestepatsaaseen Z -suuntaisen voiman R -suuntaista pituusyksikköä kohti. Tällöin dimensiomatriisi saadaan muotoon

A	M	R	Z	T
h	0	0	1	0
r	0	1	0	0
ρ	1	-2	-1	0
γ	1	-1	1	-2
g	0	0	1	-2

Nyt π -teoreema antaa korkeuden lausekkeeksi

$$h = C \frac{\gamma}{g\rho r},$$

jossa C on jokin vakio. Tämä on huomattavasti yksityiskohtaisempi tulos kuin alkuperäinen lauseke, jossa esiintyi tuntematon funktio. Tulos ei kuitenkaan tarkentunut aivan itsestään vaan edellytti lisää tilanteen teoreettista ymmärrystä, jotta voimme jaotella voimien vaikutuksia pysty- ja vaakatasossa tavalla, joka ainakaan pintajännityksen osalta ei ollut aivan ilmeistä.

6.4 Esimerkkejä

Dimensioanalyysi ei millään tavalla rajoitu pelkästään fysiikkaan vaan sitä voi soveltaa kaikissa tieteissä, joissa on mittaluvuilla esitettäviä suureita ja näiden vuorovaikutuksia. Tarkastellaan esimerkkinä taloustieteellistä mallinnusta. Tehtailija olettaa (eli hänellä on teoria!), että betonin menekki V (tilavuusyksikköä aikayksikössä) riippuu vain tuotteen yksikköhinnasta p (euroa per tilavuusyksikkö), asuntolainojen korosta r (1/aikayksikkö), rakentamattomien tonttien pinta-alasta A ja asukkaiden kokonaistuloista S (euroa aikayksikössä). Siis $V = f(p, r, A, S)$.

[153]

Perussuureita ovat L , T ja R , missä R mittaa rahaa. Mallin dimensiomatriisi on tällöin

	L	T	R
V	3	-1	0
p	-3	0	1
r	0	-1	0
A	2	0	0
S	0	-1	1

Koska matriisissa on viisi riviä ja matriisin aste on kolme, voidaan löytää kaksi riippumatonta dimensiota potenssituloa, joiksi voidaan valita esimerkiksi

$$\pi_1 = \frac{Vp}{S} \quad \text{ja} \quad \pi_2 = \frac{p^2 r^2 A^3}{S^2}.$$

Betonin menekki esiintyy luvussa π_1 , joten se voidaan ratkaista, jolloin saadaan yhtälö

$$V = \frac{S}{p} \phi \left(\frac{p^2 r^2 A^3}{S^2} \right),$$

missä ϕ on tuntematon funktio, joka tulee selvittää esimerkiksi kokeellisesti.

Saatu tulos on yhtä luotettava kuin ne oletukset, joihin analyysi pohjautui. Jos kysyntään vaikuttaa muitakin tekijöitä, saatu kaava ei enää päde. Vastaavasti voimme pyrkiä arvioimaan tilannetta, jos esimerkiksi tonttimaata on riittävästi tarjolla ja voidaan olettaa, ettei sen saatavuus vaikuta menekkiin. Tällöin mallista poistuu yksi suure ja yksi π -luku, ja tulokseksi saadaan

$$V = C \frac{S}{p}.$$

Näin siis kysyntä kasvaa, jos tulot nousevat tai hinta laskee – korkotasolla ei puolestaan ole mitään vaikutusta.

[154]

Tärkeä dimensioanalyysin sovelluskohde on erilaisten mallikokeiden suunnittelu. Tällöin lähdetään liikkeelle todellisesta (tai mallinnettavasta) systeemistä ja pyritään muodostamaan toinen, helpommin käsiteltävä malli, jolle käyttäytyminen on samanlaista eli alkuperäisen systeemin ja mallin π -lukujen tulisi olla samat. Tähän voidaan pyrkiä muuttamalla mittakaavoja ja materiaaleja sopivasti. Aina tämä ei kuitenkaan ole mahdollista, sillä monimutkaisissa systeemeissä relevantteja π -lukuja on useita ja niiden yhtäaikainen yhteensovittaminen kahdelle eri tilanteelle ei käytännössä onnistu.

Tarkastellaan esimerkkinä laivan virtausvastusta. Merkitään laivan runkoon kohdistuvaa voimaa f :llä ja oletetaan, että se riippuu (tietyn muotoiselle laivan rungolle) laivan nopeudesta v , laivan pituusmittakaavasta d , syvyyksestä h , gravitaatiosta g , nesteen tiheydestä ρ ja kinemaattisesta viskositeetistä ν . Koska suureita on seitsemän ja perussuureita kolme, saamme neljä π -lukua, esimerkiksi d/h , vd/ν , v^2/gd ja $f/(\rho v^2 h d)$.

Jotta kahdessa mallikokeessa π -luvut olisivat samat, täytyy mallien ensinnäkin uida suhteessa yhtä syvällä, mikä on helppo järjestää. Maapallolla gravitaatio on oleellisesti vakio, joten myös suhteen v^2/d tulisi olla vakio. Toisaalta vd/ν :n tulee olla vakio. Jos nyt halutaan varioida d :n arvoa (mallin mittakaavaa), tulee myös viskositeettia muuttaa. Mallin ja pienoismallin viskositeeteille tulee päteä

$$\frac{\nu_m}{\nu_p} = \left(\frac{d_m}{d_p} \right)^{3/2}.$$

Jotta pienoismallikoe ($d_m \gg d_p$) onnistuisi, olisi löydettävä neste, jolle kinemaattinen viskositeetti on merkittävästi veden viskositeettia pienempi.

Tämä ei käytännössä onnistu, joten kokonaisvirtausvastusta ei voida mitata pienoismallia käyttäen.

Se osa virtausvastusta, joka ei liity viskositeettiin, voidaan mallintaa pienoismallin avulla. Kun luovutaan oletuksesta, että vd/ν :n tulisi olla vakio, muut π -luvut voidaan vakioida pienoismallille. Tällöin mallikokeista on kuitenkin pystyttävä erottamaan teoreettisesti viskositeetin aiheuttama virtausvastus, jolloin jäljelle jää vain kokeellisesti määrittävä ns. aaltovastus (eli energia/työ, joka menee aaltojen muodostamiseen).

6.5 Harjoitustehtäviä

1. Määrää kappaleeseen kohdistuvan voiman F ja kappaleen potentiaalienergian E dimensiot perussuurejärjestelmässä $\{M, L, T\}$, kun $E = mgh$ ja $F = mg$, missä h on korkeus maan pinnasta, m massa ja $g = 9,81 \text{ m/s}^2$.
2. Määrää voiman, potentiaalienergian ja massan dimensiot perussuurejärjestelmässä $\{F, L, T\}$, missä F vastaa voimaa ja massa on johdettu suure. Massan yksikölle saadaan yhtälöstä $F_g = mg$, $[m] = [F_g]/[g]$.
3. Tarkastellaan pitkän kaasukuplan nousua pystysuorassa nesteputkessa. Oletetaan neste ja kaasu kokoon puristumattomiksi ja homogeenisiksi ja että kitkalla (viskositeetillä) ei ole merkitystä. Tällöin kaasun nousunopeuden v voi olettaa riippuvan putken halkaisijasta d , gravitaatiosta g , kaasun tiheydestä ρ_k ja nesteen tiheydestä ρ_n , eli

$$v = f(d, g, \rho_k, \rho_n).$$

Määrää edellä mainittujen suureiden dimensiomatriisi perussuurejärjestelmässä $\{M, L, T\}$ ja hae matriisin avulla kaksi dimensiotonta lukua π_1 ja π_2 . Saatko näiden avulla uskottavan lausekkeen nousunopeudelle v ?

Kirjallisuutta

- [1] V.-M. Hokkanen ja E. Sarkkinen. Dimensioanalyysi – salatedettäkö? *Arkhimedes*, 37(1):40–53, 1985.

7

Differentiaaliyhtälömalleja

JUKKA TUOMELA

*Kuolan laskeumien laatu yhä tuntematon
Tutkijoilla vain erilaisia malleja
Otsikko Pohjolan Sanomissa 18.10.1988*

[157]

7.1 Johdanto

Yllä olevan otsikon perusteella sana malli ei ehkä herätä erityistä luottamusta suuren yleisön (tai toimittajien) keskuudessa. Mallinnus onkin terminä aika uusi, eikä siten ole ihme, ettei sen merkityksestä ole kovin selvää käsitystä. Tutkijat ovat toki aina tehneet (myös) mallinnusta sanan nykyisessä merkityksessä, mutta tuloksia ei ole kutsuttu malleiksi vaan vaikkapa laeiksi. Jos laskeumamalleja olisi sanottu laskeumalaeiksi, olisiko toimittaja kirjoittanut: Tutkijoilla on vain erilaisia lakeja? Joka tapauksessa malli-sana on tullut jäädäkseen, ja seuraavassa on tarkoitus esitellä tiettyä malliluokkaa, *differentiaaliyhtälömalleja*, ja hieman pohtia tällaisten mallien yleisiä ominaisuuksia. Differentiaaliyhtälömalleja on tapana luonnehtia sanomalla, että ne ovat

- *äärellisulotteisia*
- *deterministisiä* ja
- *sileitä*.

Jäljempänä selvitetään tarkemmin mitä näillä tarkoitetaan.

Differentiaaliyhtälömalleja sanotaan joskus myös *dynaamisiksi systeemeiksi*. Tällä viitataan siihen, että ilmiö, jota halutaan tutkia, muuttuu ajan funktiona. Tässä yhteydessä ei kuitenkaan ole tarpeen yrittää pohtia, miten laajasti tai suppeasti dynaamiset systeemit -termi pitäisi käsittää, vaan käytetään pelkästään (ehkäpä tylsempää) termiä differentiaaliyhtälömallit.

Ennen kuin päästään varsinaisiin yhtälöihin, tarkastellaan hieman millaisia prosesseja on tarkoitus mallintaa, ja millaisia ovat malleissa esiintyvät suureet.

7.1.1 Jatkuva vai diskreetti

Hyvin monissa malleissa voidaan ajatella, että suure, josta ollaan kiinnostuneita muuttuu jatkuvasti. Jatkuva-sana on tässä yhteydessä kuitenkin hieman harhaanjohtava. Sillä tarkoitetaan sitä, että suureen arvoja voidaan pitää reaalityyppinä, jotka puolestaan muodostavat ”jatkumon”. Esimerkiksi jos jonkin kappaleen lämpötila nousee arvosta T_0 arvoon T_1 niin ajatellaan, että lämpötila saa muutosprosessin aikana reaalityyppisiä arvoja; tämä ei tarkoita sitä, että lämpötila välttämättä olisi jatkuva funktio ajan suhteen.

[158] Samoin jos tarkastellaan jotakin virtapiiriä, (sähkö)virtaa pidetään ”jatkuvana” suureena. Mutta jos piirin kytkin suljetaan tai avataan tietyllä hetkellä, virta on funktiona epäjatkuva tällä hetkellä.

Jatkuvien suureiden ”vastakohtana” pidetään *diskreettejä* suureita. Tällä tarkoitetaan sitä, että on olemassa jokin pienin mahdollinen positiivinen suureen arvo ja kaikki mahdolliset arvot ovat tämän pienimmän arvon monikertoja. Esimerkiksi populaation koko on aina välttämättä kokonaisluku, samoin vaikkapa matkapuhelimien tuotantomäärät. Kvanttimekaniikassa sana kvantti viittaa juuri tällaiseen pienimpään yksikköön; fyysikot eivät kuitenkaan yleensä puhu diskreeteistä suureista vaan kvanttuneista suureista.

Jako diskreetteihin ja jatkuviin suureisiin ei tosin ole aina täysin selkeä: esimerkiksi populaation kokoa P voidaan hyvin pitää jatkuvana suureena, jos tyypilliset P :n arvot ovat riittävän isoja. Riippuu siis mallinnustilanteesta, onko mielekäästä käsitellä jotain suuretta jatkuvana vai diskreettinä.

Palataan sitten lämpötilaan. Jos oletetaan, että anturi mittaa lämpötilaa tietyssä paikassa, on luonnollista ajatella, että anturin antamat tulokset määrittelevät reaalityyppisen funktion $t \mapsto T(t)$ missä t on aika. Nyt voidaan edelliseen tapaan kysyä, onko aika jatkuva vai diskreetti suure. Tähänkään ei ole yksiselitteistä vastausta. Anturin tapauksessa voidaan fyysisesti ajatella, että aika on jatkuva suure, mutta jos mittaustulokset tallennetaan tiedostoon, silloin saadaan dataa vain tietyiltä ajan hetkiltä ja aika onkin siis diskreetti.

Signaalinkäsittelyssä ajan luonne on keskeisessä asemassa, ja täytyy siis huolellisesti erottaa tapaukset, joissa aika on diskreetti (digitaalinen signaali) ja jatkuva (analoginen signaali). Seuraavassa ei kuitenkaan puututa tähän vaan ajatellaan aikaa jatkuvana suureena, tai yleisemmin oletetaan, että ”aikakvantti” on riittävän pieni, jotta aikaa voidaan pitää jatkuvana suureena. Tällöin siis anturin mittaustuloksia voidaan pitää funktiona reaalityluulta (aika) positiivisille reaalityluille (jos lämpötila ilmaistaan Kelvineissä):

$$T : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}_+.$$

Lämpötilan tapauksessa yksi reaalityluku riittää ilmaisemaan halutun informaation. Yleensä kuitenkin tarvitaan vektoreita: esimerkiksi pistemassan paikan ilmaisemiseksi tarvitaan kolme koordinaattia, ja siten pistemassan liike määrittää vektoriarvoisen funktion

$$x : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^3, \quad x(t) = (x_1(t), x_2(t), x_3(t)).$$

Geometrisesti ajateltuna päädyimme siihen, että tarkasteltavaa ilmiötä kuvaa käyrä, jonka parametrina on aika. Lämpötilan tapauksessa ilmiön ”tila” määräytyy \mathbb{R}_+ :n pisteen avulla, siirtojohdon tilaa tietyssä pisteessä kuvaa virran ja jännitteen arvot, ja pistemassan paikkaa kuvaa \mathbb{R}^3 :n piste.

[159]

7.1.2 Äärellinen vai ääretön

Yleisesti ottaen, jos tarkasteltava ilmiö riippuu suureista y_1, \dots, y_n , niin systeemin tilaa kuvaa käyrä

$$y : \mathbb{R} \rightarrow \Omega \subset \mathbb{R}^n, \quad y(t) = (y_1(t), \dots, y_n(t)),$$

missä Ω kuvaa systeemin kaikkien mahdollisten tilojen joukkoa. Rajoitetaan jatkossa tapaukseen, jossa systeemin tilaa on mahdollista kuvata äärellisellä määrällä muuttujia, mutta ehkä on hyvä myös hiukan pohtia missä tilanteissa sitten tarvitaan ääretön määrä muuttujia.

Tarkastellaan esimerkiksi liuosta, jossa on useita keskenään reagoivia aineita. Kiinnostavat suureet ovat siis aineiden konsentraatiot, jotka muuttuvat ajan funktiona (usein myös liuoksen lämpötila on tärkeä). Mutta jos liuosta sisältävä astia on ”iso”, konsentraatio riippuu myös siitä missä kohtaa astiaa ollaan. Merkitään jonkin aineen konsentraatioita u :lla ja paikkakoordinaatteja x :llä. Jokaisella ajan hetkellä t_0 konsentraation jakauma $u(x, t_0)$ on siis x :n funktio. Intuitiivisesti on varsin selvää, että enemmän tai vähemmän mielivaltaisen funktion määrittämiseen tarvitaan ”ääretön määrä”

muuttujia. Yleensä kuitenkin ilmaistaan asia hieman toisin: konsentraation jakauma hetkellä t_0 kuuluu tiettyyn ääretönulotteiseen vektoriavaruuteen V . Jos tällöin edelleen halutaan tulkita u käyränä, voidaan kirjoittaa

$$t \mapsto u^t \in V, \quad \text{missä } u^t(x) = u(x, t).$$

Tällaisia systeemejä mallinnetaan *osittaisdifferentiaaliyhtälöillä*, joista kerrotaan muissa luvuissa.

Huomattakoon kuitenkin, että valinta äärellisen ja äärettömän välillä on myös mallinnuskysymys. Jos liuosesimerkin tapauksessa voidaan olettaa, että liuosta sekoitetaan hyvin, niin tällöin konsentraatiot ovat lähes vakioita x :n suhteen, jolloin niiden x riippuvuus voidaan unohtaa. Tätä approksimaatiota käytetään hyvin yleisesti kemiallisia reaktioita mallinnettaessa, joten ainakin joskus se antaa hyviä tuloksia.

7.1.3 Jatkuva vai epäjatkuva

[160]

Palataan vielä jatkuvuuteen, nyt siis siltä kannalta, onko jokin suure ”oikeasti” jatkuva vai epäjatkuva funktio ajan suhteen. Yllä annettiin esimerkiksi virtapiiristä, jossa kytkimen sulkeminen tai avaaminen aiheutti sen, että virran arvo muuttui epäjatkuvasti. Vai oliko muutos todella epäjatkuvaa? Loppujen lopuksi tämäkin on mallinnuskysymys: virtapiirin käsite on jo sinänsä eräänlainen malli, ja jos ruvetaan tarkemmin katsomaan mitä tapahtuu juuri sillä hetkellä kun kytkin avataan tai suljetaan, tarvitaan parempia malleja. Oleellista on, että virtapiirin toiminnan kannalta ei ole hirveän tärkeää, miten tämä ”äärettömän nopea” muutos tapahtuu, ja tavallaan muutoksen mallintaminen epäjatkuvan funktion avulla on yksinkertaisin mahdollinen.

Toinen vastaava tapaus esiintyy kaasudynamiikassa. Kun lentokone ylittää äänen nopeuden syntyy shokkiaalto, jossa paine muuttuu epäjatkuvasti.¹ Voidaanko paineesta kuitenkaan puhua sen enempää jatkuvana kuin epäjatkuvana? Fysikaalisesti ajateltuna paineen arvo tietyssä pisteessä ei ole määritelty, vaan paine on välttämättä jonkinlainen keskimääräinen suure tietyn pisteen ympäristössä.

Itse asiassa keskiajalla, ja kenties jo antiikin aikoina, väiteltiin siitä voiko luonnossa tapahtua ”hyppäyksiä” vai onko muutos välttämättä ”jatkuva”. Filosofian kannalta tämä kysymys tuskin enää on kovin ajankohtainen, mutta mallinnuksen yhteydessä se on edelleen hyvä pitää mielessä. Mallinnettaessa ei tarvitse välittää asian ”lopullisesta totuudesta”; sen sijaan on paikallaan miettiä, mikä on tarkoituksenmukaista: antaako jatkuva vai epäjatkuva malli yksinkertaisemman tai muuten paremman kuvan ilmiöstä.

¹ Ääni on paineaalto, ja yliaänikoneiden aiheuttama pamaus johtuu shokkiaallosta.

7.2 Mallin muodostaminen

Edellisissä esimerkeissä ilmiötä kuvaava käyrä voitaisiin periaatteessa saada sopivina mittaustuloksina. Mallinnettaessa pyritään kuitenkin selittämään ilmiötä mahdollisimman hyvin siten, että mallin avulla voitaisiin tuottaa (ainakin melkein) sama data kuin mittaustuloksilla. Luonnollisesti yleensä mallin tavoitteena on nimenomaan välttää mittausten suorittamista: mallia tutkimalla yritetään selvittää systeemin käyttäytymistä olosuhteissa joiden kokeellinen tutkiminen olisi kallista, hankalaa tai mahdotonta. Hyvin usein fyysisiä ilmiöitä pyritään selittämään tai ymmärtämään *differentiaaliyhtälömallien* avulla.

Differentiaaliyhtälö(systeemi) on määritelmän mukaan seuraavanlainen:

$$f(t, y, y', \dots, y^{(q)}) = 0.$$

Tässä t on skalaari (aika), ja y on t :n funktio; siis $y: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^n$. Differentiaaliyhtälön kertaluku q ilmoittaa y :n korkeimman derivaatan, joka yhtälössä esiintyy. Jos systeemissä on k kappaletta yhtälöitä, niin f on kuvaus $f: \mathbb{R}^{(q+1)n+1} \rightarrow \mathbb{R}^k$.

Jo aivan differentiaalilaskennan kehityksen alkuvuosina 1600-luvun lopulla huomattiin, että differentiaaliyhtälöiden avulla voidaan ratkaista monenlaisia sekä fysiikan että matematiikan ongelmia. Nyt yli 300 vuotta myöhemmin differentiaaliyhtälöitä tutkitaan edelleen aktiivisesti sekä teorian, sovellusten että numeerisen laskennan kannalta. Miksi tällaiset mallit sitten ovat osoittautuneet niin hyödyllisiksi ja hedelmällisiksi?

Tarkastellaan jotain suuretta y hetkellä t . Selvästi y :n tai sen derivaattojen arvot hetkellä $t + a$ eivät voi vaikuttaa y :n arvoihin hetkellä t , jos $a > 0$. Tulevaisuus ei siis voi vaikuttaa nykyhetkeen; tällaisia systeemejä sanotaan *kausaalisiksi*. Sen sijaan menneisyys ($a < 0$) voi luonnollisesti vaikuttaa nykyhetkeen. Mutta jos hyvin kaukainen menneisyys vaikuttaa oleellisesti johonkin ilmiöön, tätä on erittäin vaikea selvittää, ja ilmiö on tavallaan ”käsittämätön”. Siis ”ymmärrettävät” ilmiöt ovat lokaaleja siinä mielessä, että vain lähimenneisyys tarvitsee ottaa huomioon.

Differentiaaliyhtälömalleissa lokaalisuuden vaatimus on viety äärimmilleen: niissä *nykyhetki määrää täysin tulevaisuuden*. Differentiaaliyhtälöt ovat siis tavallaan luonnollinen approksimaatio, kun kuvataan lokaaleja ilmiöitä, samassa mielessä kuin käyrän tangentti approksimoi käyrää sivuamispisteen läheisyydessä.

Ajatus, että nykyhetki sisältää riittävästi informaatiota tulevaisuuden määrittämiseen, tunnetaan *determinisminä*. 1800-luvulla differentiaaliyhtälöiden teoriaa pidettiin jopa eräänlaisena determinismin matemaattisena muotoiluna. Sittenmin differentiaaliyhtälöt ja determinismi ovat kulkeneet

omia polkujaan, mutta edelleen on tapana sanoa differentiaaliyhtälömalleja deterministisiksi.

Terminologia ei kuitenkaan ole täysin looginen, koska on olemassa myös *stokastisia differentiaaliyhtälöitä*, jotka ovat sitten eräällä tavalla determinististen differentiaaliyhtälöiden ”vastakohta”. Stokastinen tarkoittaa, että yhtälössä on termejä, joita kuvataan satunnaismuuttujien avulla. Tässä yhteydessä ei ole mahdollista käsitellä stokastisia differentiaaliyhtälöitä. Joka tapauksessa yleisen käytännön mukaan sana *differentiaaliyhtälö* ilman mitään adjektiivia tarkoittaa nimenomaan determinististä differentiaaliyhtälöä, joten noudatetaan tätä jatkossa.

Tarkastellaan seuraavaksi muutamia esimerkkejä.

7.2.1 Hella

Otetaan ensin tapaus, jossa tutkitaan sähköhellan levyn lämpötilaa. Levyn lämpöenergia on $E = cT$ missä c on jokin vakio (ominaislämpökapasiteetti kertaa massa). Jos levyn lämmitysteho on b (mikä voi riippua ajasta) ja unohdetaan lämpöhäviöt ympäristöön, päädytään differentiaaliyhtälöön

$$[162] \quad E'(t) = cT'(t) = b(t) \quad (7.1)$$

Tämähän on *energian säilymisen laki*, mikä ehkä paremmin tulee esille, jos yhtälö integroidaan puolittain:

$$E(t) - E(0) = \int_0^t b(s) ds.$$

Vasemmalla on levyn lämpöenergian muutos ja oikealla on systeemiin ulkopuolelta tuotu energia. Jos nyt oletetaan, että b on vakio, ratkaisuksi saadaan $T(t) = bt/c + d$, missä d on jokin vakio. Luonnollinen alkuehto on $T(0) = T_h$, missä T_h on huoneen lämpötila. Siis $T(t) = bt/c + T_h$, joten lämpötila kasvaa rajatta, mikä ei vaikuta kovin realistiselta. Kuitenkin pienillä t :n arvoilla malli voi hyvinkin antaa varsin tarkan tuloksen.

Malli (7.1) ei varsinaisesti ole differentiaaliyhtälö siinä mielessä, että siinä esiintyy vain tuntemattoman funktion derivaatta, mutta ei funktiota itseään. Ratkaisu saadaan siis suoraan integroimalla. Jos kuitenkin yritetään parantaa mallia, päädytään ”oikeaan” differentiaaliyhtälöön. Oletetaan että lämpöhäviöt ovat verrannollisia levyn ja huoneen lämpötilan erotukseen:

$$cT'(t) = -a(T(t) - T_h) + b.$$

Luonnollisesti $T \geq T_h$ ja $a > 0$. Jos siis edelleen oletetaan, että b on vakio ja käytetään alkuehtoa $T(0) = T_h$, saadaan

$$T(t) = T_h + \frac{b}{a} (1 - \exp(-at/c)).$$

Tämä vaikuttaa jo huomattavasti järkevämältä: kun $t \rightarrow \infty$, eksponentti-termi lähenee nollaa ja lämpötila siis lähestyy vakioarvoa. Huomattakoon myös, että

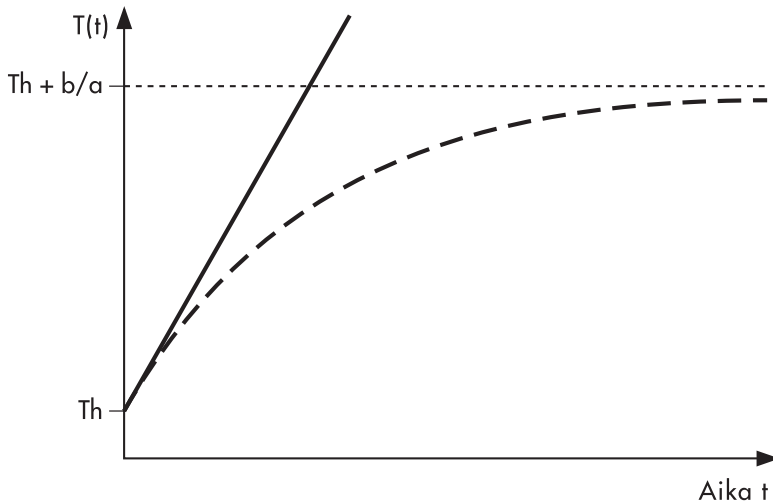
$$T(t) = T_h + bt/c + O(t^2).$$

Häviötön malli siis tosiaankin antaa hyvän approksimaation, kun t on pieni (kuva 7.1).

Edelleen voidaan ajatella, että lämmitysteho b riippuisi T :stä ja sitä käytettäisiin *termostaatin* tapaan: säädetään b :tä siten, että lähestytään haluttua lämpötilaa T_0 . Valitaan vaikkapa $b = -a_1(T - T_1)$, missä $a_1 > 0$:

$$cT'(t) = -a(T(t) - T_h) - a_1(T(t) - T_1).$$

[163]



Kuva 7.1. Pienillä t :n arvoilla häviötön malli (yhtenäinen viiva) on lähellä realistisempaa mallia (katkoviiva), joka varsin nopeasti lähenee vakiolämpötilaa.

Tämäkin osataan vielä ratkaista (eli integroida):

$$T(t) = \frac{aT_h + a_1T_1}{a + a_1} + d \exp(-(a + a_1)t/c).$$

Pitää siis valita T_1 siten, että

$$T_0 = \frac{aT_h + a_1T_1}{a + a_1}.$$

Luonnollisesti hellan tapauksessa, ja monissa muissakin termostaatin sovelluksissa, teho ei voi olla negatiivinen, toisin sanoen levyä ei voida jäähdyttää. Realistisempi termostaatti olisikin

$$b = \max\{0, -a_1(T(t) - T_1)\}.$$

Tätä vastaavan differentiaaliyhtälön analysointi jätetään harjoitustehtäväksi.

[164]

7.2.2 Pistemassa

Tarkastellaan sitten pistemassan liikettä. Newtonin toisen lain mukaan voima on massa kertaa kiihtyvyys. Jos pistemassan paikkaa kuvaa käyrä x , niin kiihtyvyys on x :n toinen derivaatta:

$$mx''(t) = F(t, x, x'). \quad (7.2)$$

Jos asetetaan koordinaatisto siten, että x_1 - ja x_2 -akselit ovat vaakatasossa ja x_3 -akseli pystysuorassa, ja jos oletetaan, että kappaleeseen vaikuttaa vain maan vetovoima, niin $F = (0, 0, -mg)$, missä g on maan vetovoiman aiheuttama kiihtyvyys. Saadaan siis yhtälöt

$$\begin{cases} mx_1'' = 0, \\ mx_2'' = 0, \\ mx_3'' = -mg. \end{cases} \quad (7.3)$$

Tämä on helppo ratkaista, jos annetaan alkupiste $x(0)$ ja alkunopeus $x'(0)$. Erityisesti huomataan, että x :n eri komponentit eivät vaikuta toisiinsa, joten jokainen komponentti voidaan ratkaista erikseen.

Hieman mielenkiintoisempi systeemi saadaan, jos oletetaan, että origossa on massa, jonka aiheuttamassa gravitaatiokentässä annettu kappale liikkuu. Tällöin, edelleen Newtonin mukaan, saadaan yhtälö

$$mx'' = -\frac{c}{|x|^3}x. \quad (7.4)$$

Tämän ratkaisut ovat ellipsejä, jos alkunopeus on riittävän pieni. Keplerhän osoitti jo paljon ennen Newtonia Tyko Brahen havaintoihin perustuen ja ilman differentiaalilaskentaa, että planeetat kiertävät ellipsinmuotoisia ratoja auringon ympäri. Newton puolestaan pystyi laskemaan, että jos vetovoima on kääntäen verrannollinen etäisyyden neliöön, niin planeetan rata on ellipsi.

Muutkin kuin Newton esittivät, että vetovoima on kääntäen verrannollinen etäisyyden neliöön. Miksi eri tutkijat toisistaan riippumatta päätyivät samaan malliin? Keplerin jälkeen aurinkokeskinen näkemys oli jo lopullisesti tullut hyväksytyksi, joten oli luonnollista ajatella, että aurinko jollain tavalla aiheutti maan liikkeen. Ajatellaan sitten, että auringon ympärille laitetaan pallopinta, jonka säde on r . Auringosta säteilevä pallopintaan osuva kokonaisvaloteho on riippumaton säteestä, mutta sen intensiteetti eli teho/pinta-alayksikkö pienenee kuten $1/r^2$, koska pallon pinta-ala on $4\pi r^2$. Kun tämä päättely ymmärrettiin, niin analogisesti ajateltiin, että auringon vetovoima pienenesi samalla tavalla.

[165]

7.2.3 Mallin perusmuoto

Mikä tahansa korkeamman kertaluvun differentiaaliyhtälösystemi voidaan kirjoittaa (ekvivalenttina) ensimmäisen kertaluvun systeeminä. Esimerkiksi pistemassan yhtälö ensimmäisen kertaluvun systeeminä on

$$\begin{cases} x' = v, \\ mv' = F(t, x, v). \end{cases} \quad (7.5)$$

Monet differentiaaliyhtälöitä käsittelevät kirjat onkin kirjoitettu siten, että tarkastellaan pelkästään ensimmäisen kertaluvun tehtäviä. Myös lähes kaikki differentiaaliyhtälöiden numeeriset ratkaisijat olettavat, että tehtävä on annettu tässä muodossa. Noudatetaan seuraavassa tätä käytäntöä, ja tarkastellaan vain tehtäviä jotka ovat muotoa

$$y'(t) = f(t, y(t)). \quad (7.6)$$

Ei siis pelkästään oleteta, että differentiaaliyhtälö on ensimmäistä kertalukua, vaan vaaditaan lisäksi, että

- y' voidaan eksplisiittisesti ratkaista ja
- yhtälöitä on yhtä paljon kuin tuntemattomia suureita.

Käytännössä esiintyy kuitenkin paljon malleja, joissa on enemmän yhtälöitä kuin tuntemattomia: tällöin usein sanotaan, että systeemissä on *rajoitusehtoja*. Esimerkiksi robotiikan mallit ovat tällaisia. Näitä ylimääräytyviä malleja ei kuitenkaan yleensä analysoida differentiaaliyhtälöitä tai differentiaaliyhtälömalleja käsittelevissä kirjoissa. Yksi syy on, että klassinen differentiaaliyhtälöiden teoria ei sovellu kovin hyvin ylimääräytyvien tehtävien käsittelyyn. Tämän takia mallinnettaessa pyritään nimenomaan systeemeihin, jotka ovat muotoa (7.6); toisin sanoen ajatellaan, että mallinutusprosessi on saatu päätökseen vasta kun tehtävä on muotoa (7.6).

Joka tapauksessa ylimääräytyviä systeemejä on täysin mahdollista käsitellä suoraan, myös numeerisesti; valitettavasti tämän yleisemmän teorian esittely vaatisi kuitenkin hiukan differentiaaligeometrian esitietoja, joten siihen ei nyt tässä voi puuttua. Rajoitutaan siis jatkossa malleihin jotka ovat muotoa (7.6).

[166]

7.2.4 Tila-avaruus

Kuten yllä olevissa esimerkeissä nähtiin, annetulla differentiaaliyhtälöllä on (yleensä) useita ratkaisuja. Tyypillisesti jos tehtävä onnistutaan ratkaisemaan alkeisfunktioiden avulla, ratkaisussa esiintyy vapaita parametreja, joille voi antaa mielivaltaisia arvoja. Jos halutaan jokin tietty ratkaisu nämä parametrit pitää valita, ja yksi tapa tehdä tämä on kiinnittää y :n arvo tietyllä ajanhetkellä. Kun siis differentiaaliyhtälöön (7.6) liitetään ehto $y(t_0) = y_0$, niin näin saatua tehtävää kutsutaan *alkuarvot tehtäväksi*.

Jatkossa oletetaan aina, että yhtälössä (7.6) esiintyvä f on ainakin kerran jatkuvasti derivoituva. Tämä takaa, että alkuarvot tehtävän ratkaisu on olemassa, ainakin pienellä välillä $[t_0, t_0 + \varepsilon]$ ja että ratkaisu on yksikäsitteinen. Jos f ei riipu eksplisiittisesti t :stä, sanotaan, että differentiaaliyhtälö on *autonominen*. Oletetaan edelleen, että funktion f määrittelyjoukko voidaan kirjoittaa muodossa $\mathbb{L} = [t_0, t_1] \times \Omega$; Ω on *tila-avaruus* ja \mathbb{L} on *laajennettu tila-avaruus*.²

Klassisessa mekaniikassa esiintyy lisäksi *konfiguraatioavaruus*. Tällä tarkoitetaan sitä, että tietyt muuttujat määrittävät systeemin paikan ja näiden muuttujien mahdolliset arvot muodostavat konfiguraatioavaruuden. Kun sitten otetaan mukaan nopeudet, saadaan tila-avaruus. Pistemassan

² Tila-avaruus on englanniksi *state space* tai joskus *phase space*. Jälkimmäisestä näkee joskus käännöstä faasiavaruus.

tapauksessa konfiguraatioavaruus on \mathbb{R}^3 ja tila-avaruus $\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3$, koska nopeusvektorissa on myös kolme komponenttia.

Monimutkaisissa systeemeissä konfiguraatio- ja tila-avaruuden rakenteen selvittäminen voi jo sinänsä olla hankalaa, ja tämän rakenteen tunteminen voi antaa oleellista tietoa mallin ominaisuuksista.

7.3 Kvalitatiivinen vai kvantitatiivinen

Kun on saatu jokin differentiaaliyhtälömalli, luonnollisesti seuraava askel on (yrittää) ratkaista se. Mutta jos ratkaisemisella tarkoitetaan:

esitä ratkaisu alkeisfunktioiden avulla,

tämä ei yleisesti ottaen juuri koskaan onnistu. Tämä ymmärrettiin varsin hyvin jo 1800-luvulla: Liouville osoitti, että monien hyvin yksinkertaisten differentiaaliyhtälöiden ratkaisua ei voi esittää alkeisfunktioiden avulla. Tämän takia mallin ratkaisemisella tarkoitetaankin yleensä:

etsi ratkaisun numeerinen approksimaatio.

[167]

Nykyään onkin hyvin tehokkaita menetelmiä differentiaaliyhtälöiden numeeriselle ratkaisulle, joten voisi ajatella, että asia on sillä selvä. Mallinnettaessa nousee kuitenkin usein esiin muitakin kysymyksiä kuin mikä on y :n arvo hetkellä t , esimerkiksi

- miten ratkaisu käyttäytyy kun $t \rightarrow \infty$?
- miten ratkaisu muuttuu jos parametrien arvot muuttuvat?
- onko malli ”rakenteellisesti stabiili”?

Ensimmäiseen kysymykseen voisi yrittää vastata ratkaisemalla systeemi numeerisesti hyvin pitkällä aikavälillä. Ongelmana on kuitenkin miten voi tietää, mikä on riittävän pitkä aikaväli? Lisäksi numeerisessa laskennassa esiintyvä virhe voi kasvaa huomattavasti ajan funktiona, joten ei ole selvää ovatko pitkän aikavälin laskennan tulokset luotettavia.

Missä tahansa realistisessa mallissa esiintyy parametreja, joiden arvoja ei tarkasti tunneta. Jos siis numeerinen ratkaisu lasketaan tietyillä parametrien arvoilla, saataisiinko ”samantyyppinen” ratkaisu, jos parametrien arvoja hieman muutetaan? Tietenkin voitaisiin laskea useita numeerisia ratkaisuja eri parametrien arvoilla, mutta tällöinkään ei ole selvää, kuinka paljon eri ratkaisuja pitäisi olla ja miten parametreja pitäisi varioida.

Kolmas kohta on tavallaan toisen kohdan yleistys: miten mallin tulokset muuttuvat jos koko mallia muutetaan ”jonkin verran”. Näin yleisellä tasolla on tietenkin vaikea sanoa mitään, mutta jäljempänä tarkastellaan erästä esimerkkiä, mikä toivottavasti valaisee asiaa.

Yleisenä johtopäätöksenä voisi siis pitää, että numeerinen laskenta siinänsä ei riitä vaan pitää ymmärtää systeemin käyttäytymistä ja ratkaisujen luonnetta myös kvalitatiiviselta kannalta.

7.4 Mallin geometria

7.4.1 Vektorikenttä ja suuntakenttä

Miten differentiaaliyhtälösystemiä sitten voisi ymmärtää kvalitatiivisesti? Itse asiassa ensimmäinen askel tähän suuntaan on jo otettu: on määritelty (laajennettu) tila-avaruus joka on geometrinen malli systeemin mahdollisten tilojen joukolla. Seuraava askel on dynamiikan geometrinen kuvailu ja tähän tarvitaan *vektorikenttiä* ja *suuntakenttiä*.

Tarkastellaan yleistä skalaaritehtävää

[168]

$$y'(t) = f(t, y(t)), \quad f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}. \quad (7.7)$$

Jos merkitään myös y :llä jotain ratkaisukäyrää, yllä oleva yhtälö kertoo, että hetkellä t_0 käyrän $t \mapsto y(t)$ kulmakerroin on $f(t_0, y(t_0))$. Merkitään edelleen $p = y(t_0)$, jolloin siis käyrän y tangenttisuora pisteessä (t_0, p) on

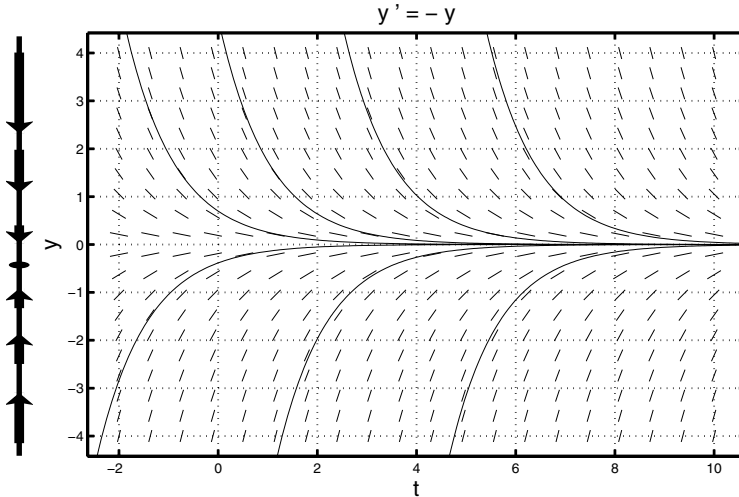
$$y - p = f(t_0, p)(t - t_0). \quad (7.8)$$

Tämähän on hyvin määritelty suora riippumatta mistään ratkaisukäyrästä, toisin sanoen f määrittelee jokaiseen tason pisteeseen tietyn suoran. Samantyyppinen päättely voidaan tehdä myös vektoritapauksessa: yhtälö 7.6 määrittelee *suuntakentän* eli se liittyy suoran jokaiseen laajennetun tila-avaruuden pisteeseen.³

Jos yhtälö on autonominen, siis muotoa $y'(t) = f(y(t))$, yhtälön tulkinta on seuraava. Tarkastellaan tila-avaruuden pistettä p ja oletetaan, että käyrä y kulkee p :n kautta hetkellä t_0 . Käyrän tangentti $y'(t_0)$ on siis $f(p)$ ja näin f liittyy tietyn vektorin jokaiseen tila-avaruuden pisteeseen. Toisin sanoen

³ Suuntakenttä on englanniksi *direction field*. Differentiaaligeometriassa suuntakenttä on yksiuulotteinen distribuutio.

kuvaus f määrittelee vektorikentän: se liittää jokaiseen tila-avaruuden pisteeseen p vektorin $f(p)$.⁴



[169]

Kuva 7.2. Vasemmalla yhtälön $y' = -y$ määräämä vektorikenttä ja oikealla vastaava suuntakenttä sekä muutamia ratkaisuja.

Esimerkkejä

ESIMERKKI 7.1

Tarkastellaan yhtälöä $y' = -y$. Kuvassa 7.2 on esitetty tätä vastaava vektorikenttä, suuntakenttä sekä muutamia ratkaisuja. Huomaa, että sekä suunta- että vektorikenttä tunnetaan, vaikka ratkaisuja ei osattaisikaan laskea (alkeisfunktioiden avulla). Differentiaaliyhtälöiden kvalitatiivisen analyysin idea onkin tutkia suunta- tai vektorikenttää suoraan ja päätellä tämän avulla joitain ratkaisujen ominaisuuksia. Esimerkiksi kuvan 7.2 vektorikentän perusteella heti nähdään, että kaikki ratkaisut lähestyvät nollaa, kun t lähestyy ääretöntä. Jos sitten tarkastellaan yleistä differentiaaliyhtälöä $y' = f(y)$, päädytään samanlaiseen kuvaan, jos vain oletetaan, että

⁴ Lähes kaikissa differentiaaliyhtälöitä käsittelevissä kirjoissa merkitään $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$. Tämä on harhaan johtavaa siinä mielessä, että lähtö- ja maaliavaruus ovat hyvin erilaisia: piste p kuvataan vektorille $f(p)$.

$$f(y) \begin{cases} > 0, & \text{jos } y < 0, \\ = 0, & \text{jos } y = 0, \\ < 0, & \text{jos } y > 0. \end{cases}$$

Näin yleisellä tasolla on tietenkin toivotonta yrittää ratkaista tehtävää eksplisiittisesti. Voidaan kuitenkin päätellä, että kaikki ratkaisut tässäkin tapauksessa lähestyvät nollaa.

ESIMERKKI 7.2

Katsotaan jälleen pistemassan liikettä. Oletetaan, että voimat vaikuttavat siten, että ratkaisu riippuu vain yhdestä koordinaatista. Tällöin vastaava ensimmäisen kertaluvun systeemi on edelleen muotoa (7.5), mikä yleisen yhtälön (7.6) merkintöjen mukaisesti vastaa tapausta $y = (y_1, y_2) = (x, v)$ ja $f = (v, F/m)$. Tarkastellaan lineaarista tapausta $F = -ax - bv$ missä $a > 0$ ja $b \geq 0$. Tämä voidaan tulkita seuraavasti: x kuvaa kappaleen (painopisteen) poikkeamaa tasapainoasemasta, termi $-ax$ pyrkii palauttamaan kappaleen tasapainoon ja termi $-bv$ pyrkii jarruttamaan liikettä. Tätä systeemiä kutsutaan *vaimennetuksi värähtelijäksi*, jos $b > 0$, ja *harmoniseksi värähtelijäksi*, jos $b = 0$. Molemmat tapaukset voidaan vielä ratkaista alkeisfunktioiden avulla.

Harmonisen värähtelijän tapauksessa ratkaisut ovat jaksollisia ja tila-avaruudessa saadaan umpinaisia käyriä. Vaimennetun värähtelijän tapauksessa ratkaisut puolestaan lähestyvät origoa (kuva 7.3).

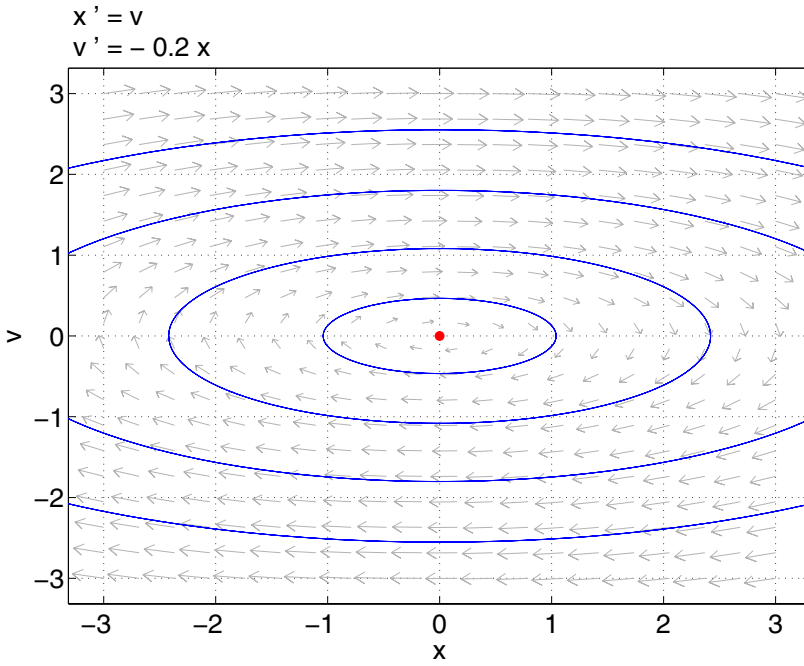
[170]

7.5 Invariantit joukot ja stabiilisuus

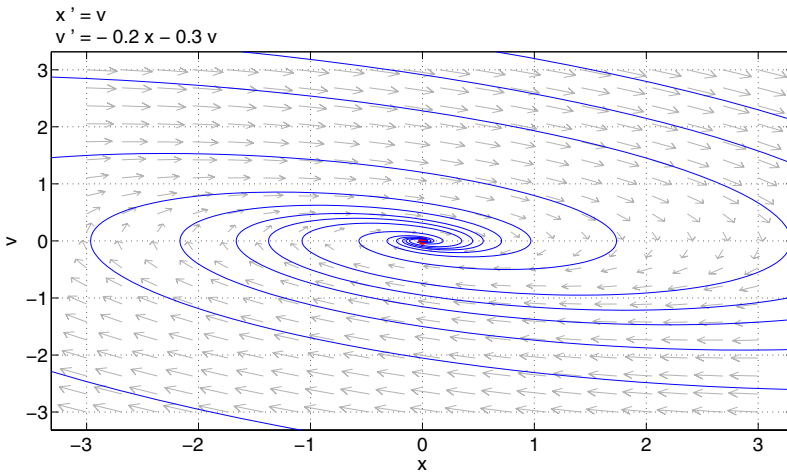
Edellä nähtiin, että differentiaaliyhtälösystemiä vastaavan vektoritai suuntakentän geometrinen analyysi voi antaa hyödyllistä tietoa systeemin ratkaisuista. Katsotaan nyt vähän tarkemmin, mitä tietoa on mahdollista saada, mutta rajoitutaan selvyuden vuoksi autonomisiin systeemeihin

$$y' = f(y) \tag{7.9}$$

ja tarkastellaan tätä vastaavaa vektorikenttää f . Oletetaan, että vektorikenttä on määritelty jossakin sopivassa joukossa $\Omega \subset \mathbb{R}^n$.



[171]



Kuva 73. Harmoninen värähtelijä ja vaimennettu värähtelijä.

MÄÄRITELMÄ 7.1

Joukko $S \subset \Omega$ on vektorikentän f *invariantti joukko*, jos kaikille alkuarvotekävälle

$$\begin{cases} y' = f(y), \\ y(0) = y_0 \in S \end{cases}$$

pätee $y(t) \in S$ kaikilla $t > 0$.

Jos siis ratkaisu joutuu invarianttiin joukkoon, se pysyy siellä ikuisesti. Tietenkin jokainen ratkaisukäyrä on invariantti joukko, mutta ideana on löytää sellaisia kiinnostavia invariantteja joukkoja, joita voidaan analysoida pelkästään vektorikentän f avulla tarvitsematta tuntea ratkaisuja. Invarianttien joukkojen syvin olemus tulee ehkä parhaiten esille tarkastelemalla ensin yhtä tärkeää erikoistapausta.

7.5.1 Tasapainopisteet

[172]

Lähdetään liikkeelle kaikkein yksinkertaisimmasta invariantista joukosta: *tasapainopisteestä*. Piste p on systeemin $y' = f(y)$ tasapainopiste, jos $f(p) = 0$. Selvästi jos p on tasapainopiste, niin $y(t) = p$ on eräs systeemin ratkaisu, joten $\{p\}$ on invariantti joukko.

Usein ollaan kiinnostuneita tasapainopisteen stabiilisuudesta:

MÄÄRITELMÄ 7.2

Olkoon y alkuarvotekävän $y' = f(y)$, $y(0) = y_0$ ratkaisu ja p vektorikentän f tasapainopiste. Tällöin p on *asymptoottisesti stabiili*, jos on olemassa $r > 0$ siten, että

$$\lim_{t \rightarrow \infty} y(t) = p, \quad \text{aina kun } |y_0 - p| < r.$$

Siis p on asymptoottisesti stabiili, jos kaikki riittävän lähelle tulevat ratkaisukäyrät lopulta suppenevat kohti p :tä. Selvästi esimerkiksi origo on yhtälön $y' = -y$ asymptoottisesti stabiili tasapainopiste.

Lineaarille systeemeille stabiilisuus on helppo selvittää. Tarkastellaan tehtävää

$$y' = Ay, \quad A \in \mathbb{R}^{n \times n}. \quad (7.10)$$

Origo on luonnollisesti tasapainopiste, ja jos $\det(A) \neq 0$, se on ainoa tasapainopiste.

LAUSE 7.1

Olkoon A :n ominaisarvot $\lambda_1, \dots, \lambda_n$. Origo on yhtälön (7.10) *asymptoottisesti stabiili tasapainopiste*, jos $\operatorname{Re} \lambda_k < 0$ kaikilla k .

Todistus löytyy lähes mistä tahansa differentiaaliyhtälöitä käsittelevästä kirjasta. Se perustuu siihen, että ratkaisu voidaan esittää muodossa

$$y(t) = \exp(At)y(0).$$

Luonnollisesti useimmat mallit eivät ole lineaarisia. Epälineaarisen vektorikentän tasapainopisteiden stabiilisuus voidaan kuitenkin usein selvittää *linearisoinnin* avulla. Olkoon p vektorikentän f tasapainopiste ja asetetaan

$$z' = df_p z. \quad (7.11)$$

Tämä on lineaarinen vakiokertoiminen yhtälö, johon voidaan soveltaa edellistä lausetta. Linearisoinnin idea on, että toivotaan, että tehtävän (7.11) ratkaisut käyttäytyisivät origon lähellä samalla tavalla kuin tehtävän (7.9) ratkaisut p :n lähellä. Valitettavasti näin ei kuitenkaan aina käy. Tasapainopisteen pitää lisäksi toteuttaa seuraava ehto.

[173]

MÄÄRITELMÄ 7.3

Vektorikentän f tasapainopiste p on *hyperbolinen*, jos df_p :llä ei ole puhtaasti imaginaarisia ominaisarvoja.

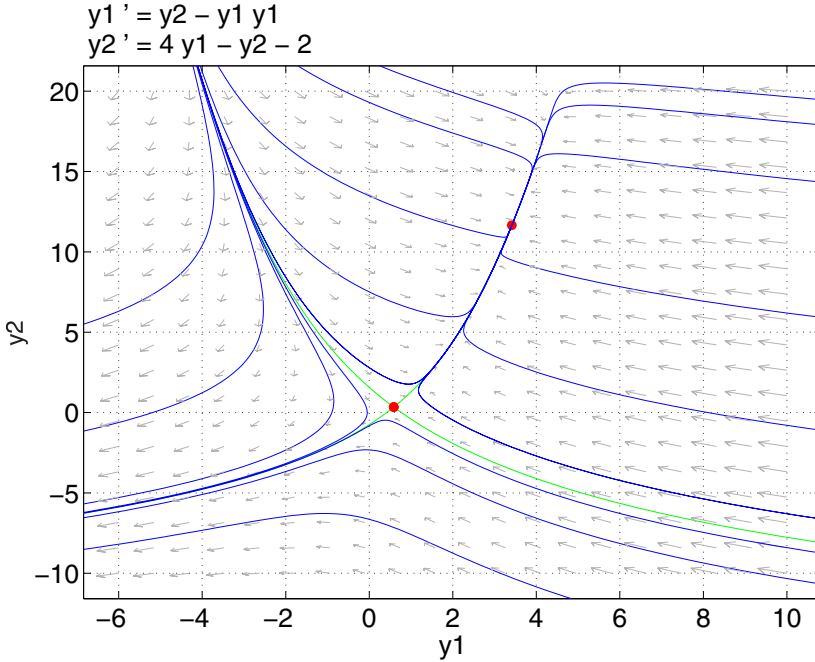
Huomattakoon erityisesti, että df_p :llä ei saa olla ominaisarvoa nolla – tähän sijaitsen imaginaariakselilla kompleksitasossa. Tietyissä mielessä ehto ei ole kovin rajoittava: jos otetaan satunnainen matriisi, ehto on voimassa todennäköisyydellä yksi. Nyt voidaan osoittaa:

LAUSE 7.2

Olkoon p yhtälön (7.9) *hyperbolinen tasapainopiste*. Tällöin p on *asymptoottisesti stabiili*, jos ja vain jos origo on tehtävän (7.11) *asymptoottisesti stabiili tasapainopiste*.

Itse asiassa vielä enemmän on totta: hyperbolisen tasapainopisteen ympäristössä alkuperäinen ja linearisoitu systeemi ovat aina ”kvalitatiivisesti samanlaisia”, vaikka tasapainopiste ei olisikaan asymptoottisesti stabiili. Tässä ei kuitenkaan ole mahdollista tarkemmin määritellä termiä kvalitatiivisesti samanlainen.

Kuvaan (7.4) on piirretty erään esimerkkitapauksen ratkaisuja ja tasapainopisteet. Toinen tasapainopisteistä on asympotoottisesti stabiili, ja molemmat ovat hyperbolisia. Kuvassa (7.5) on vastaavat linearisoidut systeemit ja muutamia niiden ratkaisukäyriä. Ainakin tässä tapauksessa kvalitatiivinen samanlaisuus tuntuu toteutuvan hyvin.

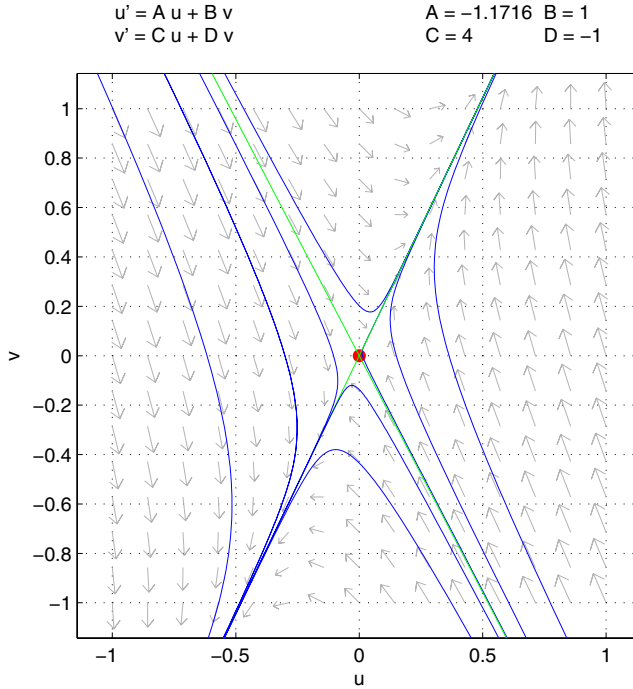


[174]

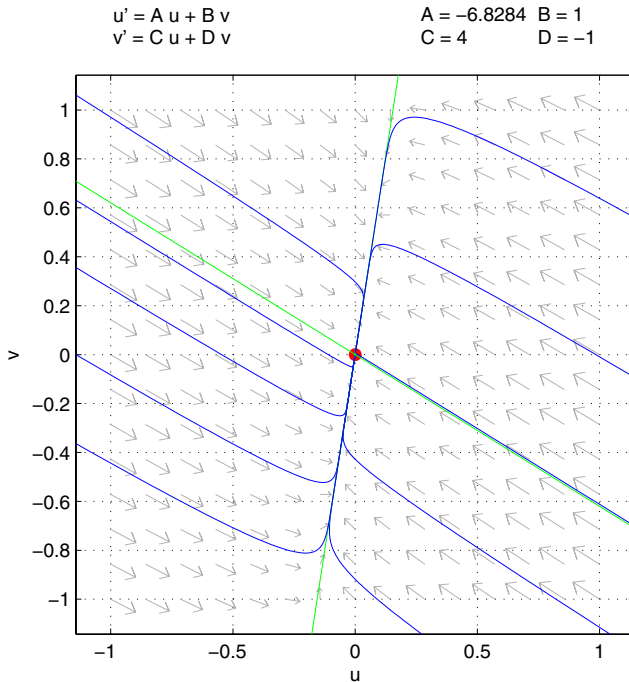
Kuva 7.4. Tällä vektorikentällä on kaksi tasapainopistettä, joista toinen on asympotoottisesti stabiili.

7.5.2 Jaksolliset ratkaisut

Yhtälön (7.9) ratkaisu y on *jaksollinen*, jos on olemassa jokin $a > 0$ siten, että $y(t+a) = y(t)$ kaikilla t . Tällöin a on ratkaisun *jakso*. Selvästi jaksollisen ratkaisun rata on invariantti joukko. Harmonisen värähtelijän tapauksessa kaikki ratkaisut ovat jaksollisia paitsi origo, joka oli tasapainopiste. Useimmiten jaksollisia ratkaisuja on kuitenkin vain äärellinen määrä. Tällöin voidaan kysyä, kuten tasapainopisteiden tapauksessa, onko jokin tietty jaksollinen ratkaisu (asympotoottisesti) stabiili. Stabiilisuuden tarkempaan



[175]



Kuva 75. Kuvassa 7.4 olevan systeemin linearisoinnit.

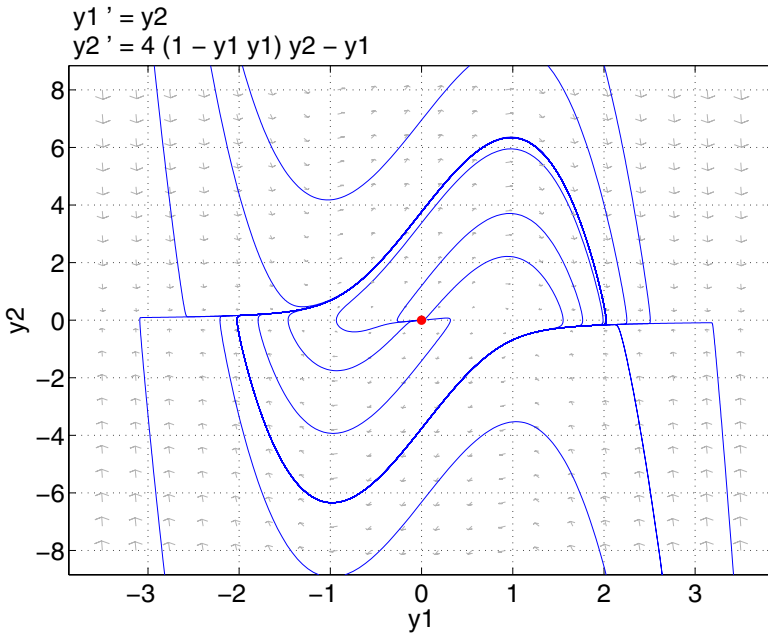
määrittelyyn ei kuitenkaan tässä voida puuttua, mutta seuraava esimerkki valaisee asiaa.

Kuuluisa systeemi, jossa esiintyy stabiili jaksollinen ratkaisu, on *van der Polin* differentiaaliyhtälö:

$$\begin{cases} y_1' = y_2, \\ y_2' = \alpha(1 - y_1^2)y_2 - \omega^2 y_1, \end{cases} \quad \alpha > 0. \quad (7.12)$$

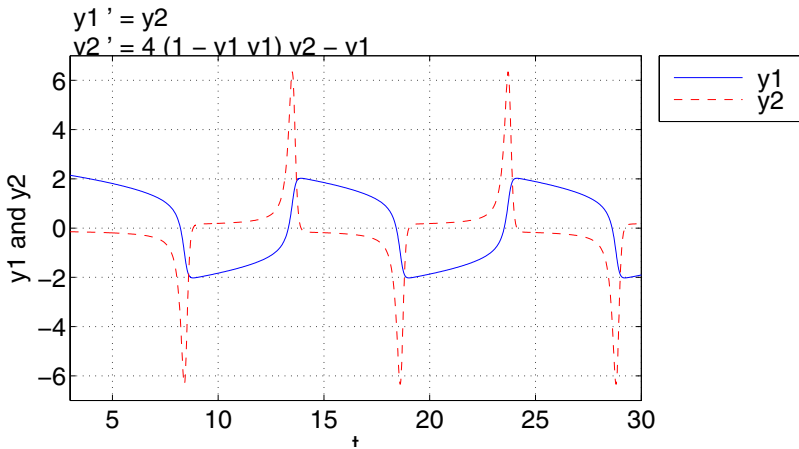
Jos α olisi nolla, systeemi olisi yksinkertaisesti harmoninen värähtelijä. Van der Pol mallinsi tällä sydämen lyönnin dynamiikkaa; hän päätyi malliinsa sähköpiirianalogian perusteella. Tämä ei ole niin kaukaa haettua kuin miltä se saattaa kuulostaa: sydämen lyöntiä tahdittavat tietyt neuronit, ja neuronien toiminnassa sähköiset ilmiöt ovat erittäin oleellisia. Joka tapauksessa mallilla on stabiili jaksollinen ratkaisu, kuten kuvasta 7.6 nähdään. Lisäksi voidaan helposti tarkistaa, että systeemin ainoa tasapainopiste origo on epästabiili.

[176]



Kuva 7.6. Van der Polin systeemillä (7.12) on stabiili jaksollinen ratkaisu.

Van der Polin systeemillä on toinenkin mielenkiintoinen ominaisuus, joka tulee esille kun ratkaisut piirretään ajan funktiona. Kuvassa (7.7) on yksi ratkaisu, josta nähdään, että varsin nopeasti ratkaisu ”asettuu” stabiilille jaksolliselle ratkaisulle. Lisäksi huomataan, että jaksollisella ratkaisulla on selvästi kaksi vaihetta, nopea ja hidas. On havaittu, että tämäntyyppisiä värähteleviä ilmiöitä esiintyy varsin monissa malleissa, joissa hitaan vaiheen aikana systeemi ikään kuin kerää energiaa, joka sitten nopeasti purkautuu, kun tietty kynnyсарvo saavutetaan.⁵



[177]

Kuva 7.7. Eräs van der Polin systeemin (7.12) ratkaisu ajan funktiona.

7.5.3 Yleiset invariantit joukot

Edellä löydettiin kaksi kiinnostavaa invarianttien joukkojen luokkaa, tasapainopisteet ja jaksolliset ratkaisut. Itse asiassa voidaan osoittaa, että tasotapauksessa ei voi olla tämän monimutkaisempia invariantteja joukkoja. Tilanne muuttuu oleellisesti, kun siirrytään kolmiulotteiseen tapaukseen. Tällöin invariantin joukon rakenne voi olla hyvin monimutkainen (fraktaalinen) ja systeemin dynamiikka invariantissa joukossa voi olla kaaottinen.

Vaikka kaaosteoria on sinänsä mielenkiintoinen tutkimusalue, ei siihen tässä yhteydessä voida puuttua. Todettakoon vain, että jo hyvin yksinkertaiset epälineaariset mallit voivat käyttäytyä kaaottisesti, toisin sanoen kaaosta voi esiintyä ja sitä onkin löydetty yksinkertaisista fysikaalisista malleista.

⁵ Tällaisista jaksollisista ratkaisuista käytetään termiä *relaxation oscillation*.

7.5.4 Rakenteellinen stabiilisuus

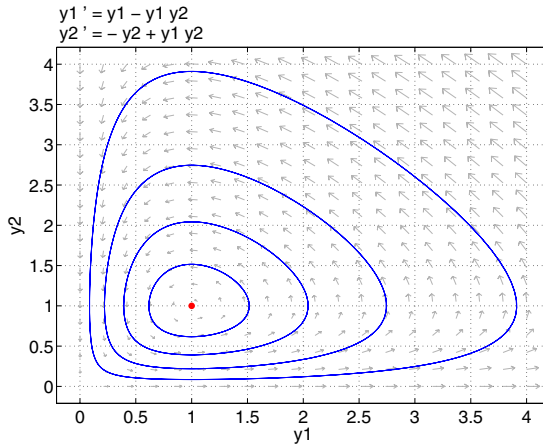
Dynaamisten systeemien rakenteellista stabiilisuutta on viime vuosikymmeninä tutkittu aktiivisesti, mutta tästä huolimatta avoimia ongelmia riittää. Koska teoria on hyvin monimutkainen tarkastellaan seuraavassa vain yhtä esimerkkiä, joka toivottavasti antaa jonkinlaisen käsityksen asiasta.

Lähdetään liikkeelle tunnetusta Lotkan ja Volterran peto-saalis-mallista:

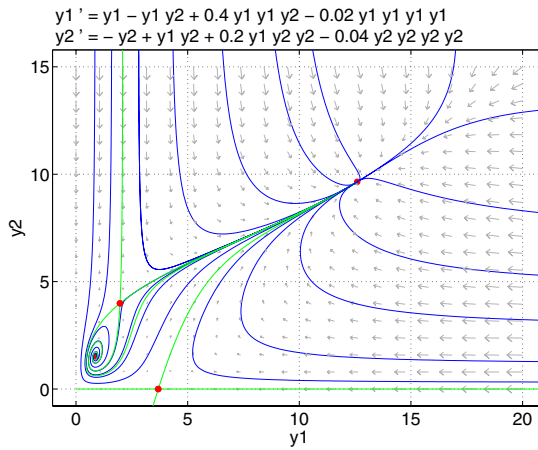
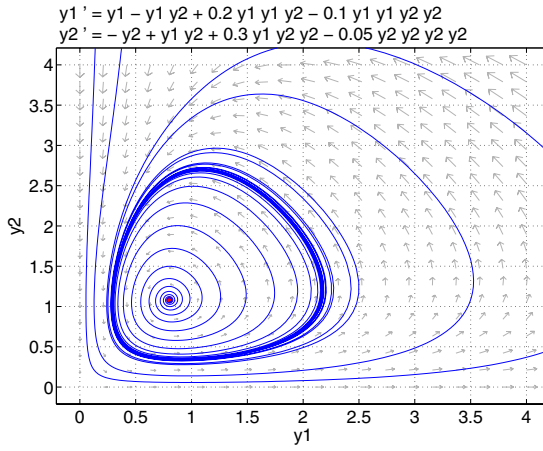
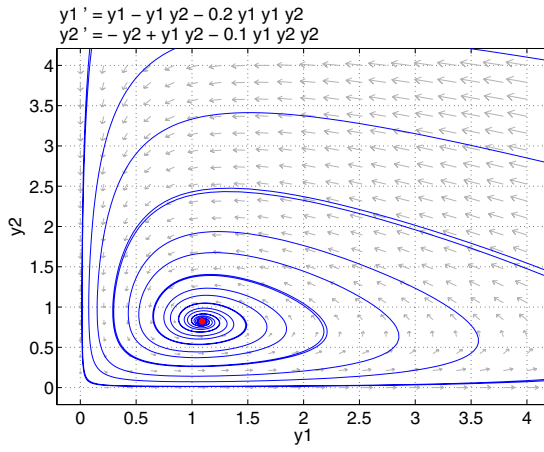
$$\begin{cases} y_1' = ay_1 - by_1y_2, \\ y_2' = -cy_2 + dy_1y_2. \end{cases} \quad (7.13)$$

Tässä y_1 on saalispopulaatio, y_2 on petopopulaatio, ja a , b , c ja d ovat positiivisia vakioita. Koska populaatiot ovat positiivisia, tila-avaruus on tässä alue $y_i \geq 0$. Vektorikentällä on (origon lisäksi) tasapainopiste $y_1 = c/d, y_2 = a/b$. Edelleen voidaan osoittaa, että muut ratkaisut kiertävät jaksollisesti tasapainopisteen ympäri (kuva 7.8). Tasapainopiste ei ole asympotoottisesti stabiili, mutta se on selvästi stabiili siinä mielessä, että lähellä olevat ratkaisukäyrät pysyvät lähellä.

[178]



Kuva 7.8. Yllä on alkuperäinen Lotkan ja Volterran malli. Seuraavan sivun ylimmäisessä kuvassa lisätermiit ovat muuttaneet tasapainopisteen asympotoottisesti stabiiliksi, ja kaikki jaksolliset ratkaisut ovat kadonneet. Seuraavan sivun keskimmäisessä kuvassa tasapainopiste on epästabiili, mutta sen ympärillä on stabiili jaksollinen ratkaisu. Alimmaisessa kuvassa puolestaan alkuperäinen tasapainopiste muuttui epästabiiliksi, mutta hyvin kauaksi ilmestyi uusi stabiili tasapainopiste.



[179]

Onko tämä malli rakenteellisesti stabiili? Tähän ei ole yksiselitteistä vastausta, vaan kaikki riippuu siitä minkälaisia ”pieniä” muutoksia systeemiin halutaan tarkastella. Ensimmäisenä mieleen tuleva ajatus olisi varioida vakiota a , b , c ja d . Selvästi tällöin tasapainopiste muuttuu jatkuvasti variaatioiden suhteen. Lisäksi jaksolliset ratkaisut pysyvät edelleen jaksollisina ratkaisuina, joten mallia voidaan pitää rakenteellisesti stabiilina mallin parametrien muutosten suhteen.

Tilanne muuttuu kuitenkin täysin, jos vektorikenttään lisätään uusia termejä. Kuvassa (7.8) on alkuperäisen systeemin lisäksi kolme muuta systeemiä, jotka kaikki poikkeavat varsin vähän alkuperäisestä *tasapainopisteen lähellä*. Kaukana tasapainopisteestä poikkeamat ovat kuitenkin suuria, ja kuten nähdään, tapauksesta riippuen saadaan hyvin erilaisia ratkaisuja. Tässä mielessä malli siis ei ole rakenteellisesti stabiili.

Vaikka tässä ei ole mahdollista (yrittää) määrittellä rakenteellista stabiiliuutta, se on silti tärkeä käsite ilmiöitä mallinnettaessa. Kaikki mallinnus perustuu jossain määrin puutteelliseen dataan, joten oleellinen osa mallinnusprosessia on pohtia, miten herkkä malli on eri termien ja parametrien muutosten suhteen.

[180]

7.6 Säilymislait

Palataan vielä pistemassan liikeyhtälöön

$$mx'' = F \iff \begin{cases} x' = v, \\ mv' = F, \end{cases}$$

missä siis $x(t) \in \mathbb{R}^3$ on konfiguraatioavaruuden piste ja $(x(t), v(t)) \in \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3$ on tila-avaruuden piste. Klassisessa mekaniikassa esiintyy usein tilanne, jossa voimakenttä on potentiaalifunktion gradientti: on siis olemassa jokin konfiguraatioavaruuden funktio U siten, että $F = -\nabla U$. Huomattakoon että potentiaaliin voi lisätä vakion ilman että voimakenttä muuttuu: siis vain potentiaalieroilla on merkitystä. Tilanne on täsmälleen sama, jos gravitaatiopotentiaalın sijaan tarkastellaan sähköpotentiaalia. Tällöin potentiaalieroa sanotaan jännitteeksi.

Jos voimakenttä on potentiaalifunktion U aiheuttama, systeemin potentiaalienergia konfiguraatioavaruuden pisteessä x on $U(x)$. Pistemassalla on myös liike-energiaa eli kineettistä energiaa $T = \frac{1}{2} m|v|^2$, jolloin kokonaisenergiaksi saadaan

$$E = T + U = \frac{1}{2} m|v|^2 + U(x) = \frac{1}{2} m|x'|^2 + U(x).$$

Esimerkkitapauksessa (7.3) $F = (0, 0, -mg)$, jolloin $U = mgx_3$, ja harmonisen värähtelijän tapauksessa $U(x) = \frac{1}{2} ax^2$.

Systeemeillä, joilla on potentiaalifunktio, on seuraava erittäin tärkeä ominaisuus: niiden kokonaisenergia pysyy vakiona ajan suhteen. Tämä on helppo tarkistaa suoraan derivoimalla:

$$\frac{d}{dt} E = m\langle x', x'' \rangle + \langle \nabla U, x' \rangle = \langle x', mx'' + \nabla U \rangle = 0.$$

Tällaista tila-avaruuden funktiota, jonka arvo pysyy vakiona ratkaisukäyriä pitkin, sanotaan *invariantiksi*, *liikevakioksi* tai *säilymislaiksi*. Säilymislait ovat erittäin tärkeitä systeemin ominaisuuksien analyysin kannalta. Tässä ei kuitenkaan voida puuttua siihen, miten voisi tutkia onko annetulla systeemillä säilymislakeja.

Katsotaan vielä hiukan tarkemmin harmonista värähtelijää. Tällöin kokonaisenergia on siis

$$E = \frac{1}{2} mv^2 + \frac{1}{2} ax^2.$$

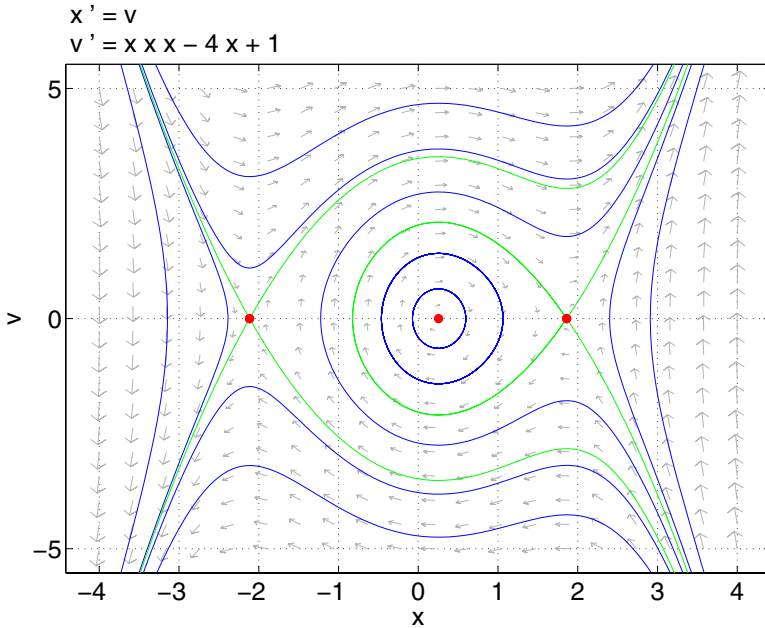
Lisäksi huomataan, että harmonisen värähtelijän yhtälöt ovat muotoa

$$\begin{cases} mx' = \partial E / \partial v, \\ mv' = -\partial E / \partial x. \end{cases}$$

Tällaista yhtälöä sanotaan *Hamiltonin systeemiksi* ja E on vastaava *Hamiltonin funktio*. Otetaan vielä lopuksi esimerkki Hamiltonin systeemistä, jossa potentiaalifunktio on hiukan monimutkaisempi:

$$\begin{cases} x' = \partial E / \partial v = v, \\ v' = -\partial E / \partial x = x^3 - 4x + 1, \end{cases} \quad E = \frac{1}{2} v^2 - \frac{1}{4} x^4 + 2x^2 - x. \quad (7.14)$$

Kuvassa 7.9 on muutamia ratkaisuja sekä tasapainopisteet. Havaitaan, että yhden tasapainopisteen ympärillä on ääretön määrä jaksollisia ratkaisuja. Edellä mainittiin, että ”tyypillisesti” annetulla systeemillä on vain äärellinen määrä jaksollisia ratkaisuja. Näin onkin yleisten systeemien tapauksessa, mutta *tyypillisellä Hamiltonin systeemillä* voi hyvinkin olla ääretön määrä jaksollisia ratkaisuja, kuten tässä esimerkissä. Syy tähän erilaiseen käytökseen on nimenomaan energian säilymisessä: säilymislaki ikään kuin ”rajoittaa” systeemin vapautta, joten se mikä on tyypillistä Hamiltonin systeemeille voi olla erittäin poikkeuksellista yleisille systeemeille.



[182]

Kuva 7.9 Hamiltonin systeemin (7.14) tasapainopisteet ja ratkaisukäyriä.

7.7 Lopuksi

Edellä on tarkasteltu muutamia yksinkertaisia differentiaaliyhtälömalleja sekä muutamia niiden analyysiin liittyviä peruskysymyksiä. Ehkä jo näistä esimerkeistä on käynyt ilmi, että differentiaaliyhtälömalleja voi tarkastella hyvin monelta kannalta. Toisaalta aiheen laajuuden takia läheskään kaikkia näkökulmia ei ole edes mainittu. Lisätietoa differentiaaliyhtälöistä saa seuraavista teoksista.

Eräs hyvä klassinen johdatus differentiaaliyhtälöihin on Coddingtonin ja Levinsonin kirja [4]. Hartman [8] on jo hieman modernimpi eli geometrisempi, ja uudemmissa kirjoista voi suositella kirjoja [9] ja [2]. Lisäksi Arnoldin kirja [1] on erittäin tunnettu, mutta Arnoldin tyyli on persoonallinen eikä ehkä kaikkien makuun.

Jos halutaan selvittää, ratkaako jokin tietty differentiaaliyhtälö eksplisiittisesti, vastausta kannattaa etsiä Kamken kirjasta [11]. Symbolisen laskennan ohjelmistot, kuten Mathematica ja Maple, osaavat jonkin verran ratkaista differentiaaliyhtälöitä.

Differentiaaliyhtälöiden numeerisia ratkaisumenetelmiä käsitellään kattavasti kirjoissa [6] ja [7]. Symmetria-analyysiin voi perehtyä Hydonin kirjan avulla [10]. Klassisen mekaniikan monet ongelmat voidaan ratkaista differentiaaliyhtälöiden avulla, eräs moderni johdatus aiheeseen on [3]. Klassisen mekaniikan yhtälöt johdetaan usein jostakin variaatioperiaatteesta; näillä malleilla on siis läheisiä yhteyksiä sekä (optimi)säätöön että variaatiolaskuun. Edelliseen voi perehtyä Sontagin kirjan avulla [12] ja erittäin perusteellinen johdatus jälkimmäiseen on [5].

Edellä olleet kuvat on piirretty ohjelmien `dfield7` ja `pplane7` avulla. Nämä Matlabissa toimivat ohjelmat löytää osoitteesta <http://math.rice.edu/~dfield/>.

7.8 Harjoitustehtäviä

1. Pohdi missä mielessä on ”totta”, että planeetat kiertävät ellipsinmuotoisia ratoja.
2. Mikä on systeemin (7.4) voimakentän potentiaalifunktio?
3. Näytä että systeemillä (7.4) todella on ellipsiratkaisuja. Onko sillä muita ratkaisuja? Ohje: kaksiulotteisen systeemin tarkastelu riittää, koska sopivalla koordinaatiston valinnalla voidaan asettaa $x_3 = 0$.
4. Jos f tehtävässä (7.6) on pelkästään jatkuva, ratkaisu ei välttämättä ole yksikäsitteinen. Tarkista tämä tapauksessa $y' = y^{2/3}$.
5. Puhutaan sekä Keplerin että Newtonin laeista. Pohdi, onko sanalla laki näissä tapauksissa sama merkitys.
6. Millä seuraavista sanoista sana laki voitaisiin korvata Newtonin lakien tapauksessa:
 - lause, määritelmä, oletus, aksiooma, hypoteesi, teoria, malli

Entä Keplerin lakien tapauksessa?

7. Ratkaise eksplisiittisesti harmoninen ja vaimennettu värähtelijä.

8. Jos tasapainopiste ei ole hyperbolinen, linearisoitu systeemi ei välttämättä anna mitään tietoa alkuperäisestä systeemistä. Tarkastele esimerkiksi tehtävien $y' = y^2$, $y' = y^3$ ja $y' = -y^3$ tasapainopisteiden stabiilisuutta.
9. Tutki numeerisesti parametrien α ja ω vaikutusta van der Polin yhtälön (7.12) ratkaisuihin.
10. Pohdi onko Lotkan ja Volterran malli (7.13) järkevä. Tulkitse ja perustelee biologisesti vektorikentän eri termit.
11. Mitkä muut kuvan 7.8 malleista voisivat olla biologisesti järkeviä? Miksi?
12. Tarkastellaan Hamiltonin systeemiä (7.14). Tutki numeerisesti rakenteellista stabiilisuutta, kun muutetaan ”vähän”
- Hamiltonin funktiota
 - vastaavaa vektorikenttää.
13. Näytä, että Hamiltonin systeemeillä ei voi olla asympotoottisesti stabiileja tasapainopisteitä.

[184]

7.9 Merkintöjä

- Kompleksiluvun λ reaaliosa on $\operatorname{Re}\lambda$.
- Kahden vektorin $x, y \in \mathbb{R}^n$ sisätulo (tai pistetulo tai skalaaritulo) on

$$\langle x, y \rangle = \sum_{i=1}^n x_i y_i.$$

Vektorin pituus eli normi on tällöin $|x| = \sqrt{\langle x, x \rangle}$.

- Olkoon $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$. λ on A :n ominaisarvo ja $x \neq 0$ on vastaava ominaisvektori, jos

$$Ax = \lambda x.$$

Huomaa että λ ja x voivat olla kompleksisia vaikka A olisi reaalinen. A :n ominaisarvojen joukolle eli spektrille käytetään yleensä merkintää $\sigma(A)$.

- Olkoon $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$. Tällöin f :n *Jacobin matriisi* eli (*ensimmäinen*) *differentiaali* on

$$df = \begin{pmatrix} \partial f_1/\partial y_1 & \dots & \partial f_1/\partial y_n \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \partial f_n/\partial y_1 & \dots & \partial f_n/\partial y_n \end{pmatrix}$$

Jos lasketaan df :n arvo pisteessä p , niin merkitään df_p . Huomattakoon että jatkuvan aineen mekaniikassa Jacobin matriisille usein käytetään merkintää ∇f . Muissa yhteyksissä ∇g kuitenkin tarkoittaa *gradienttia*:

$$g: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}, \quad \nabla g = (\partial g/\partial y_1, \dots, \partial g/\partial y_n).$$

Kirjallisuutta

- [1] V. I. Arnold. *Ordinary differential equations*. Universitext. Springer-Verlag, Berlin, 2006. 2nd printing of the 1992 edition.
- [2] D. K. Arrowsmith and C. M. Place. *Dynamical systems*. Chapman and Hall Mathematics Series. Chapman & Hall, London, 1992.
- [3] A. M. Bloch. *Nonholonomic mechanics and control*, volume 24 of *Interdisciplinary Applied Mathematics*. Springer-Verlag, 2003.
- [4] Earl A. Coddington and Norman Levinson. *Theory of ordinary differential equations*. McGraw-Hill Book Company, Inc., New York-Toronto-London, 1955.
- [5] M. Giaquinta and S. Hildebrandt. *Calculus of variations. I*, volume 310 of *Grundlehren*. Springer-Verlag, 1996. The Lagrangian formalism.
- [186] [6] E. Hairer, S. P. Nørsett, and G. Wanner. *Solving ordinary differential equations. I*, volume 8 of *Springer Series in Computational Mathematics*. Springer-Verlag, 2nd edition, 1993.
- [7] E. Hairer and G. Wanner. *Solving ordinary differential equations. II*, volume 14 of *Springer Series in Computational Mathematics*. Springer-Verlag, 2nd edition, 1996.
- [8] P. Hartman. *Ordinary differential equations*, volume 38 of *Classics in Applied Mathematics*. Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM), Philadelphia, PA, 2002.
- [9] M. Hirsch, S. Smale, and R. Devaney. *Differential equations, dynamical systems, and an introduction to chaos*, volume 60 of *Pure and Applied Mathematics (Amsterdam)*. Elsevier/Academic Press, Amsterdam, 2nd edition, 2004.
- [10] P. Hydon. *Symmetry methods for differential equations*. Cambridge Texts in Applied Mathematics. Cambridge University Press, 2000.

- [11] E. Kamke. *Differentialgleichungen*. B. G. Teubner, 1977. Lösungsmethoden und Lösungen. I: Gewöhnliche Differentialgleichungen, Neunte Auflage.
- [12] E. Sontag. *Mathematical control theory*, volume 6 of *Texts in Applied Mathematics*. Springer-Verlag, 2nd edition, 1998.

8

Kontinuumimallit

TIMO TIIHONEN

8.1 *Motivointi*

[188]

Ovatko vappupallot vaaraksi lentoliikenteelle ja miten korkealle ne nousevat? Tässä muodossaan kysymys on tietysti vähän naiivi ja teennäinen. Toisaalta esimerkiksi säähavaintopallot lähetetään nousemaan ylempään ilmakehään mittaamaan ja välittämään säähavaintoja. Tällaisen kokeen suunnittelemiseksi on hyvä tietää, miten korkealle pallot nousevat ja kauanko nouseminen kestää.

Jos yksinkertaisuuden vuoksi oletetaan, että pallo ei muuta muotoaan (ei laajene), on lakikorkeus periaatteessa helppo määrätä. On etsittävä korkeus h , jolle $\rho_{\text{ilma}}(h) \cdot V_{\text{pallo}} = m_{\text{pallo}}$, missä m_{pallo} on täytetyn pallon bruttomassa (kaasu ja pallo mahdollisine kuormineen), V_{pallo} vastaava tilavuus ja ρ_{ilma} ilman tiheys. Jos tämän riippuvuus korkeudesta tunnetaan, rajakorkeus on ratkaistavissa.

Edellinen päättely ei kuitenkaan anna tietoa nousunopeudesta eikä siitä, laajeneeko pallo ohuempaan ilmakehään noustessaan. Myöskään ilman tiheyden korkeusriippuvuuteen emme näin löydä vielä mitään selitystä. Jotta näihin kysymyksiin voitaisiin vastata, on tilannetta tarkasteltava yksityiskohtaisemmin.

Luonteva työkalu tähän tarkasteluun on kontinuumimekaniikka, joka kuvaa makroskooppisten fysikaalisten systeemien ominaisuuksia eli systeemien, joissa aineen jakautuminen atomeihin tai molekyyliin ei käy-

tännössä näy kokonaisuuden tasolla. Tällöin eri ominaisuudet voidaan kuvata ajan ja paikan suhteen jatkuvilla funktioilla¹. Seuraavassa käymme lyhyesti läpi peruskäsitteet ja tekniikat, joilla mahdollisesti muuttuvien ja liikkuvien osajärjestelmien ominaisuuksia voidaan kuvata matemaattisesti. Tämän jälkeen muotoillaan keskeiset säilymisperiaatteet, jotka pätevät kaikille termodynaamisille² systeemeille. Kun tämä on tehty, voidaan palata esimerkkitaustaan ja siihen sisältyviin ilmiöihin.

8.2 Peruskäsitteitä

Ennen peruskäsitteiden esittelyä on tarpeen käydä läpi muutamia merkintöjä. Mallien kuvaamisessa tarvitaan monenlaisia suureita, skalaarivakioita ja -muuttujia, vektoriarvoisia muuttujia sekä matriisiarvoisia suureita. Näitä ei tässä erotella merkinnällisesti millään tavoin, vaan suureen luonne on pääteltävä asiayhteydestä. Kun on tarpeen viitata esimerkiksi vektorin yksittäiseen komponenttiin, tämä tehdään käyttämällä alaindeksiä (yleensä joukosta $\{i, j, k, l\}$). Vastaavasti matriisin alkioon viitataan kahdella alaindeksillä.

Derivaatoille käytetään usein lyhennettyjä merkintöjä

$$u_t = \frac{\partial u}{\partial t}, \quad u_{,i} = \frac{\partial u}{\partial x_i}. \quad [189]$$

Gradienttioperaattoria merkitään ∇ :lla

$$\nabla u = (u_{,1}, \dots, u_{,d}),$$

jossa d on avaruuden dimensio (yleensä 3). Vektorien pistetuloa merkitään pisteellä ja tätä sovelletaan myös gradienttioperaattoriin,

$$\nabla \cdot v = \sum_{i=1}^d v_{i,i} =: v_{i,i}.$$

Yllä otettiin käyttöön ns. Einsteinin summaussääntö. Se tarkoittaa, että lausekkeissa, joissa esiintyy ala-indeksejä (joko vektorin tai matriisin komponentteja tai osittaisderivaattoja), saman indeksin toistuminen merkitsee summausta kyseisen indeksin yli. Pistetulo yleistyy myös matriiseille

1 Käytännössä kuvaukset ovat yleensä vain paloittain jatkuvia erilaisten materiaali-rajapintojen takia.

2 Termodynamiikalla viitataan tässä lähinnä klassiseen mekaniikkaan ja lämpöoppiin. Erittäin suljemme pois suhteellisuusteorian, joka samaistaa massan ja energian.

$$A : B = \sum_{i,j=1}^d A_{ij} B_{ij} =: A_{ij} B_{ij}.$$

Usein esiintyviä symboleja ovat myös Laplacen operaattori $\Delta = \nabla \cdot \nabla$ ja Kroneckerin delta, δ , jolle pätee: $\delta_{ij} = 0$, jos $i \neq j$ ja $\delta_{ij} = 1$ jos $i = j$.

8.2.1 Eulerin ja Lagrangen koordinaatit

Tarkastellaan liikkuvaa ja muotoaan muuttavaa systeemiä. Kun pyritään kuvaamaan systeemiä ja sen ominaisuuksia, on käytännössä valittava, tarkastellaanko systeemin muodostavia partikkeleita (massapisteitä) vai sitä tilaa, jossa systeemi liikkuu. Jokaisella hetkellä voimme viitata yksittäiseen pisteeseen joko viittaamalla tiettyyn paikkaan (riippumatta siitä mikä systeemin materiaalipiste (jos mikään) on tuossa paikassa) tai viittaamalla yksittäiseen materiaalipisteeseen.

Merkitään x :llä geneeristä (3-ulotteisen) avaruuden pistettä (valitussa koordinaatistossa) ja t :llä ajanhetkeä. Olkoon vastaavasti X geneerinen materiaalipiste. Nyt jokaisella ajanhetkellä t materiaalipiste on jossakin avaruuden pisteessä. Ilmaistaan tämä kuvauksen χ avulla:

[190]

$$x = \chi(X, t) \quad (\text{tai lyhyesti } x = x(X, t)).$$

Massapisteille X saadaan koordinaatistostrukturi, kun valitaan referenssi-ajanhetki $t = 0$ ja samaistetaan materiaalipiste X paikkakoordinaattiinsa hetkellä $t = 0$, toisin sanoen asetetaan $X = x(X, 0)$. Viitataan siis materiaalipisteeseen sen sijainnilla referenssijänhetkellä. Jatkossa kutsutaan X :ää materiaali- eli Lagrangen koordinaatiksi ja x :ää avaruuskoordinaatiksi (Eulerin koordinaatiksi).

Oletetaan, että materiaalin liike on jatkuvaa ajan ja paikan suhteen ja että kaksi materiaalipistettä ei ole koskaan samassa pisteessä samaan aikaan. Tällöin on olemassa käänteiskuvaus $\chi^{-1}(x, t) = X$, joka kertoo, mikä materiaalipiste on milloinkin paikassa x .

Pisteen X siirtymä on $u(X) = \chi(X) - X$. Nopeus määritellään asettamalla

$$v(X, t) = \frac{\partial x}{\partial t}(X, t),$$

joka antaa materiaalipisteen nopeuden hetkellä t . Nopeus paikassa x hetkellä t saadaan kaavasta

$$v(x, t) = v(\chi^{-1}(x, t), t).$$

Vastaavasti voidaan määritellä myös kiihtyvyyden Lagrangen kuin Eulerin koordinaateissa.

8.2.2 Materiaaliderivaatta

Olkoon f jokin materiaaliin liittyvä suure (esim. lämpötila, nopeus). Miten f muuttuu ajan funktiona? Tarkastellaan aluksi f :n kehitystä yhdessä materiaalipisteessä. Määritellään f :n materiaaliderivaatta seuraavasti

$$\frac{Df}{Dt} = \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_X,$$

eli derivoidaan ajan suhteen seuraten yhtä materiaalipistettä. Jos f on tällöin annettu funktiona materiaalikoordinaatistossa $f = f(X, t)$, saadaan

$$\frac{Df}{Dt} = \frac{\partial f}{\partial t}(X, t).$$

Toisaalta, jos f on esitetty avaruuskoordinaateissa $f = f(x, t)$, saadaan

$$\begin{aligned} \frac{Df}{Dt}(x, t) &= \frac{Df}{Dt}(x(X, t), t) = \frac{\partial f}{\partial t}(x, t) + \sum_{i=1}^3 \frac{\partial f}{\partial x_i}(x, t) \frac{\partial x_i}{\partial t}(X, t) \\ &= \frac{\partial f}{\partial t}(x, t) + v(x, t) \cdot \nabla f(x, t). \end{aligned}$$

[191]

Tällöin ensimmäinen termi kuvaa f :n muutosta ajan funktiona, toinen taas havaittua muutosta, joka johtuu systeemin liikkeestä tarkastelupisteen ohi.

Jos joukko $\Omega \subset \mathbf{R}^3$ kuvaa materiaalipisteitä hetkellä $t = 0$, niin merkitään materiaalipisteiden joukkoa hetkellä t

$$\Omega_t = \{x(X, t) \mid X \in \Omega\}.$$

8.2.3 Integrointi muuttuvassa alueessa

Olkoon $\Omega \subset \mathbf{R}^n$ suhteellisen sileä alue ja f jatkuvasti derivoituva, $f \in (C^1(\Omega))^n$. Oletetaan nyt, että sekä Ω että f riippuvat ajasta t . Miten silloin riippuu ajasta integraali $\int_{\Omega} f dx$? Erityisesti, mitä on

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega(t)} f(x, t) dx?$$

Integrointi voidaan palauttaa kiinteään alueeseen muuttujanvaihdolla,

$$\int_{\Omega(t)} f(x, t) dx = \int_{\Omega(0)} f(X, t) |J| dX,$$

jossa $|J|$ on liikkeen Jacobin determinanti, $J_{ij} = \frac{\partial x_i}{\partial X_j}$. Derivointi t :n suhteen voidaan nyt suorittaa integraalin sisällä ja palauttaa tulos muuttujanvaihdolla takaisin alueeseen $\Omega(t)$. Lopputulos voidaan esittää useassa eri muodossa. Esimerkiksi

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{\Omega(0)} f(X, t) |J| dX &= \int_{\Omega(t)} \frac{Df}{Dt} + f \nabla \cdot v dx \\ &= \int_{\Omega(t)} \frac{\partial f}{\partial t} dx + \int_{\partial\Omega(t)} f v \cdot n ds. \end{aligned}$$

Tarvitaan myös työkalu, jolla voidaan suhteuttaa toisiinsa reuna- ja tilavuusintegraaleja. Tähän tarkoitukseen käytetään Gaussin kaavaa

[192]

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot f dx = \int_{\partial\Omega} f \cdot n ds,$$

jossa n on $\partial\Omega$:n ulkoinen yksikkönormaali.

8.3 Säilymlait

Esimerkin kaasupallolla, kuten millä tahansa fysikaalisella systeemillä tai sellaisen osalla, on monia ominaisuuksia, joista osa voi muuttua ajan funktiona. Näiden muutosten selittäminen on keskeistä mallintamisessa. Tiedyt ominaisuudet ovat tässä suhteessa osoittautuneet olevan erityisasemassa systeemistä riippumatta. Nämä ovat niin sanottuja säilyviä ominaisuuksia tai suureita. Tämä tarkoittaa, että kaikille osasysteemeille näiden ominaisuuksien muuttuminen voidaan jäsentää yhdenmukaisella tavalla, jota kutsutaan säilymlaiksi tai -periaateeksi. Periaate on hyvin yksinkertainen ja intuitiivinen. Säilyvän suureen muutos osasysteemissä selittyy säilyvän suureen vuolla osasysteemin pinnan läpi sekä suureen syntyemisellä tai häviämällä osasysteemin sisällä.

8.3.1 Yleinen säilymislaki

Tarkastellaan säilymislain rakennetta hieman matemaattisemmin. Olkoon $\Omega = \Omega(t)$ mahdollisesti liikkuva ja deformoituva osasysteemi. Kuvataan sen materiaaliitiheyttä muuttujalla ρ . Olkoon a muuttuja, joka kuvaa jotain säilyvää ominaisuutta massayksikköä kohden. Merkitään b :llä tämän suureen syntymisnopeutta massayksikköä kohden. Olkoon edelleen c säilyvän ominaisuuden vuo. Säilymislaki voidaan tällöin kirjoittaa muotoon

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega(t)} \rho a \, dx = \int_{\Omega(t)} \rho b \, dx + \int_{\partial\Omega(t)} c \cdot n \, ds.$$

Reunaintegraali voidaan palauttaa alueintegraaliksi Gaussin kaavalla. Myös vasemman puolen aikaderivaatta voidaan viedä integraalin sisään, jolloin kaikki kolme termiä saadaan saman integraalin alle:

$$\int_{\Omega(t)} \frac{D\rho a}{Dt} + \rho a \nabla \cdot v - \rho b - \nabla \cdot c \, dx = 0.$$

Tämä pätee kaikille (säännöllisille) osasysteemeille Ω . Jos ρ , a , b ja c ovat jatkuvia, tästä seuraa erityisesti, että yhtäsuuruus pätee pisteittäin. Näin syntyvää pisteittäistä lakia voi soveltaa mihin tahansa säilyvään suureeseen. Seuraavaksi käydään läpi termodynamiikan keskeiset säilymisperiaatteet.

[193]

8.3.2 Klassiset säilymislait

Massan säilymislaki

Massan säilymislaki on yksinkertainen. Säilyvä suure massayksikköä kohden on $a = 1$. Osasysteemi Ω koostuu massapisteistä, joten se seuraa materiaalin liikettä. Siten systeemin rajapinnan läpi ei ole massavuota eli $c = 0$. Massaa ei myöskään synny eikä häviä eli $b = 0$. Siten saadaan laki

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot v = 0 \quad \text{tai} \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho v) = 0.$$

Liikemäärän säilymislaki (Newtonin I laki)

Säilyvä suure on liikemäärä eli massa \cdot nopeus. Siispä $a = v$ ja säilyvä suure on vektoriarvoinen.

Osasysteemin liikemäärään vaikuttavat sekä suoraan massaan kohdistuvat voimat, esimerkiksi gravitaatio, jolle $b = g$ (voima massayksikköä kohden eli kiihtyvyyks), että systeemin pintaan kohdistuvat voimat, joita merkitään symbolilla $c = \tau$ (voima pinta-alayksikköä kohden), joka kuvaa jännitystensoria³.

Soveltamalla edellä annettuja kaavoja saadaan pisteittäinen ehto

$$\frac{D}{Dt}(\rho v) + \rho v \nabla \cdot v - \nabla \cdot \tau - \rho g = 0.$$

Tätä voidaan edelleen sieventää hyödyntämällä massan säilymlakia, jolloin päästään muotoon

$$\rho \frac{Dv}{Dt} - \nabla \cdot \tau - \rho g = 0.$$

Kulmaliikemäärän säilymlaki

Kulmaliikemäärän säilymlaki ohitetaan yleensä varsin nopeasti, sillä se on rakenteeltaan liikemäärän säilymlain kaltainen. Jokaisessa termissä vain voima korvataan sen aiheuttamalla vääntömomentilla origon suhteen (tarkemmin harjoitustehtävien yhteydessä). Sievennysten jälkeen tästä jää jäljelle ainoastaan ehto, jonka mukaan jännitystensorin τ on oltava symmetrinen:

[194]

$$\tau = \tau^t.$$

Energian säilymlaki

Systeemin energia massayksikköä kohden voidaan ilmaista sisäisen energian ja liike-energian avulla: $a = E + \frac{1}{2}v \cdot v$, jossa E on sisäinen energia massayksikköä kohti.

Systeemin energiaan vaikuttavat ulkopinnalla lämmön virtaus reunan läpi q sekä ulkoisen voiman tekemä työ $\tau \cdot v$. Näin $c = q + \tau \cdot v$. Systeemin sisällä energiaa puolestaan voivat tuottaa sekä sisäiset lämmönlähteet h että massaan vaikuttavien voimien tekemä työ $g \cdot v$. Näin ollen $b = h + g \cdot v$.

Näistä koostettavaa säilymlakia voidaan sieventää hyödyntämällä massan ja liikemäärän säilymlakia, jolloin energian säilymlaista jää jäljelle

3 Tarkasteltaessa pinnan pisteeseen x kohdistuvia voimia havaitaan, että voiman tulee olla vektori. Merkitään tätä F :llä. Toisaalta pinta määrittyy x :n ympäristössä yksikkönormaalinsa n kautta. Tällöin $F = F(x, n)$. Nyt osoittautuu, että itse asiassa on olemassa matriisi $\tau(x)$, siten että $F(x, n)_i = \tau_{ij}(x)n_j$ kaikille mahdollisille normaalin suunnille n . Tätä matriisiä kutsutaan jatkossa jännitystensoriksi. Tässä yhteydessä ei ole mahdollista perehtyä tarkemmin tensorin käsitteeseen.

$$\underbrace{\rho \frac{DE}{Dt}}_{\text{sisäisen energian muutos}} - \underbrace{\nabla \cdot q}_{\text{lämpövuoto}} - \underbrace{\tau : \nabla v}_{\text{liikkeen aikaansaama lämpöteho}} - \underbrace{\rho h}_{\text{lämmönlähteet}} = 0.$$

Termodynamiikan II pääsääntö

Edellä mainittuja säilymlakeja ei voi käytännössä käsitellä mainitsematta myös termodynamiikan toista pääsääntöä, joka tunnetaan myös Clausiuksen ja Duhemin epäyhtälönä. Se on säilymlakeihin rinnastettava periaate, joka käytännössä säätelee energian eri olomuotojen välisiä muutoksia. Kyse ei ole säilymlaista vaan säilymlain tapaisesta epäyhtälöstä, joka sanoo, että entropia ei ainoastaan säily vaan pyrkii jopa kasvamaan – muutos on suurempi tai yhtä suuri kuin vastaavien lähde ja vuotermien yhteisvaikutus. Yleisen säilymlain rakennetta mukaillen tämä voidaan kirjoittaa valitsemalla ”säilyväksi” suureeksi $a = S$, entropia. Vuotermi on $c = q/T$, jossa T on absoluuttinen lämpötila ja lähde-termi $b = h/T$. Näin päädytään epäyhtälöön

$$\frac{D}{Dt}(\rho S) + \rho S \nabla \cdot v - \nabla \cdot (q/T) - \rho h/T \geq 0.$$

[195]

Soveltamalla massa- ja energiatasapainoa saadaan epäyhtälölle yksinkertainen muoto

$$\rho \left(\frac{DS}{Dt} - \frac{1}{T} \frac{DE}{Dt} \right) + \frac{1}{T} \tau : \nabla v + \frac{1}{T^2} q \cdot \nabla T \geq 0.$$

Termodynamiikassa käytetään yleisesti myös muita kuin edellä mainittuja suureita, kuten Helmholtzin vapaata energiaa, joka määritellään

$$A = E - ST.$$

Tällöin E voidaan eliminoida A :n avulla, sillä

$$\frac{DA}{Dt} = \frac{DE}{Dt} - S \frac{DT}{Dt} - T \frac{DS}{Dt},$$

joten epäyhtälö saadaan muotoon

$$-\frac{\rho}{T} \left(\frac{DA}{Dt} + S \frac{DT}{Dt} \right) + \frac{1}{T} \tau : \nabla v + \frac{1}{T^2} q \cdot \nabla T \geq 0.$$

8.3.3 Yhteenvedo

Kerrataan edellä esiintyneet säilymlait ja periaatteet

$$\begin{aligned} \frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot v &= 0, & \text{massan s.l.,} \\ \rho \frac{Dv}{Dt} - \nabla \cdot \tau - \rho g &= 0, & \text{liikemäärän s.l.,} \\ \tau &= \tau^t, & \text{kulmaliikemäärän s.l.,} \\ \rho \frac{DE}{Dt} - \nabla \cdot q - \tau : \nabla v - \rho h &= 0, & \text{energian s.l.,} \\ \frac{D}{Dt} (\rho S) + \rho S \nabla \cdot v - \nabla \cdot (q/T) - \rho h/T &\geq 0, & \text{Clausius-Duhem.} \end{aligned}$$

[196]

Nämä ovat käytännössä aina voimassa, mutta ne eivät yksinään riitä vielä mallintamaan konkreettisia tapauksia. Säilymlakeja on vielä muitakin. Sähkömagnetismia kuvaavista yhtälöistä voidaan tunnistaa yllä esitettyssä muodossa kirjoitettavat sähkövarauksen ja magneettisen monopolin säilymlait, joskaan näitä ei yleensä käytetä säilymlakimuotoisina.

Koska säilymlait ovat käytännössä universaaleja, varsinaisen sovelluskohtainen mallintaminen rakentuu näiden päälle, usein jopa niin, että lopullisissa malleissa säilymlakien aukikirjoittaminen unohtuu soveltajilta, mikä tekee malleista asiaan vihkiytymättömälle matemaatikolle käytännössä mahdottomia tulkittavia.

8.4 Materiaalilait (constitutive laws)

Jos tarkastellaan edellä esitettyjä säilymlakeja kolmiulotteisessa tapauksessa, saadaan kahdeksan yhtälöä ja yksi epäyhtälö. Toisaalta tuntemattomia ovat ρ , v , τ , E , q , S ja T , jos oletetaan, että massavoima g ja lämpölähde h tunnetaan. Komponenteittain tuntemattomia on siis 19. Tarvitaan siis vielä 10–11 yhtälöä tuntemattomien ρ , v , τ , E , S , T ja q välille.

Ensiksi on valittava riippumattomat muuttujat, joiden funktiona muut pyritään ilmaisemaan. Yleensä riippumattomiksi muuttujiksi valitaan joko nopeus v (nesteet ja kaasut) tai siirtymä u (kiinteät aineet) ja kaksi termodynaamista suuretta (ρ , E , T , P (paine) tai S). Suljettu systeemi saadaan, jos löydetään lait, jotka antavat τ :n, q :n ja loput termodynaamiset suureet

perustuntemattomien funktiona. Nämä niin kutsutut materiaalilait perustuvat usein vain kokeellisen tiedon pohjalta tehtyyn hyvään arvaukseen. Arvaus ei kuitenkaan saa olla täysin mielivaltainen, vaan materiaalilaeilta edellytetään tiettyjä universaaleja ominaisuuksia:

Kausaalisuus Riippuvan muuttujan arvo hetkellä t_0 riippuu vain riippumattomien muuttujien arvoista hetkillä $t \leq t_0$ (eli tulevaisuus ei voi vaikuttaa tähän hetkeen).

Lokaalisuus Riippuvan muuttujan arvo materiaalipisteessä X riippuu riippumattomien muuttujien arvoista vain X :n mielivaltaisen pienessä ympäristössä (riippuvuus vain muuttujien ja niiden derivaattojen arvoista samassa pisteessä.).

Objektiivisuus Materiaalilain tulee olla riippumaton koordinaatistosta (kunhan koordinaatisto on ortogonaalinen). Tämä tarkoittaa sitä, että systeemin tulee näyttää samalta riippumatta tarkkailijan asemasta tai liikkeestä. Esimerkiksi nopeus ei ole objektiivinen suure. Sen sijaan suhteellinen nopeus on.

Termodynaaminen hyväksyttävyyys Materiaalilait eivät saa johtaa ristiriitaan termodynamiikan toisen pääsäännön kanssa.

[197]

Edellisistä periaatteista seuraa käytännössä, että oleellisesti $q = q(\nabla T)$ ja $\tau = \tau(P, \bar{\varepsilon}(u), \varepsilon(v))$, missä

$$\bar{\varepsilon}(u)_{ij} = \frac{1}{2}(u_{i,j} + u_{j,i} + u_{k,i}u_{k,j})$$

ja

$$\varepsilon(v)_{ij} = \frac{1}{2}(v_{i,j} + v_{j,i})$$

ovat venymä- ja venymänopeustensorit. Näiden lisäksi tarvitaan yksi, niin kutsuttu tilayhtälö, joka määrää yhden termodynaamisen suureen kahden muun funktiona.

8.5 Ilmapallosesimerkki

Palataan nyt alussa esitettyyn ilmapallosesimerkkiin, josta voidaan tunnistaa useampi osaongelma. Voidaan esimerkiksi pyrkiä selittämään, miten pallon ja ilman välinen tiheusero aiheuttaa nosteen palloon, millaisia virtauksia tästä syntyy ja mitkä asiat määräävät nousunopeuden. Toisaalta tarvitaan tietoa myös ilmakehän tiheysprofiilista. Samoin on selitettävä pallon ja ilmakehän paine-eron kehittyminen ja sen vaikutus palloon. Tähän liittyy myös kysymys pallon lämpötilan kehittymisestä tarkasteltavan tilanteen aikana. Kaikki nämä ilmiöt vaikuttavat yhtä aikaa, mutta havainnollisuuden vuoksi pyritään etenemään askel kerrallaan.

8.5.1 Kaasuvirtaukset

Tarkastellaan aluksi yksinkertaistettua tilannetta, jossa pallo liikkuu ympäröivän kaasun suhteen annetulla nopeudella. Tällöin luonnollisesti myös kaasu liikkuu. Miten tämä liike kuvataan ja mitä voimia se aiheuttaa?

Kaasussa pätevät massan, liikemäärän ja energian säilymislaivit:

$$\begin{aligned}
 [198] \quad & \frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot v = 0, \\
 & \rho \frac{Dv}{Dt} - \nabla \cdot \tau - \rho g = 0, \\
 & \tau = \tau^t, \\
 & \rho \frac{DE}{Dt} - \nabla \cdot q - \tau : \nabla v - \rho h = 0.
 \end{aligned}$$

Perustuntemattomiksi valitaan tiheys ja nopeus sekä tilanteesta riippuen joko energia E tai lämpötila T . Massavoima g ja lämmönlähde h oletetaan tunnetuiksi. Yhtälöryhmä voidaan sulkea sopivilla materiaalilaeilla. Kaasuille sopivia lakeja ovat $q = k \nabla T$, jossa k on lämmönjohtavuus ja T absoluuttinen lämpötila, $\tau_{ij} = 2\mu \varepsilon_{ij}(v) - P \delta_{ij}$, jossa μ on viskositeetti ja P on paine sekä kaasun tilanyhtälö, joka voidaan esittää useassa eri muodossa. Koulufysiikasta voi olla tuttu esimerkiksi ideaalikaasun tilanyhtälö, $P = RT\rho$, jossa R on kaasuvakio. Siihen, että nämä lait todella sulkevat yllä mainitun systeemin, palataan vähän myöhemmin. Tässä vaiheessa yksinkertaistetaan tilannetta olettamalla, että $k = 0$ ja $P = P(\rho)$, jolloin energiayhtälöä ei tarvita virtausten mallintamisessa.

Säilymislakiyhtälöt saadaan muotoon

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot v = 0,$$

$$\rho \left(\frac{\partial v}{\partial t} + v \cdot \nabla v \right) - 2\mu \Delta v + \nabla P(\rho) = \rho g.$$

Tilanteen tarkastelua voidaan vielä yksinkertaistaa tekemällä sopivia oletuksia. Jos nopeudet ovat pieniä (suhteessa äänennopeuteen), virtaus ei juuri vaikuta kaasun tiheyteen eli ρ on vakio. Pienillä nopeuksilla nopeuden neliöllinen termi on myös hyvin pieni, joten sen voi supistaa yhtälöstä pois. Näin yhtälöryhmä supistuu muotoon

$$\nabla \cdot v = 0,$$

$$-2\mu \Delta v + \nabla P = \rho g,$$

jotka tunnetaan Stokesin yhtälöinä hitaalle stationääriselle virtaukselle.

Näitä yhtälöitä tulee vielä täydentää reunaehdoilla eli ehdoilla, joiden on toteuduttava muun muassa pallon pinnalla. Jos valitaan koordinaatisto niin, että pallo pysyy sen suhteen paikallaan, saadaan ehdon $v = 0$ pallon pinnalla. Vastaavasti $v = v_0$ ”äärettömyydessä”. Näillä ehdoilla on jo mahdollista muotoilla tilanteesta numeerinen malli korvaamalla ääretön ilmakehä jollakin äärellisellä tilavuudella, jonka reunalla asetetaan sopivat ehdot.

Virtauksen palloon kohdistama kokonaisvoima on $\int_{\partial\Omega} \tau \cdot n$. Jos virtauskenttä ja paine tunnetaan, tämä on periaatteessa helppo laskea ja määrätä näin kokonaisvoima, joka on suhteutettava palloon kohdistuvaan painovoimaan. On varsin helppo päätellä, että kokonaisvoima riippuu suoraan verrannollisesti nopeudesta v_0 , joten rajanopeus (jolla virtausvastus kumoaa painovoiman) on määrättävissä helposti yhden simulaation avulla.

[199]

8.5.2 Tilanyhtälö ja ilmakehän tiheys

Edellä oletettiin ilman tiheys vakioksi. Jos korkeuserot ovat merkittäviä, ei tämä oletus ole enää voimassa, vaan on palattava tiheyden ja paineen väliseen suhteeseen.

Jo aiemmin esitettiin ideaalikaasun tilanyhtälö eli Boylen laki $P = RT\rho$. Termodynamiikassa vakiintunut tapa muotoilla tilanyhtälöitä on kirjoittaa ne Helmholtzin vapaalle energialle, $A = E - TS$. Jos nimittäin vapaa energia tunnetaan muodossa $A = A(1/\rho, T)$, termodynamiikan toisesta pääsäännöstä seuraa, että

$$P = -\frac{\partial A}{\partial 1/\rho}, \quad S = -\frac{\partial A}{\partial T}.$$

Toisin sanoen yksi yhtälö generoi kaksi muuta, mikä riittää sulkemaan säilymlakisysteemin.

Ideaalikaasun tilanyhtälö voidaan esittää yllä mainitussa muodossa valitsemalla

$$A = -RT \log\left(\frac{1}{\rho}\right) - c_v T \log T,$$

jossa c_v on lämpökapasiteetti vakiotilavuudessa. Tällöin nimittäin

$$P = -\frac{\partial A}{\partial 1/\rho} = RT\rho$$

ja toisaalta

$$E = A + TS = A - T\frac{\partial A}{\partial T} = c_v T.$$

[200]

Ilmakehän paineen ja tiheyden korkeusriippuvuuden ratkaiseminen edellyttää siis periaatteessa myös lämpötilojen korkeusriippuvuuden ratkaisemista. Tilannetta voi kuitenkin yksinkertaistaa, jos oletetaan, että entropia pysyy vakiona (pystysuuntaisissa virtauksissa ei tapahdu mitään termodynaamisesti peruttamattomia ilmiöitä – tämä ei tietysti aina päde, esimerkiksi höyryn tiivistyessä sateeksi, mutta toimii hyvänä alkuhypoteesinä).

Jos entropia on vakio, on oltava

$$S = -\frac{\partial A}{\partial T} = R \log(\rho^{-1}) + c_v \log T + c_v = \text{vakio}.$$

Tämä on totta vain, jos $T \sim \rho^{R/c_v}$. Sijoittamalla tämä ideaalikaasun tilanyhtälöön saadaan edelleen $P \sim \rho^\gamma$, jossa $\gamma = \frac{R}{c_v} + 1$ on kaasulle ominainen vakio (ilmalle noin 1.4).

Nyt voidaan palata säilymlakisysteemiin ja pohtia ilmakehän tiheysprofiilia. Jos oletetaan ilmakehän olevan levossa ($v = 0$), saadaan liikemäärän säilymlaiksi

$$P_z = \gamma C_0 \rho^{\gamma-1} \rho_z = g\rho,$$

josta voidaan ratkaista

$$\rho(z) = \left(C_1 + gz \frac{\gamma-1}{\gamma C_0} \right)^{1/(\gamma-1)}.$$

Gravitaatio kohdistuu alaspäin, joten $g < 0$. Siten ρ on z :n suhteen laskeva funktio. Toisaalta helposti havaitaan, että suurilla z :n arvoilla lausekkeen mielekkäisyys katoaa. Tämä johtuu tehdyistä yksinkertaistuksista. Todellisuudessa gravitaatio ei ole vakio vaan se käyttäytyy kuten $1/z^2$, ja lisäksi koko säilymislaki tulisi muotoilla pallokoordinaatistossa, jolloin P_z korvautuisi oleellisesti $(z^2 P)_z$:llä. Tällöin luonnollisesti koko ratkaisu muuttuu.

8.5.3 Venymä kuormituksen vaikutuksesta

Edellä esitetty analyysi antaa työkalut paineen määrittämiseen pallon ulkopuolella. Samoilla työkaluilla voi analysoida myös paineen kehittymistä pallon sisällä, ja näin päästään periaatteessa käsiksi paine-eroon pallon sisä- ja ulkopuolen välillä. Miten pallo reagoi tähän paine-eroon?

[201]

Osoittautuu, että pallon muodon (tilavuuden) ja paine-eron välisen suhteen mallintaminen voi olla hyvinkin haastavaa, joten on syytä edetä vaiheittain. Pallon materiaalia voidaan pitää lähtökohtaisesti kimmoisana materiaalina. Tämä tarkoittaa, että kuormitus aiheuttaa venymän, joka palautuu, kun kuormitus poistuu. Tarkastellaan esimerkkinä vaikka kumi-nauhaa, jolla on pituus l niin kutsutussa lepotilassa. Kun nauhaa vedetään päistä, nauhan venymä ja vetämiseen tarvittava voima riippuvat toisistaan. Yksinkertaisimmillaan riippuvuus on muotoa

$$\frac{\Delta l}{l} = \frac{F}{Ea},$$

jossa Δl on pituuden muutos, F voima, a nauhan poikkileikkauksen pinta-ala ja E materiaalille ominainen kimmovakio. Jos merkitään $\tau = F/a$ jännitystä pinta-alayksikköä kohti ja $\varepsilon = \Delta l/l$ venymää, saadaan laki $\tau = E\varepsilon$, joka on niin kutsuttu Hooken laki yksinkertaisimmassa muodossaan.

Useampiulotteisessa tapauksessa Hooken laki yleistyy muotoon

$$\tau_{ij} = C_{ijkl}\varepsilon_{kl}(u) =: \sum_{k,l=1}^3 C_{ijkl}\varepsilon_{kl}(u),$$

jossa τ ja ε ovat jännitys- ja venymätensorit ja kertoimet C_{ijkl} kuvaavat materiaalin kimmo-ominaisuuksia. Kertoimia on periaatteessa $3^4 = 81$, mutta riippumattomia kertoimia on korkeintaan 21. Monet materiaalit voidaan kuvata jo kahdella parametrilla.

Yleisessä tapauksessa venymätensorina on käytettävä geometrisesti epälineaarista venymää

$$\varepsilon_{ij}(u) = \frac{1}{2}(u_{i,j} + u_{j,i} + u_{i,k}u_{j,k}).$$

Venymien ollessa pieniä neliöllinen termi voidaan jättää pois, jolloin jäljelle jää niin kutsuttu linearisoitu venymätensori.

Materiaalit eivät aina ole täysin kimmoisia. Esimerkiksi kertaalleen täytetty ilmapallo ei tyhjäntyttyään aina palaudu aivan alkuperäiseen muotoonsa, vaan osa venymistä on muuttunut pysyviksi. Täysin kimmoisan aineen ja ideaalisen virtaavan aineen väliin mahtuukin monenlaisia materiaaleja erilaisine ominaisuuksineen, joiden selvittäminen ja mallintaminen on haastava tutkimusala, jota kutsutaan reologiaksi.

[202]

Rajaudutaan nyt yksinkertaisuuden vuoksi täysin pyöreään, tasa-aineiseen kimmoisaan palloon, jonka säde lepotilassa on r_0 . Jos pallo venyy paineen vaikutuksesta r -säteiseksi, on materiaalin venymä (pallon tangenttitasossa) $\varepsilon = \varepsilon(r) = (r - r_0)/r_0$ ja vastaava (tangenttitason suuntainen) venyttävä voima $E\varepsilon(r)$. Pallon sisä- ja ulkopinnan välinen paine-ero aiheuttaa kuitenkin normaalin suuntaisen voiman, joten pallon ulkopinnan kireys ei suoraan voi kompensoida paine-eroa. Pinnan kaarevuudesta johtuu kuitenkin, että kaarevan pinnan tason suuntainen jännitys aiheuttaa myös normaalin suuntaisen jännityskomponentin, joka on verrannollinen pinnan kaarevuuteen $1/r$. Toisin sanoen paine-eron δP ja venymän välille saadaan tasapainoehto

$$\delta P = E\varepsilon(r)/r.$$

Koska paine-ero puolestaan riippuu (annetussa korkeudessa) pallon tilavuudesta ja siten r :stä, saadaan yhtälö, josta r voidaan ratkaista (viimekädessä korkeuden funktiona).

8.5.4 Pallon lämpötilan muutos

Edellä esitetystä päättelyssä oletettiin, että pallon ja ulkoilman lämpötilat ovat tasapainossa (pallo nousee niin hitaasti, että lämpötilat ehtivät tasoittua). Tämä ei ole etukäteen mitenkään selvää ja esimerkiksi kuumailmapalloille oletus on selkeästi väärä. Mitä voidaan sanoa lämpötilan muutoksista pallossa?

Tarkastellaan aluksi energian säilymlakia pallossa. Yleisesti se on muotoa

$$\rho \frac{DE}{Dt} - \nabla \cdot q - \tau : \nabla v - \rho h = 0.$$

Oletetaan, että sisäisiä lämmönlähteitä ei ole eli $h = 0$. Ideaalikaasulle puolestaan $E = C_v T$ ja $q = k \nabla T$, jossa lämmönjohtavuus k voi riippua esimerkiksi tiheydestä ja lämpötilasta.

Jännitys τ on muotoa $\tau = 2\mu \varepsilon(v) - PI$. Jos virtaus on hidasta ja viskositeetti pieni, sisäisen kitkan lämmittävä vaikutus on häviävän pieni, joten termi $\tau : \nabla v = P \nabla \cdot v$ kuvaa ilman puristumiseen liittyvää lämmittävää vaikutusta. (Tämä on havaittavissa selkeästi vaikkapa pumpattaessa ilmaa pyörän renkaaseen.)

Näin päädytään yhtälöön

$$\rho c_v \frac{DT}{Dt} - k \Delta T = -P \nabla \cdot v,$$

joka on voimassa laajenevassa pallossa. Yksinkertaistetaan tilannetta jättämällä pallon laajenemisen ja sisäiset virtaukset huomiotta, jolloin päädytään lämpöyhtälöön

$$\rho c_v T_t - k \Delta T = 0$$

kiinteässä alueessa Ω . Tämän ratkaiseminen matemaattisesti edellyttää alkuarvoja (lämpötilat hetkellä $t = 0$ koko alueessa) sekä reunaehtoja, joiden tulee toteutua alueen Ω reunalla kullakin ajan hetkellä. Reunaehtoien määrittäminen on oma mallinnusongelmansa.

Energian säilymlaki on periaatteessa voimassa kaikkialla, siis myös pallon ulkopuolella ja itse pallon pintamateriaalissa. Jos ei haluta, voida tai katsota tarkoituksenmukaiseksi kirjoittaa vastaavia yhtälöitä näissä alueissa (mikä voi periaatteessa edellyttää jopa säätilamallin muotoilua ilmakehässä), on yhtälöt korvattava yksinkertaisemmilla malleilla ja oletuksilla. Voidaan esimerkiksi olettaa, että riittävän kaukana pallostakaan ilman lämpötila on tasapainossa eikä siis riipu pallon aiheuttamista häiriöistä. Tällöin malliin olisi sisällytettävä pallon lisäksi pallon kuori ja pallon lähiympäristö, joissa

lämpötila ratkaistaan. Malli olisi oleellisesti yllä kuvatun tyyppinen, mutta sisältäisi eri osa-alueissa erilaisia materiaaliparametreja.

Usein halutaan tarkasteltavan systeemin välitön ympäristö redusoida hyvin yksinkertaiseksi malliksi, rajakerrokseksi, jonka käyttäytyminen oletetaan tunnetuksi. Lämpöyhtälön tapauksessa tämä tarkoittaa sitä, että mallinnetaan lämpövuoto pallon ja (tasapainossa olevan) ulkoilman välillä muodossa

$$q \cdot n = k \nabla T \cdot n = q(T_{\text{pallo}}, T_{\text{ilma}}, \dots).$$

Käytännössä yleensä

$$q \cdot n = \alpha(T_{\text{ilma}} - T_{\text{pallo}}),$$

jossa lämmönvaihtokerroin α on positiivinen ja riippuu erilaisista ympäristöä kuvaavista parametreista (pallon kuoren materiaali ja paksuus, ilman kosteus ja virtausnopeus jne.).

Edellä esitettyä yleistä tapausta voidaan usein vielä yksinkertaistaa. Jos lämmönvaihto pallon pinnassa ja ulkopuolella on hyvin tehokasta suhteessa pallon sisäiseen lämpövuohon, α on hyvin suuri ja käytännössä $T_{\text{pallo}} = T_{\text{ilma}}$. Käänteisessä tapauksessa (pallon kuori on hyvä eriste tai ulkopuolinen lämmönvaihto on pientä (kyse on vaikkapa tyhjiöstä)) puolestaan α on hyvin pieni ja käytännössä $q = 0$. Joissakin mallinnustapauksissa puolestaan tunnetaan q esimerkiksi systeemin ulkopinnalta saatavien mittausten nojalla. Tällöin reunaehdoksi saadaan $q \cdot n = f$, missä f tunnetaan.

[204]

Edelleen, jos pallon kuori toimii eristeenä ja ulkopuolinen lämmönvaihto on tehokasta, voidaan α määrittää pallon kuoren ominaisuuksien avulla: $\alpha = k/L$, missä k on pallon kuoren lämmönjohtavuus ja L kuoren paksuus. Käänteinen tapaus, jossa kuori johtaa hyvin lämpöä, jolloin lämpövuota rajoittaa käytännössä lämmönvaihto ulkopuolisessa ilmakerroksessa, onkin sitten haastava mallitettava, koska siinä pitää ottaa huomioon paitsi ilman lämmönjohtavuus myös ilman liikkeet ja virtausten mukana siirtyvä lämpö.

8.6 Diskreetin systeemin kontinuumimalli

Säilymisperiaatetta voi soveltaa muuallakin kuin fysiikassa. Myös kontinuumilähestymistapaa voi usein käyttää, vaikka systeemi selkeästi koostuisikin äärellisestä määrästä partikkeleja tai yksilöitä. Jos partikkeleja on paljon ja ne ovat jakautuneet kohtuullisen tasaisesti, partikkelitiheyttä voi usein mallintaa jatkuvilla funktioilla. Näin tehdään muun muassa monissa populaatiodynamiikan malleissa.

Tarkastellaan esimerkkinä liikennevirtaa (traffic flow). ”Jatkuvassa” autojonossa nopeudet ja autojen väliset etäisyydet pyrkivät usein vaihtelevaan ilman näkyvää syytä. Voidaanko luoda malli, joka voisi selittää tätä ainakin laadullisesti?

Rajaudutaan yksinkertaiseen tilanteeseen, jossa on käytössä vain yksi ajokaista ilman liittymiä tai ohitusmahdollisuuksia. Ajoneuvot oletetaan ominaisuuksiltaan identtisiksi. Kiinnostavia suureita ovat liikenteen tiheys (ajoneuvoa/km) ja nopeus (km/h) ja näiden ajallinen ja paikallinen vaihtelu. Kuvataan perussuureita jatkuvilla funktioilla ρ ja v .

On ilmeistä, että ”massa” säilyy: ajoneuvojen määrän muuttuminen tarkastelualueella selittyy ”virtauksella” sisään ja ulos. Differentiaaliyhtälönä tämä voidaan kirjoittaa

$$\rho_t + (\rho v)_x = 0.$$

Tämän yhtälön sulkemiseksi on määritettävä myös nopeus. Yksinkertaisin tapa on kuvata nopeus tiheyden funktiona (tiivis jono liikkuu hitaammin). Näin saatava malli ei kuitenkaan selitä esimerkiksi nopeuden aaltoilua. Vähän rikkaampi malli saadaan, jos mukaan otetaan myös liikemäärän säilymlaki

$$(\rho v)_t - \tau_x = \rho g.$$

[205]

Mallin sulkemiseksi on määrättävä ”jännitys” τ ja ”massavoima” g . Näille ei nyt kuitenkaan voida löytää puhtaasti fysikaalisia lakeja, koska autojen liikemäärän muutokset aiheutuvat viimekädessä kuljettajan toimenpiteistä. Voidaan esimerkiksi asettaa $\tau = 0$ ja mallintaa kuljettajan pyrkimyksiä valitsemalla $g = c(v(\rho) - v)$, jossa $v(\rho)$ on kuljettajan tavoittelema ihanne-nopeus ja c määrää, kuinka nopeasti kuljettaja pyrkii saavuttamaan kulloisenkin tasapainonopeuden.

Vaihtoehtoisesti voidaan mallintaa jännitystä τ , $\tau = -P$, jossa $P = P(\rho)$ määräytyy kuljettajan ”tilanyhtälöstä”. Tämä johtaa malliin, joka on täysin analoginen kaasuvirtausten kanssa. Tällöin malliin voi ilmestyä ääniaaltojen tapaan käyttäytyviä ”ruuhka-aaltoja”, jotka kuvaavat havaittuja tiheys- ja nopeusvaihteluja. Tarkempi analyysi tosin osoittaa, että kaikki mallin piirteet eivät ole kovin mielekkäitä. Erityisesti malli käyttäytyy symmetrisesti molempiin suuntiin, kun taas todellisuudessa kuljettaja reagoi eri tavalla edessä ja takana havaittuun liikenteeseen.

8.7 Kontinuumimallit ja numerikka

Kontinuumisysteemien mallinnus johtaa tyypillisesti osittaisdifferentiaaliyhtälöiden systeemeihin useampiulotteisessa geometriassa. Tällöin mallin analyttinen ratkaiseminen on mahdollista vain hyvin rajatuissa erikoistapauksissa, joten yleensä mallinnuksessa on turvaututtava numeerisiin menetelmiin.

Nykyisin on jo varsin hyvin saatavilla ohjelmistoja, joissa on valmiit käyttöliittymät niin mallin geometrian kuin itse yhtälöidenkin kuvaamiseen matemaattista notaatiota muistuttavilla kuvauskielillä. Ohjelmistot sisältävät myös tarvittavat numeeriset menetelmät, joten numeerisen mallintamisen aloittaminen on tehty varsin helpoksi. Eri mallien ja eri numeeristen menetelmien perusluonteesta on kuitenkin hyvä olla tietoinen, jotta osaa erityisesti tulosten analysoinnissa kiinnittää huomioita oikeisiin asioihin.

Kontinuumimekaniikan mallit perustuvat aina säilymlakeihin. Osassa malleja (tai mallinnettavia tilanteita) säilymlait myös dominoivat koko mallia, osassa puolestaan materiaalilait (lähinnä lämpövuon ja viskositeetin kuvaavat yhtälöt) käytännössä sanelevat mallin ja ratkaisun luonteen. Tällöin ratkaisut pyrkivät tasoittumaan, kun taas säilymlakipainotteisissa tilanteissa havaitaan usein epäsäännöllisyyksiä, joiden etenemisen seuraaminen voi olla keskeinen kiinnostuksen kohde.

Kontinuumimallien numeerisessa approksimoinnissa yleisimmin käytetyt menetelmät voidaan jakaa kolmeen eri perheeseen, joiden peruspiirteitä kuvataan seuraavaksi.

8.7.1 Differenssimenetelmät

Jos lähtökohdaksi otetaan mallin esitys osittaisdifferentiaaliyhtälönä ja korvataan paikkamuuttujan suhteen määritellyt derivaatat vastaavilla erotusosamäärillä, päädytään differenssimenetelmiin (finite differences). Niiden käyttö on yksinkertaista, jos tarkastelugeometria on suorakaiteen kaltainen (sopivassa koordinaatistossa). Tällöin alueeseen on helppo generoida säännöllinen pistehila, jonka avulla derivaattoja korvaavat differenssit voidaan muodostaa suoraviivaisesti. Differenssiyhtälöistä muodostuu kytketty äärellisulotteinen yhtälösystemi, jonka tuntemattomina ovat ratkaisun arvot hilapisteissä.

Approksimaation tarkkuuteen voi vaikuttaa paitsi tihentämällä hilaa myös käyttämällä korkeamman asteen differenssiapproksimaatioita. Monimutkaisissa geometrioissa, tai jos halutaan tihentää laskentahilaa jonkin yksityiskohdan tarkemmaksi kuvaamiseksi, tarvittavan koordinaattimuun-

noksen määrittäminen (tilanteen kuvaamiseksi säännöllisellä hilalla suorakaiteessa) voi olla työlästä.

8.7.2 Äärellisten volyymien menetelmät

Jos lähtökohdaksi otetaan integraalimuotoiset säilymislait ja jaetaan tarkastettava alue pieniin osa-alueisiin, päädytään äärellisten volyymien (finite volume) menetelmiin. Koska säilymislain tulee toteutua jokaisessa osa-alueessa, saadaan tästä äärellinen määrä yhtälöitä. Yksinkertaisimmassa tapauksessa säilyvää suuretta approksimoidaan jokaisessa osa-alueessa vakiolla ja vastaavasti vuotermejä vakiolla jokaisella osa-alueiden välisellä rajapinnalla. Kun vuotermejä kytketään materiaalilain avulla volyymisuureisiin (derivaatta korvataan käytännössä differenssillä), saadaan yhtälöryhmä suljettua.

Äärellisten volyymien menetelmät ovat suosittuja tapauksissa, joissa mallin säilymislakiominaisuudet ovat tärkeitä, erityisesti aerodynaamisissa sovelluksissa. Esimerkiksi TKK:lla kehitetty FINFLO-ohjelmisto perustuu äärellisten volyymien menetelmiin. Yleensä näissä menetelmissä tarkkuuden nosto tehdään tihentämällä hilaa, koska ratkaisut ovat usein varsin epäsileitä eikä korkea-asteisten approksimaatioiden käyttö volyymien sisällä juuri lisää tarkkuutta.

[207]

8.7.3 Elementtimenetelmät

Elementtimenetelmä (finite element method, äärellisten elementtien menetelmä) perustuu mallien niin kutsuttuun variationaaliseen eli heikkoon muotoiluun. Tämä on luonnollisimmillaan malleissa, joissa on taustalla energiaperiaate (kuten vaikka lujuuslaskennassa, jossa menetelmä otettiin käyttöön ensimmäisenä). Oletetaan esimerkiksi, että mallin ratkaisu u minimoi energian $J(u)$

$$J(u) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla u - f u \, dx,$$

ehdolla $u = 0$ $\partial\Omega$:lla. Tällöin u :n tulee toteuttaa minimointitehtävän optimaalisuusehdot

$$\frac{d}{ds} J(u + sv) \geq 0 \quad \forall v, v = 0 \text{ } \partial\Omega\text{:lla}$$

tai

$$\int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v = \int_{\Omega} f v \quad \forall v, v = 0 \text{ } \partial\Omega\text{:lla.}$$

Jos u on riittävän säännöllinen, se toteuttaa yhtälön $-\Delta u = f$ alueessa Ω .

Äärellinen approksimaatio optimaalisuusehdolle saadaan, kun rajoitetaan u ja v äärellisulotteiseen funktiojoukkoon. Yleensä funktiojoukko konstruoidaan jakamalla alue Ω aluksi pieniin osiin (elementteihin) ja kiinnittämällä u :lle esitys jokaisessa osassa niin, että kokonaisuutena u on jatkuva koko alueessa. Tällöin u voidaan esittää äärellisellä määrällä reaali-lukuja (esimerkiksi u :n solmupisteet elementtien kulmapisteissä).

Elementtimenetelmässä alueen ositus voidaan tehdä joustavammin kuin differenssimenetelmässä. Toisaalta menetelmän tarkkuus on sidoksissa osalu-alueissa käytettyjen yritefunktioiden approksimaatio-ominaisuuksiin, joita on helpompi hallita kuin äärellisten volyymien menetelmässä. Muun muassa CSC:n kehittämä Elmer-ohjelmisto perustuu elementtimenetelmään.

8.8 Harjoitustehtäviä

[208]

1. Johda luvussa 2 esitetty Gaussin kaava seuraavassa tilanteessa: alue Ω on yläpinnaltaan deformoitunut yksikköneliö (yläpinta on funktion g graafi). Funktio f puolestaan häviää kaikilla Ω :n suorilla reunoilla. (Näillä oletuksin tilanne voidaan palauttaa oleellisesti yksiulotteiseksi ja soveltaa yksiulotteista osittaisintegroitaisääntöä.)
2. Muotoile ja johda deformoituvan alueen yli lasketun integraalin aikaderivaatta yksiulotteisessa tapauksessa.
3. Johda liikemäärän säilymlaki ja sievennä se tekstissä esitettyyn muotoon.
4. Johda kulmamäärän säilymlaki lähtien yleisestä säilymlaista, jossa valitaan $a = v \times x$, $b = g \times x$ ja $c \cdot n = (\tau \cdot n) \times x$.
5. Sijoita materiaalilait $q = k \nabla T$ ja $\tau = \mu \varepsilon(v)$ Clausiuksen Duhemin epäyhtälöön. Mitä ehtoja saat kertoimille k ja μ ?
6. Oletetaan, että Helmholtzin vapaa energia voidaan kirjoittaa venymätensorin $\varepsilon(u)$ funktiona, $A = A(\varepsilon(u))$. Millainen materiaalilaki tästä seuraa. (Vihje: koeta määrittää $\frac{\partial A}{\partial \varepsilon}$.)
7. Muotoile yleinen säilymlaki (pisteittäisessä muodossaan) pallokoordinaatistossa.

8. Johda luvussa 5.2 esitetty yhtälö ilmakehän tiheydelle pallo-symmetrisessä tapauksessa.

Tässä luvussa käytetty tarkastelu perustui vahvasti siihen, että seuraamme tarkastettavan systeemin materiaaalipisteiden liikettä. Monissa mallinnus-tapauksissa systeemi koostuu useista sekoittuneista materiaaleista, jotka liikkuvat eri nopeuksilla (ja siis suhteessa toisiinsa). Tällöin säilymlait on muotoiltava jokaiselle ainesosalle erikseen. Esimerkiksi massan säilymis-laki ainesosalle α voidaan kirjoittaa

$$\frac{\partial \rho_\alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_\alpha v_\alpha) = m_\alpha,$$

jossa ρ_α kuvaa ainesosan α osatiheyttä, v_α ainesosan nopeutta ja m_α massan vaihtotermin (toisin sanoen sitä, miten nopeasti kyseistä ainesosaa syntyy tai häviää). Vaihtotermeille (jotka tässä tapauksessa liittyvät ainesosien vä-lisiin kemiallisiin reaktioihin) pätee $\sum_\alpha m_\alpha = 0$. Jos merkitään koko seok-sen keskinopeutta v :llä, $v = \sum_\alpha \rho_\alpha v_\alpha / \sum_\alpha \rho_\alpha$, ainesosien keskinäistä liikettä voi kuvata diffuusiovoilla $\nu_\alpha = \rho_\alpha (v_\alpha - v)$.

Tarkastellaan nyt tapausta, jossa perussysteemi koostuu liikkumatto-masta aineesta, johon on sekoittunut pieni osa toista ainetta, joka liikkuu perussysteemin suhteen. Tällöin riittää, että mallinnetaan jälkimmäisen ainesosan osatiheys. Materiaalien välistä diffuusiota selittää Fickin laki, $\nu_\alpha = d \nabla \rho_\alpha$, missä d on diffuusiokerroin.

[209]

9. Kirjoita malli osatiheydelle ρ_α , kun massanvaihto m_α oletetaan nolllaksi (ns. diffuusio-yhtälö).
10. Entä jos koko perussysteemi liikkuu nopeudella v (diffuusio-konvektio-yhtälö)?
11. Entä jos lisäksi massaa häviää ($m_\alpha = r \rho_\alpha$), jossa r on reaktio-kerroin (niin kutsuttu reaktio-diffuusio-konvektio-yhtälö)?

Kirjallisuutta

- [1] M. B. Allen III, I. Herrera, and G. F. Pinder. *Numerical modelling in science and engineering*. John Wiley & Sons, 1988.
- [2] Elmer – open source finite element software for multiphysical problems. <http://www.csc.fi/elmer/>.
- [3] J. Hämäläinen ja J. Järvinen. *Elementtimenetelmä virtauslaskennassa*. CSC, 1993.

9

Laskenta ja visualisointi

ROBERT PICHÉ

The purpose of computing is insight, not numbers.
R. W. Hamming

[211]

9.1 Johdanto

Matemaattisen mallinnuksen alalla toimivan tulee osata sujuvasti käyttää tietokonetta laskemaan esiin tulevien matemaattisten ongelmien ratkaisuja ja havainnollistamaan dataa ja ratkaisuja esimerkiksi kuvien tai animaation kautta. Tätä osaamisaluetta kutsutaan *tieteelliseksi laskennaksi* (scientific computing). Tässä luvussa käydään lyhyesti läpi tieteellisen laskennan osalueita ja sen tärkeimpiä työkaluja ja esitetään esimerkkejä laskennallisten menetelmien ja visualisoinnin hyvästä ja huonosta käytöstä mallinnuksessa. Luvussa keskitytään analyysin ongelma-alueisiin soveltuviin algoritmeihin eli numeerisiin menetelmiin ja symboliseen laskentaan. Kokonaislukudatatyyppiin perustuvia algoritmeja käsitellään luvuissa 9.2.1 ja 9.3.3.

Matemaattisen mallinnuksen toimintaan sopivat erittäin hyvin sellaiset symbolisen ja numeerisen laskennan sekä tieteellisen visualisoinnin yhdistävät yleisohjelmistot, kuten Matlab, Maple, Mathematica ja Mathcad. Interaktiivisen käyttöliittymän kautta niihin on suhteellisen helppoa tutustua, ne on suhteellisen helppo ottaa käyttöön ja ohjelmoimalla voidaan käsitellä laajojakin tehtäviä. Samassa ohjelmistossa saadaan työkaluja mittausdatan graafiseen tutkimukseen, kaavojen manipulaatioon, matemaattisten tehtävien numeerisen ratkaisun laskemiseen ja laskentatulosten esittämiseen.

9.2 Numeeriset menetelmät

9.2.1 Yleistä

Numeeriset menetelmät ovat liukulukuaritmetiikkaan perustuvia algoritmeja, joita käytetään reaalitylukuaritmetiikan (algebran ja analyysin) ongelmien ratkaisemiseen. Liukulukujen lisäksi numeeriset menetelmät käyttävät likiarvoisia keinoja, kuten iteraatiota ja diskreetointia. Käytännön ongelmat ovat yleensä liian suuria ja monimutkaisia numeerisen ratkaisun löytämiseen kynällä ja paperilla ja laskennallisen algoritmin suorittamiseen tarvitaan tietokone.

Numeeristen menetelmien matemaattiset ongelma-alueet ovat seuraavat:

lineaarialgebra, mm. lineaariset yhtälöryhmät, ominaisarvot, pienin neliösummatehtävät

approksimointi ja interpolointi, mm. splinit, diskreetti Fourier'n muunnos, aallokkeet

epälineaaristen yhtälöiden ratkaiseminen

integrointi

optimointi

differentiaali- ja integraaliyhtälöt.

[212]

Kirja [2] on hyvä suomenkielinen ja vapaasti saatavissa oleva katsaus numeerisiin menetelmiin. Kirja kuvailee käytetyimpien ratkaisumenetelmien perusteita ja sisältää esimerkkejä matemaattisen mallinnuksen tehtävien ratkaisemisesta yleisesti käytössä olevilla ohjelmistoilla ja välineillä. Kirja [3] on vastaava englanninkielinen katsaus. Numeerisen analyysin kursseilla ja kirjoissa esitetään laajemmin menetelmien matemaattinen tausta (suppeneminen, stabiilisuus, virhearviointikaavat jne.).

9.2.2 Mallien käsittely numeerisilla menetelmillä

Likiarviointi on yksi matemaattisen mallinnuksen perusteema. Luvussa 5.2 kerrotaan, miten mallinnuksessa esiin tulevat eri virheet, kuten ilmiöiden idealisointi ja mittausdatan epävarmuus, voidaan arvioida ja hallita. Likiarviointi on myös numeeristen menetelmien perusteema: liukuluvut likiarvioivat

reaalilukuja, polynomi likiarvioi funktiota, äärellinen summa likiarvioi Fourier'n sarjaa jne. Numeerisen menetelmän laskema vastaus on aina epätarkka alkuperäisen matemaattisen ongelman suhteessa. Tämä likiarvon virhe on se hinta, joka maksetaan siitä, että voidaan ratkaista matemaattisia ongelmia, jotka olisivat mahdottomia tai liian työläitä ratkaista muulla tavoin. Hyvä numeerinen menetelmä on sellainen, joka laskee matemaattisen ongelman vastauksen tarpeeksi tarkasti – ja hämmästyttävän nopeasti.

Yleensä on olemassa useampi eri numeerinen menetelmä esiin tulevan ongelman ratkaisemiseksi. Menetelmää valittaessa otetaan huomioon tehtävän erikoispiirteet, algoritmin nopeus, luotettavuus, ja valmiin koodin saatavuus.

ESIMERKKI 9.1

[Keplerin yhtälö.] Satelliitin radan määrittämiseen on ratkaistava eksentrisen anomalian E arvo Keplerin yhtälöstä

$$E - e \sin E = M,$$

jossa vakiot $e \in (0, 1)$ (eksentrisyys) ja $M \in [0, \pi]$ (keskianomalia) ovat annettuja noin 5 desimaalin tarkkuudella. (Huomataan, että malli on jo saatu dimensiottomaan muotoon, kts. luku 4.1.) On siis yksi tuntematon (E) ja yksi epälineaarinen sileä yhtälö, jota ei voida ratkaista symbolisesti.

[213]

Ennen kuin aloitetaan laskeminen tutkitaan ensin tehtävän erikoispiirteitä. Funktion $f(E) = E - e \sin E - M$ kuvaajan piirtäminen erityyppisillä e :n ja M :n arvoilla on rohkaiseva: sillä näyttää olevan aina yksi ja vain yksi nollakohta. Huomataan myös, että $f(0) \leq 0$ ja $f(M + e) \geq 0$, joten (funktion jatkuvuuden perusteella) nollakohta on oltava välissä $[0, M + e]$. Tämä havainto on hyvä lähtökohta ensimmäiselle numeeriselle menetelmälle (puolitushaku): lasketaan funktion arvo (funktion merkki riittää) tarkasteluvälin keskipisteessä, ja aloitetaan uudestaan käyttäen sitä puoliväliä, jonka päätepisteissä funktion arvot ovat erimerkkiset.

Kun annetaan Keplerin yhtälön vakiolle arvot $e = 0.1$ ja $M = 1$, puolitushaku antaa seuraavat tulokset:

(0.0000000,	1.1000000)
(0.5500000,	1.1000000)
(0.8250000,	1.1000000)
(0.9625000,	1.1000000)
(1.0312500,	1.1000000)
(1.0656250,	1.1000000)
(1.0828125,	1.1000000)
(1.0828125,	1.09140625)

Menetelmä suppenee hitaasti mutta varmasti. Kun otetaan välin keskipiste nollakohdan arviona, virhe on korkeintaan puolet välin pituudesta ja välin pituus puolittuu joka iteraatiolla.

Newtonin menetelmä

$$E_{k+1} = E_k - f(E_k)/f'(E_k), \quad E_1 = (M + e)/2$$

suppenee likimäärin neliöllisesti eli virhe on likimäärin verrannollinen edellisen kierroksen virheen neliöön:

k	E_k
1	0.55000000
2	1.09907906
3	1.08860287
4	1.08859775
5	1.08859775

[214]

On mahdollista kehittää algoritmi, joka yhdistää puolitushaun varmuuden ja Newtonin menetelmän nopeuden ja joka ei tarvitse funktion derivaattaa, mutta koodi olisi pitkä ja monimutkainen. Yksinkertaisen ratkaisun lienee valmiin ohjelman käyttö, esimerkiksi Matlabissa

```
>> f=@(E) E-0.1*sin(E)-1;
>> fzero(f, [0, 1.1])
```

```
ans =
    1.08859775
```

jossa käytetään Dekkerin algoritmia.

9.2.3 Valmiiden ohjelmien käyttö

Hyvin testattujen valmiiden koodien käyttö on suositeltavaa. Matemaattiset yleisohjelmistot Matlab, Maple, Mathematica ja Mathcad sisältävät laajat yleismatemaattiset rutiinikokoelmat ja erikoisalan algoritmeja on saatavissa lisäpalikoina (esimerkiksi Matlabin toolboxit). Käännettävien ohjelmointikielten (Fortran, C) käyttäjille suositellaan aliohjelmakirjastojen käyttöä. Tärkeimpiä numeerisia aliohjelmakirjastoja ovat

kaupalliset aliohjelmakirjastot; Visual Numerics (entinen Imsl) ja Nag tarjoavat testattuja ja hyvin dokumentoituja Fortran- ja C-rutiineja.

Netlib on yli 20 vuotta toiminut korkealaatuisten ilmaisten numeeristen algoritmien lähdekoodiarkisto. Sieltä on saatavissa mm. numeerisen lineaarialgebran aliohjelmakirjastot Blas ja Lapack.

GSL (Gnu Scientific Library) on ilmainen numeerinen C ja C++ kielen koodikokoelma.

Kirjat [2,3] ja verkkopalvelin GAMS (Guide to Available Mathematical Software) kertovat, mistä voi löytää eri tyyppiisiin tehtäviin soveltuvia valmiita koodeja.

Valmiin koodin käyttö on suositeltavaa myös yksinkertaisten algoritmien tapauksessa. Luotettavan koodin tekeminen voi olla yllättävän vaikeaa. Numeeriset menetelmät ovat erikoisen haastavia ohjelmointitehtäviä, sillä tavallisten ohjelmointivirheiden (bugien) lisäksi voidaan törmätä yllättäviin liukulukuesityksen, suppenemisen tai epästabiilisyyden ilmiöihin. Seuraavana vain pari varoittavaa esimerkkiä innokkaille koodaa-se-itse ihmisille.

[215]

ESIMERKKI 9.2

(Liukulukuesityksen rajoja ei ole otettu huomioon.) Kaavan $r = \sqrt{\sum_{i=1}^n x_i^2}$ voi koodata melko suoraviivaisesti millä tahansa ohjelmointikielellä. Jos x sisältää suuria lukuja, esimerkiksi $x = [10^{160}, 10^{160}]$, r saa arvon inf tai tulee ylivuotovirhe, koska summa on liian suuri esitettäväksi 64-bittisenä liukulukuna. Oikea r -arvo ei kuitenkaan ole liian suuri esitettäväksi 64-bittisenä liukulukuna, ja se voidaan laskea oikein, jos skaalataan x :

```
>> M=max(abs(x));
>> r=M*sqrt(sum((x/M).^2))
```

ESIMERKKI 9.3

(Stabiilisuusrajoja ei ole otettu huomioon.) Rungen ja Kuttan menetelmä differentiaaliyhtälön alkuarvotehtävän ratkaisemiseksi voidaan koodata melko suoraviivaisesti, esimerkiksi Matlabilla se mahtuu kahteentoista riviin:

```
function y=rungekutta(f,x,yo) % ratkaisee dydx=f(x,y), y(x(1))=yo
N=length(x);
```

```

h=x(2:end)-x(1:end-1); % askelpituudet
y=zeros(N,length(y0));
y(1,:)=y0(:).';
for n=1:N-1
    k1=feval(f,x(n),y(n,:).'); % laskee f(x(n),y(n,:).')
    k2=feval(f,x(n) + h(n)/2,y(n,:).' + h(n)*k1/2);
    k3=feval(f,x(n) + h(n)/2,y(n,:).' + h(n)*k2/2);
    k4=feval(f,x(n) + h(n),y(n,:).' + h(n)*k3);
    y(n + 1, :)=y(n, :) + h(n)/6*(k1 + 2*k2 + 2*k3 + k4).';
end

```

Tämä koodi ratkaisee monia tehtäviä tyydyttävästi, mutta tehtävälle

$$y' = 1000(e^{-x} - y), \quad y(0) = \frac{1}{2},$$

se antaa vääriä tuloksia: kun lasketaan $y(0), y(0.01), \dots, y(1)$ saadaan

```

>> f=@(x,y) 1000*exp(-x)-y;
>> x=0:.01:1;
>> y=rungekutta(f,x,1/2)

```

[216]

```

y =
    0.5000
   10.3955
   20.0941
      :
      :
  368.0634

```

vaikka tarkka ratkaisu on $y(1) = \frac{1000}{999}e^{-1} - \frac{1001}{1998}e^{-1000} \approx 2.7210$. Mikä meni pieleen? Osoittautuu, että Rungen ja Kuttan menetelmä on epästabiili, jos aika-askel on liian pitkä, ja tämän differentiaaliyhtälön kriittinen aika-askelpituus on melko pieni, noin 0.002. Jos otetaan käyttöön ns. kankea ratkaisumenetelmä (esim. Gearin implisiittinen BDF kaava) ja adaptiivinen aika-askel, saadaan tarkka ja nopea ratkaisu, mutta koodi onkin huomattavasti mutkikkaampi. Matlabin kankaan differentiaaliyhtälön ratkaisija ode15s on yli 1000 riviä pitkä, ja mukaan ei ole laskettu sen lukuisia apuohjelmia.

9.3 Symbolinen laskenta

9.3.1 Yleistä

Matemaattisten kaavojen käsittely (sijoitus, sievennys, summaus, derivointi jne.) on pitkälti mekaanista merkkijonojen manipulaatiota annettujen sääntöjen mukaan, joka voidaan suorittaa symbolisen laskennan ohjelmistolla. Maple ja Mathematica ovat tunnetuimpia symbolisen laskennan yleisohjelmistoja; Matlab ja Mathcad tarjoavat jonkin verran symbolisen laskennan rutiineja. Esimerkiksi Maple laskee lausekkeen $x^{-3/2} \arctan(x)$ derivaatan symbolisesti:

```
> diff(x^(-3/2)*arctan(x), x);
```

$$\arctan(x) \qquad 1$$

$$-3/2 \frac{\text{-----}}{x^{5/2}} + \frac{\text{-----}}{x^{3/2} (1+x)^2}$$

Symbolisen analyysin ohjelmistojen käyttö ei kuitenkaan ole aivan niin mutkatonta kuin käyttäjät muutaman esimerkin jälkeen usein kuvittelevat, ja siinä tarvitaan tiettyä taitoa ja varovaisuutta. Aivan puhtaasti symbolisesti esitettyinä monet tavalliset tehtävät ovat hyvin vaativia tai suorastaan algoritmisesti ratkeamattomia. Oikein käytettynä symbolinen analyysi on vahva työkalu, jolla selvitetään monia muutoin aivan mahdottomia tehtäviä.

[217]

9.3.2 Lausekeräjähdys

Vaikka matemaattinen tehtävä olisikin symbolisesti ratkeava, ratkaisu voi olla erittäin pitkä lauseke, josta ei ole mitään apua matemaattisesti mallinnetun ilmiön ymmärtämiseen. Käyttökelpoisia kaavoja ei ole aina helppoa saada, vaan tarvitaan erilaisia sijoituksia, muunnoksia tai aivan uusia lähestymistapoja.

ESIMERKKI 9.4

[Stabiilisuusehdot.] Erään sähkövoimasysteemin malli [1] on differentiaaliyhtälö $\dot{x} = Ax$, jossa

$$A = \begin{bmatrix} 0 & -k_1/(2h) & -k_2/(2h) & 0 \\ 2\pi f_0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -k_4/T_d & -1/(k_3 T_d) & 1/T_d \\ 0 & -k_a k_5/T_a & -k_a k_6/T_a & -1/T_a \end{bmatrix}.$$

Lauseen 5.1 mukaan tiedetään, että systeemi on asympotoottisesti stabiili, jos matriisin A ominaisarvojen reaalisosat ovat negatiivisia. Kun yritetään laskea ominaisarvot symbolisesti, Maple antaa karakteristisen polynomin $\det(zI-A)$:

```
> A:=array([[0,-k1/(2*h),-k2/(2*h),0],
            [2*Pi*fo, 0,0,0],
            [0,-k4/Td,-1/(k3*Td),1/Td],
            [0,-ka*k5/Ta,-ka*k6/Ta,-1/Ta]]);
> with(linalg):
> lambda:=eigenvals(A);

RootOf(_Z^4*h*k3*Td*Ta+(h*Ta + h*k3*Td)*_Z^3
+(h+h*ka*k6*k3+Pi*fo*k1*k3*Td*Ta)*_Z^2+
(Pi*fo*k1*k3*Td+Pi*fo*k1*Ta-Pi*fo*k4*k2*k3*Ta)*_Z
-Pi*fo*ka*k5*k2*k3+Pi*fo*k1-Pi*fo*k4*k2*k3+Pi*fo*k1*ka*k6*k3)
```

Jos nyt pyydetään ominaisarvojen aukikirjoittamista komennolla

```
> allvalues(lambda);
```

[218]

Maple tulostaa kymmeniä sivuja täyttävän kaavan. Tällaisesta monimutkaisesta kaavasta on lähes mahdotonta tehdä käyttökelpoisia johtopäätöksiä.

Apuun voidaan ottaa Liénardin ja Chipartin lause, jonka mukaan karakteristisen polynomin $b_0 + b_1z + b_2z^2 + b_3z^3 + b_4z^4$ nollakohtien reaalisosat ovat negatiiviset jos ja vain jos b_0, b_1, b_3, b_4 ja $b_1b_2b_3 - b_0b_3^2 - b_1^2b_4$ ovat samanmerkkiset. Nämä ehdot voidaan laskea symbolisesti käsin tai Maplella ja saadaan (kun oletetaan $f_0 > 0$):

$$\begin{aligned} -k_ak_5k_2k_3 + k_1 - k_4k_2k_3 + k_1k_ak_6k_3 &> 0, \\ k_1k_3T_d + k_1T_a - k_4k_2k_3T_a &> 0, \\ h(T_a + k_3T_d) &> 0, \\ hk_3T_dT_a &> 0, \\ hk_2k_3(hk_3^2k_ak_5T_d^2 - hk_3^2k_4T_ak_ak_6T_d + hk_3^2k_4T_d^2 \\ + 2hk_3k_ak_5T_dT_a + hk_3k_4T_aT_d - hk_3k_4T_a^2k_ak_6 + hk_5k_ak_6T_a^2 \\ - T_dT_a^3k_4^2\pi k_3^2f_0k_2 + f_0k_4T_a^2k_1T_d^2\pi k_3^2 + f_0k_4T_a^3k_1T_d\pi k_3) &> 0. \end{aligned}$$

Yllä olevia kaavoja voidaan käyttää, kun tutkitaan parametrien vaikutuksia stabiilisuuteen.

9.3.3 Symboliikan ja numerikan yhteistyö

On hyvin tiedossa, että matemaattiset tehtävät, joille ei ole olemassa symbolista ratkaisua tai joilla se on liian monimutkainen, voivat olla helppoja ratkaista numeerisesti. Jotkin tehtävät ovat vaikeita ratkaista tavallisella numeerisella menetelmällä ja silloin symbolisen laskennan ohjelmistosta voi olla hyötyä.

ESIMERKKI 9.5

[Epäoleellinen integraali.] Simpsonin kaava

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{h}{3} (f(a) + 4f(a+h) + 2f(a+2h) + \dots + 4f(b-h) + f(b))$$

on tuttu ja yleensä tehokas tapa laskea integraaleja numeerisesti. Kaavaa ei kuitenkaan voi käyttää laskemaan epäoleellisen integraalin $\int_0^1 x^{-3/2} \arctan(x) dx$ arvoa, sillä integroitava funktio ei ole määritelty integroimisvälin vasemmalla reunalla. Integroimisväli voidaan jakaa kahteen osaan:

$$\int_0^1 x^{-3/2} \arctan(x) dx = \int_0^\varepsilon x^{-3/2} \arctan(x) dx + \int_\varepsilon^1 x^{-3/2} \arctan(x) dx. \quad [219]$$

Ensimmäisen osan funktio voidaan kehittää sarjana ja integroida termeittäin:

$$\begin{aligned} \int_0^\varepsilon x^{-3/2} \arctan(x) dx &= \int_0^\varepsilon x^{-3/2} \left(x - \frac{1}{3}x^3 + \frac{1}{5}x^5 - \dots \right) dx \\ &= 2\varepsilon^{1/2} - \frac{2}{15}\varepsilon^{5/2} + \frac{2}{45}\varepsilon^{9/2} - \dots \end{aligned}$$

Valitaan sitten $\varepsilon > 0$ sopivan pieneksi siten, että sarjaa voidaan approksimoida käyttäen muutamaa termiä. Toisen osan integraalin arvo voidaan sitten laskea Simpsonin kaavalla.

9.4 Visualisointi

9.4.1 Yleistä

Tieteellinen visualisointi tarkoittaa numeerisen tiedon havainnollistamista kuvina. Kuvien kautta ihmiset pystyvät käsittelemään laajoja datamääriä ja monimutkaisia ilmiöitä. Tieteellinen visualisointi onkin matemaattisen mallinnuksen tärkeimpiä menetelmiä. Mittausdatan graafisen tutkimisen avulla muodostetaan hypoteeseja, ja laskentatuloksien graafisten esitysten avulla hyväksytään tai hylätään hypoteesit ja mallit.

Tietokonegrafiikan kehitys mahdollistaa suurten data-aineistojen nopean esityksen. Funktiokäyrät, histogrammit, pinta-esitykset, tasa-arvokäyrät, kartat jne. ovat tavallisimmat kuviot. Kolmiulotteiset skalaari- ja vektorikentät voidaan esittää käyttäen tasa-arvopintoja, tilavuusrenderöintiä, nuoliparvia ja partikkeleja, jopa kolmiulotteisena animaationa. Viime aikoina on tutkittu ja kehitetty havainnollistamistapoja muiden aistien kautta, kuten tuntoaisti (haptinen palaute) ja kuuloaisti (datan sonifikaatio), ja eri havainnollistamistapojen yhdistelmiä (virtuaalitodellisuus).

Matemaattiset ja tilastolliset yleisohjelmistot tarjoavat lukuisia grafiikkarutiineja, jotka mahdollistavat datan ja laskentatulosten nopean visualisoinnin ohjelmiston interaktiivisen käytön aikana. Varsinaiset visualisointiohjelmistot (mm. OpenDX ja gnuplot) ja grafiikkakirjastot C ja Fortran kielen käyttäjille tarjoavat lisää visualisointimenetelmiä ja tehokkaampaa datamassojen käsittelyä.

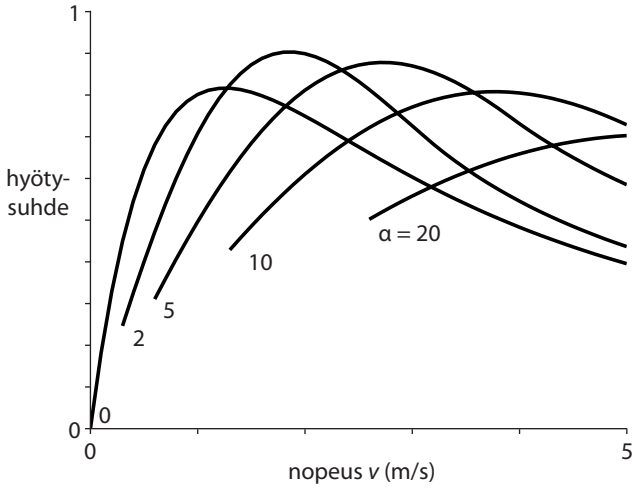
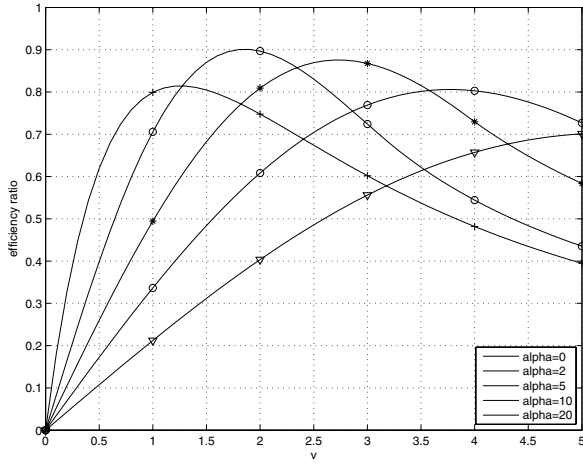
[220]

9.4.2 Hyvän kuvan suunnittelu

Tieteellisen visualisoinnin perustavoite on esittää paljon tietoa tiiviissä muodossa [4]. Kuvalla pyritään näyttämään moniulotteista dataa rehellisesti ja selkeästi. Turhat koristelut on poistettava ja graafisia elementtejä, jotka eivät esitä relevanttia tietoa, on syytä välttää. Matemaattisten ja tilastollisten ohjelmistojen tuottamat kuvat eivät yleensä kelpaa sellaisenaan raporttiin tai esitykseen, vaan ne vaativat muokkaamista:

ESIMERKKI 9.6

[Kuvion viimeistely.] Matlabin tuottama oletusasetusten mukainen kuvio (kuva 9.1 yllä) riittää omaan käyttöön, mutta se vaatii muokkaamista ennen kuin se saadaan julkaisukelpoiseksi (kuva 9.1 alla).



[221]

Kuva 9.1. Ohjelmiston tuottama kuvio vaatii viimeistelyä.

Kirjallisuutta

- [1] M. Chetty. Symbolic algebra systems: A new way of thinking in system analysis and control. In *Proc. Australian Universities Power Engineering Conference and IEAust Electric Energy Conference (AUPEC/EECON99), Darwin, September 1999*, pages 41–46. www.itee.uq.edu.au/~aupec/aupec99/chetty299.pdf.
- [2] J. Haataja, J. Heikonen, Y. Leino, J. Rahola, J. Ruokolainen ja V. Savolainen. *Numeeriset menetelmät käytännössä*. CSC, 2. painos, 2002. <http://www.csc.fi/csc/julkaisut/oppaat/>.
- [3] M. T. Heath. *Scientific computing – an introductory survey*. McGraw-Hill, 2002.
- [4] E. Tufte. *The visual display of quantitative information*. Graphics Press, 1983.

10

Yksinkertaisemmat mallit

TIMO TIIHONEN

10.1 Johdanto

[223]

Käytännön sovelluksissa ”täydellinen” matemaattinen malli, eli malli, jossa on otettu huomioon kaikki sovellusalueen edustajan tärkeänä pitämät tekijät, on usein varsin monimutkainen ja matemaattisesti hankala käsitellä. Vastaavan numeerisen mallin suoraviivainen työstäminen ja testaaminen kestää kauan ja antaa hyvin vähän laadullista ymmärrystä mallinnettavasta tilanteesta. Siten onkin syytä tutkia, voisiko mallista tai mallinnettavasta tilanteesta muodostaa näkemystä yksinkertaistamalla mallia järjestelmällisesti.

Avainkysymyksiä ovat esimerkiksi, miten eri lähtötiedot ja parametrit vaikuttavat ratkaisun eri ominaisuuksiin, mitä tapahtuu, jos jokin ilmiö tai ominaisuus jätetään pois tarkastelusta, missä mielessä yksinkertaistettu malli kuvaa alkuperäistä tilannetta tai voiko yksinkertaistuksesta johtuvaa virhettä arvioida helposti. Näitä kysymyksiä pyritään valottamaan esimerkkien kautta.

ESIMERKKI 10.1

[*Hollantilainen ongelma.*] Hollannissa merkittävä osa viljelymaasta on merenpinnan tasolla tai jopa sen alapuolella. Tällöin on mahdollista, että suolaista merivettä tihkuu pohjaveteen ja suolaa maan viljelykelvottomaksi. Tätä yritetään estää kontrolloimalla pohjavesivirtauksia kastelujärjestelmän avulla.

Esitetään tilanne hyvin yksinkertaistetussa muodossa ja tarkastellaan yksiulotteista pohjavesivirtausta. Makeaa vettä virtaa nopeudella v x -akselin suuntaan. Tarkastelualueen rajalla, pisteessä $x = 1$, pohjavesi on kosketuksissa meriveteen, jonka suolapitoisuus tunnetaan. Molekylaarinen diffuusio kuljettaa suolaa makeaan veteen. Jos merkitään suolapitoisuutta c :llä, voidaan tasapainotilannetta mallintaa (massan säilymislaista johdetulla) yhtälöllä

$$\begin{cases} vc_x - dc_{xx} = 0, & x \in (0, 1), \\ c(0) = 0, & c(1) = c_0, \end{cases}$$

jossa d on diffuusiokerroin ja c_0 meriveden suolapitoisuus.

Jos normeerataan yhtälöt nopeudella v , saadaan ($\varepsilon = d/v$)

$$c_x - \varepsilon c_{xx} = 0.$$

Koska kastelujärjestelmän käyttäjän tavoitteena on pitää suolan diffuusion osuus pienenä, on kiinnostavaa tarkastella tapausta, jossa $\varepsilon \ll 1$. Erityisesti kysytään, voiko mallia tällöin yksinkertaistaa tarkastelemalla rajatapausta $\varepsilon = 0$.

[224]

Helposti voidaan todeta, että mallin ratkaisu on muotoa

$$c = c_\varepsilon = \frac{1}{e^{1/\varepsilon} - 1} (e^{x/\varepsilon} - 1).$$

Rajatapaukselle eli yhtälölle $c_x = 0$, ei puolestaan ole ratkaisua, joka toteuttaisi sekä yhtälön että molemmat reunaehdot. Toisaalta sekä $c = 0$ että $c = 1$ toteuttavat yhtälön ja toisen reunaehdoista. Kuvaako kumpikaan vaihtoehto todellista tilannetta jossakin suhteessa?

Kun $\varepsilon \rightarrow 0$, on helppo todeta, että myös $\int_0^1 (c_\varepsilon - 0)^2 \rightarrow 0$. Siten raja $c = 0$ kuvaa tilannetta osittain. Voidaan päätellä, että pienille ε suolapitoisuus alueessa on keskimäärin pieni. Tämä tarkastelu ei kuitenkaan paljasta sitä, että osassa aluetta, pisteen $x = 1$ lähellä, suolapitoisuus on merkittävä, eikä myöskään sitä, miten laaja suolaantunut alue on. Näihin kysymyksiin palataan myöhemmin.

ESIMERKKI 10.2

[*Kuivatussylinterin lämmönvaihto.*] Paperikoneen kuivatusosa koostuu oleelliselta osaltaan suurista lämmitettävistä teloista (sylintereistä), joiden ympäri paperirata kiertää. Lämmön vaikutuksesta paperissa oleva kosteus haihtuu ja paperi kuivuu. Lämmönvaihtoa halutaan luonnollisesti mallintaa ja kontrolloida – paperin pintalämpötila ei saa nousta

liikaa ja toisaalta tehokkaampi lämmönvaihto nopeuttaa kuivumista, jolloin kuivatusosa voidaan rakentaa lyhyemmäksi tai vaihtoehtoisesti koneen nopeutta voidaan nostaa.

Lämmönsiirtoon vaikuttavat ainakin telan lämpötila, telan lämmönjohtavuus, telan sekä paperiradan kontaktin pituus ja kontaktivoima. Tarkastellaan tilannetta kuivatussylinterin poikkileikkaustasossa. Napakoordinaatistossa sylinterin vaippa voidaan mallintaa alueena $[R - d, R] \times [0, 2\pi]$, jossa R on sylinterin säde ja d vaipan paksuus. Tasapainotilassa lämpöyhtälö telassa voidaan kirjoittaa

$$c\rho r\omega T_\phi - rkT_{\phi\phi} - (rkT_r)_r = 0,$$

jossa ω on kulmanopeus, c lämpökapasiteetti, ρ tiheys ja k lämmönjohtavuus. Jatkossa oletetaan merkintöjen yksinkertaistamiseksi, että $d \ll R$, jolloin voidaan approksimoida napakoordinaatteja tavallisilla karteesisilla koordinaateilla ja kirjoitetaan yhtälö muotoon

$$c\rho\omega T_\phi - kT_{\phi\phi} - (kT_r)_r = 0,$$

Sylinterin pinnoilla tapahtuvat ilmiöt on myös mallinnettava. Oletetaan, että sisäpintaa lämmitetään höyryllä, jolloin lämpövuolle pätee

[225]

$$-kT_r = \alpha_1(T - T^h),$$

jossa α_1 on lämmönvaihtokerroin. Ulkopinnalla tilanne on hieman monimutkaisempi. Jos oletetaan, että välillä $\phi \in [\phi_1, \phi_2]$ tela on kosketuksissa paperirataan ja loppuosalla ilmaan, voidaan mallintaa lämmönvaihto kahdessa osassa. Ilmakontaktissa $kT_r = \alpha_2(T - T^i)$. Paperiradan osalta voidaan hakea vastaavaa mallia,

$$kT_r = \alpha_3(T - T^p).$$

Käytännössä kuitenkin paperin pintalämpötila vaihtelee kontaktin aikana tavalla, joka halutaan viimekädessä mallintaa. Näin ollen on varauduttava siihen, että telamalli kytketään erilliseen paperirainan malliin kontaktin ajaksi. Tarkastelualan päissä on oletettava ratkaisun periodisuus.

Edellä esitetty malli on periaatteessa varsin tavallinen kaksiulotteinen stationäärinen lämpöyhtälö ja siten täysin ratkaistavissa (numeerisesti). Hankalia

piirteitä ovat tarve kytkeä malli osalla reunaa toiseen eli paperirainan malliin sekä ratkaisun periodisuus. Lisäksi koska nopeudet ovat suuria ja paksuus hyvin pieni ”pituuteen” verrattuna, voidaan olettaa, että ”pituussuuntainen” lämmönjohtuminen on hyvin pientä verrattuna pyörimisliikkeestä aiheutuvaan konvektioon. Tällöin on houkuttelevaa yksinkertaistaa yhtälöitä jättämällä ϕ -suuntainen lämmönjohtuvuus pois mallista. Näin päädyttäisiin kaksiulotteisen stationääriseen mallin sijasta käytännössä 1 + 1-ulotteiseen malliin, jossa ϕ käyttäytyy kuten aikamuuttuja eli malliin

$$\begin{aligned}\omega c \rho T_\phi - (k T_r)_r &= 0, \\ -k T_r &= \alpha_1 (T - T^h), & r &= R - d, \\ k T_r &= \alpha_2 (\phi) (T - \bar{T}(\phi)), & r &= R, \\ T(r, 0) &= T(r, 2\pi).\end{aligned}$$

Ennen kuin tarkastellaan, onko esitetty yksinkertaistus mielekäs, on pohdittava, miten yksinkertaistettu malli ratkaistaan ja erityisesti, mitä vaihtoehtoja on periodisuuden saavuttamiseen. Naiivi ”raa’an voiman” lähestymistapa olisi, että kiinnitetään alkuarvo $T(r, 0)$ ja ratkaistaan mallia riittävän monta kierrosta, jotta $T(r, 2\pi(n-1)) - T(r, 2\pi n)$ on riittävän pieni. Tämä on kuitenkin sekä kallista että epätarkkaa.

[226] Tarkastellaan tilannetta lähtien yleisemmästä kysymyksestä. Miten ratkaisun arvo pisteessä $(r, 2\pi)$ riippuu alkuarvoista $T(\hat{r}, 0)$, $R - d < \hat{r} < R$? Merkitään alkuarvoa T_0 :lla ja loppuarvoa $T_{2\pi}$:llä. Nyt selvästi $T_{2\pi}$ riippuu T_0 :sta eli $T_{2\pi} = T_{2\pi}(T_0)$. Periodisen ratkaisun löytäminen on muotoiltavissa yhtälöksi

$$F(T_0) = T_0 - T_{2\pi}(T_0) = 0.$$

Edellä esitetty malli on lineaarinen, jolloin yllä kuvattu yhtälö on myös periaatteessa lineaarinen (ääretönulotteinen) yhtälöryhmä. Lähestytään sitä kuitenkin yleisyyden nimissä kuin epälineaarista yhtälöä. Suoraviivainen integrointi ajan suhteen (eli mallin ratkaiseminen usean periodin yli) voidaan nähdä yksinkertaisena joskaan ei kovin tehokkaana kiintopisteiteraationa yllä mainitulle yhtälölle: $T^{m+1} = T^m + F(T^m)$ eli yksinkertaisesti $T^n = T(\cdot, 2n\pi)$.

Tehokkaampi kiintopisteiteraatio saadaan Newtonin-Raphsonin menetelmästä, jossa $T^{m+1} = T^m + \delta T$ ja

$$\left(\frac{\partial F(T^n)}{\partial T} \right) \delta T = -F(T^n).$$

Mitä tarkoittaa tässä yhteydessä $\frac{\partial F}{\partial T}$? Mitä on $\frac{\partial}{\partial T^n}(T^n - T_{2\pi}(T^n))$ ja miten se lasketaan? Tähän palataan myöhemmin.

10.2 Säännöllinen häiriö ja ratkaisun derivointi

Lähestytään nyt yleisemmällä tasolla kysymystä, miten mallin ratkaisu riippuu mallin parametreista ja niihin tehtävistä häiriöistä.

Hyvin yleisellä tasolla malli voidaan kuvata yhtälönä $F(u) = 0$, jossa u on mallin ratkaisu jossakin sopivassa funktioavaruudessa ja F kuvaus tältä avaruudelta toiseen avaruuteen. Kuvaus F voi olla epälineaarinen ja sisältää monia eri parametreja (sekä skalaariparametreja että erilaisia kerroin-funktioita, yms.). Olkoon nyt ε pieni skalaariparametri, joka kuvaa malliin tehtävää häiriötä. Häiritty malli on

$$F_\varepsilon(u_\varepsilon) = 0,$$

jossa u_ε on häirityn tehtävän ratkaisu.

Jos on olemassa funktiot u_0, u_1 jne., siten, että

$$u_\varepsilon = u_0 + \varepsilon u_1 + \varepsilon^2 u_2 + \dots,$$

jossa u_i :t ovat (sopivassa mielessä) rajoitettuja ja riippumattomia ε :sta, sanotaan, että tehtävään tehty häiriö on säännöllinen ja ratkaisun esitys u_ε :den avulla säännöllinen häiriökehitemä. Tällöin on luontevaa kutsua termiä u_1 ratkaisun u_ε derivaataksi häiriön suhteen.

[227]

Edellä esitetty johdattelu on hyvin epäformaali ja etenee eri suuntaan kuin perinteisessä matemaattisessa analyysissä, jossa aluksi määritellään derivaatta, todistetaan jatkuva derivoituvuus ja sen jälkeen johdetaan kehitelmän olemassa olo Taylorin sarjoista. Lähestymistavan valinta on tietoinen, sillä jatkossa huomataan, että erilaisista sarjakehitelmistä saadaan hyödyllistä tietoa myös tapauksissa, joissa perinteistä Taylorin sarjaa ei voida muodostaa tai se ei ainakaan suppene.

Tarkastellaan nyt häiriöitä konkreettisisä tapauksessa. Alkuarvotehtäväksi muutetussa (ja normeeratussa) paperikone-esimerkissä (esimerkki 10.2),

$$\begin{aligned} T_\phi - (kT_r)_r &= 0, \\ -kT_r &= \alpha_1(T - T^h), & r = R - d, \\ kT_r &= \alpha_2(\phi)(T - \bar{T}(\phi)), & r = R, \\ T(r, 0) &= T_0, \end{aligned}$$

voidaan tarkastella useita erilaisia häiriöitä. Voidaan esimerkiksi tarkastella häiriöitä lämmönvaihtokertoimissa ($\alpha_1 = \alpha_1 + \varepsilon\beta$), lämmönjohtavuudessa, lämpökapasiteetissa, alkulämpötilassa ($T_0 = T_0 + \varepsilon\delta T$) tai mallin rakenteessa (pitkittäinen lämmönjohtavuus, $\varepsilon T_{\phi\phi}$). Lämmönvaihtokertoimet tunnetaan usein varsin epätarkasti ja tästä syntyvän epävarmuuden hallinta

on oleellinen osa mallintamisprosessia. Alkuarvon häirintä on suoraan yhteydessä periodisuusehdon numeeriseen ratkaisemiseen Newton-Raphson-menetelmällä ja lämmönjohtavuuden tarkastelu paljastaa, voidaanko mallia ylipäätään soveltaa esitetystä yksinkertaistetussa muodossa.

Tarkastellaan lähemmin tapausta, jossa mallia häiritään palauttamalla tarkasteluun kehän suuntainen lämmönjohtavuus. Tällöin yhtälöihin ilmestyy lisätermi ja pieni parametri ε . Tämän vaikutusta voi yrittää arvioida häiriökehityksen avulla siten, että mallin ratkaisu korvataan muodollisesti häiriökehityksellä. Esimerkissä T korvataan siis lausekkeella $T^0 + \varepsilon T^1 + O(\varepsilon^2)$ ja kirjoitetaan syntynyt yhtälö auki niin, että eri ε :n potenssit kootaan yhteen eli

$$\begin{aligned} T_\phi^0 - (kT_r^0)_r + \varepsilon(T_\phi^1 - (kT_r^1)_r - T_{\phi\phi}^0) &= O(\varepsilon^2), \\ kT_r^0 - \alpha(T^0 - \bar{T}) + \varepsilon k(T_r^1 - \alpha(T^1)) &= O(\varepsilon^2), \\ T^0 - T_0 + \varepsilon T^1 &= O(\varepsilon^2). \end{aligned}$$

Jos asetetaan aluksi $\varepsilon = 0$, saadaan alkuperäinen (yksinkertaistettu) yhtälö, eli T^0 on yksinkertaistetun mallin ratkaisu. Tämän jälkeen voidaan tarkastella tapausta, jossa ε on positiivinen mutta mielivaltaisen pieni. Tällöin $O(\varepsilon^2)$ termi häviää ja yhtälöistä jää jäljelle

[228]

$$T_\phi^1 - (kT_r^1)_r = T_{\phi\phi}^0$$

homogeenisin alku- ja reunaehdoin. Tämän yhtälön ratkaisu (jos sellainen on olemassa) on kehityksen seuraava termi. Ratkeavuuden tarkastelu edellyttää syvällisempää analyysiä, esimerkiksi missä mielessä T^0 :lla on kaksi derivaattaa ϕ :n suhteen, jotta tehtävä on ylipäätään määritelty.

Jos verrataan tätä esimerkkiä pohjavesiesimerkkiin (esimerkki 10.1), havaitaan, että molemmissa yritetään häivyttää toisen asteen termi. Tässä esimerkissä reunaehdot ovat kuitenkin erilaiset. Rajatehtävälle on mahdollista löytää periodinen ratkaisu. Lisäksi jos rajaratkaisu T^0 on periodinen ja T^1 on ratkaistavissa, on myös T^1 periodinen. Siten häiriökehityksellä voi antaa mielekkäitä ratkaisuja.

Muiden häiriöiden (alkuarvo, reunaehdot) suhteen häiriökehityksellä toimii ongelmitta. Tehtävän tyyppi ei muutu, joten kehityksestä syntyvät yhtälöt ovat ratkeavia ja ratkaisut rajoitettuja. Tarkastellaan esimerkiksi riippuvuutta lämmönvaihtokertoimesta α korvaamalla se kertoimella $\alpha_\varepsilon = \alpha + \varepsilon\beta$, jossa β on jokin reunalla määritelty sopiva funktio. Jos nyt esitetään $T = T^0 + \varepsilon T^1 + \dots$, voidaan kehittää reunaehto muodossa

$$k \left(\frac{\partial T^0}{\partial r} + \varepsilon \frac{\partial T^1}{\partial r} \right) + \alpha(T^0 + \varepsilon T^1 - \bar{T}) + \varepsilon\beta(T^0 + \varepsilon T^1 - \bar{T}) + \dots = 0.$$

Tästä saadaan erottelemalla ε :n potenssit aluksi alkuperäinen ehto

$$k \frac{\partial T^0}{\partial r} + \alpha(T^0 - \bar{T}) = 0$$

ja sitten

$$k \frac{\partial T^1}{\partial r} + \alpha T^1 = -\beta(T^0 - \bar{T}).$$

T^1 :lle saadaan siis yhtälö, jonka datassa näkyvät sekä T^0 että häiriö β . Yhtälö on lineaarinen (myös tapauksessa, jossa alkuperäinen tehtävä T^0 :lle olisi epälineaarinen) ja häiriö β on ainoan epähomogeenisen datan kerroin. Ratkaisu T^1 riippuu siis lineaarisesti β :sta. Voidaan sanoa, että $T^1 = T^1(\beta)$ on ratkaisun T derivaatta α :n suhteen suuntaan β riippumatta siitä, olivatko α ja β vakioita vai funktioita.

10.3 Herkkyysanalyysi

Edellä muotoiltu mallin ratkaisun derivaatta datassa olevan häiriön suhteen ei välttämättä aina ole kovin hyödyllinen ja tarkoituksenmukainen sellaisenaan. Jokaiselle häiriölle on ratkaistava oma yhtälönsä, jolloin eri häiriöitä on vaikea verrata keskenään. Toisaalta usein ollaan kiinnostuneita vain ratkaisun tietyistä piirteistä, jolloin kaikki ratkaisussa tapahtuvat muutokset eivät ole relevantteja.

Jos tiedetään tarkkaan, mitä ratkaisulta halutaan, analyysiä voi tehostaa. Oletetaan, että halutaan tietää, miten häiriö vaikuttaa funktioon $J(T)$, jossa J on jokin reaaliarvoinen ratkaisusta riippuva funktio. Esimerkiksi tela-esimerkin tapauksessa voi kiinnostaa vaikka

$$J(T) = \int_0^{2\pi} \int_{R-d}^R T \quad (\text{keskilämpötila})$$

tai

$$J(T) = \int_{R-d}^R (T_0 - T_{2\pi})^2 \quad (\text{"virhe" periodisuudessa}).$$

Formalisoidaan tilannetta hieman: oletetaan, että malli on kirjoitettavissa abstraktisti muotoon

$$LX = F,$$

jossa X on mallin ratkaisu, $L = L(\alpha)$ on lineaarinen operaattori, jonka kertoimet riippuvat mallin datasta α ja $F = F(\alpha)$ sisältää mallin muun

datan, joka sekin voi riippua datasta α . Ratkaisussa kiinnostaa erityisesti suure $J(X)$, jossa J on derivoituva reaaliarvoinen X :n funktio.

Häiritään tehtävää nyt niin, että data α korvautuu datalla $\alpha + t\beta$, jollekin β . Tällöin jos β kiinnitetään, L , F , X ja J ovat kaikki t :n funktioita. Miten lasketaan $\frac{\partial J}{\partial t}$ (eli J :n derivaatta α :n suhteen suuntaan β)?

Helposti saadaan

$$\frac{\partial}{\partial t} J(X(t)) = \frac{\partial}{\partial X} J(X) \frac{\partial X}{\partial t} = \left(\frac{\partial J}{\partial X} \right)^t \cdot \frac{\partial X}{\partial t}.$$

Toisaalta koska $L(t) X(t) = F(t)$ kaikilla t , saadaan derivoimalla

$$L \frac{\partial X}{\partial t} + \frac{\partial L}{\partial t} X = \frac{\partial F}{\partial t}$$

eli

$$L \frac{\partial X}{\partial t} = \frac{\partial F}{\partial t} - \frac{\partial L}{\partial t} X.$$

Tämä on muodollisesti kuvattuna ratkaisun derivaatan yhtälö edellisessä kappaleessa tarkoitettussa mielessä. $\frac{\partial J}{\partial t}$ voidaan kuitenkin määrittää myös ilman derivaattaa, kun kerrotaan derivaatan yhtälö vasemmalta ”vektorilla” P ,

$$P^t L \frac{\partial X}{\partial t} = P^t \left(\frac{\partial F}{\partial t} - \frac{\partial L}{\partial t} X \right).$$

Jos nyt voidaan valita P siten, että $P^t L = \left(\frac{\partial J}{\partial X} \right)^t$, saadaan

$$\frac{\partial J}{\partial t} = \left(\frac{\partial J}{\partial X} \right)^t \frac{\partial X}{\partial t} = P^t L \frac{\partial X}{\partial t} = P^t \left(\frac{\partial F}{\partial t} - \frac{\partial L}{\partial t} X \right).$$

Sanotaan, että P on tehtävän liittotila (adjoint state). Se ratkaisee tehtävän, joka voidaan muodollisesti kirjoittaa $L^t P = \frac{\partial J}{\partial X}$. Tämä tehtävä ei riipu dataan tehtävästä häiriöstä β , joten se tarvitsee ratkaista vain kerran. Tämän jälkeen J :n riippuvuus eri häiriöistä näkyy suoraan termeissä $\frac{\partial F}{\partial t}$ ja $\frac{\partial L}{\partial t}$ ja J :n herkkyyttä eri häiriöille voidaan tutkia ratkaisematta joka kerta erillistä tehtävää.

Palattaessa formalismista konkreettisiin malleihin, käsitteellisesti vaativin osa on liittotehtävän muotoilu ja ratkaiseminen. Jos malli on äärellisulotteinen lineaarinen yhtälöryhmä, jolloin L on matriisi, liittotehtävä vastaa yhtälöryhmää matriisille L^t . Differentiaaliyhtälömalleille liittotehtävän määrittely edellyttää vähän syvällisempää analyysiä. (Toki tätä edellyttää jo yllä kuvattun operaattoriformalismin käyttökäytäntö.) Esimerkiksi telatehtävälle

$$T_\phi - (kT_r)_r = 0,$$

$$T(r, 0) = T_0 + \text{reunaehdot},$$

liittotehtävä ratkaistaankin ϕ :n suhteen ”takaperin”, koska ϕ -derivaatan merkki muuttuu:

$$-P_\phi - (kP_r)_r = \frac{\partial J}{\partial t},$$

$$P(r, 2\pi) = \frac{\partial J}{\partial t} + \text{reunaehdot}.$$

Liittotehtävän data riippuu funktiosta J . Jos esimerkiksi tarkastellaan periodisuutta ja $J = \int_{R-d}^R (T_0 - T(r, 2\pi))^2 dr$, $\frac{\partial J}{\partial T} = 0$ alueen sisällä, mutta liittotehtävän ”loppuarvo” on $2(T_0 - T(r, 2\pi))$.

Edellinen tarkastelu yleistyy helposti myös tapauksiin, joissa itse tilamalli on epälineaarinen tai tarkasteltava piirre J riippuu suoraan myös häiritävistä parametreista α . Periaatteessa jos mallin määrittelyssä esiintyvät funktiot ovat derivoituvia, mallin ratkaisu (tai sen derivoituvat funktiot) on derivoitavissa datan suhteen, oli malli kuinka monimutkainen tahansa. Käytännössä derivaatan laskeminen voi olla hieman työlästä, ja se saattaa edellyttää esimerkiksi koko ratkaisun väliaikaista tallettamista, mikä ajasta riippuvissa tehtävissä voi olla kohtuuton vaatimus.

[231]

10.4 Epäsäännöllinen häiriö

Palataan aiemmin esitettyyn pohjavesiongelmaan (esimerkki 10.1), jossa havaittiin, että rajayhtälö ja sen ratkaisut poikkesivat laadullisesti häiritystä (eli alkuperäisestä) tehtävästä. Tällaista tapausta kutsutaan yleisesti epäsäännölliseksi häiriöksi (singulaarinen häiriö, singular perturbation). Tällaisille tehtäville ratkaisu ei ole jatkuva pienen parametrin suhteen (riittävän vahvassa mielessä – edellä todettiin, että ratkaisut konvergoivat kyllä keskimäärin mutta tämä ei riitä vielä säilyttämään ratkaisujen reunakäyttäytymistä).

Singulaarisesti häirityille tehtäville on tyypillistä, että pienen parametrin vaikutus rajoittuu hyvin pieneen alueeseen, rajakerrokseen. Tällaista käyttäytymistä ei käytännössä voi mallintaa rajamallin ratkaisuun lisättävällä korjaustermillä. Asymptoottinen tarkastelu onkin tehtävä hieman eri tavalla.

Niin kutsutussa moniskaalamenetelmässä (method of multiple scales) ratkaisu esitetään usean eri mittakaavaisen muuttujan funktiona, jolle sitten haetaan häiriökehitysmää. Menetelmän havainnollistamiseksi tarkastellaan pohjavesiongelmaa hieman modifioituna. (Alkuperäisessä mallissa

rajaongelma on liian triviaali ja oleellinen osa menetelmästä jäisi käsittelemättä.)

Tarkastellaan tehtävää

$$u + u_x - \varepsilon u_{xx} = 0, \quad u(0) = \alpha, \quad u(1) = \beta.$$

Merkitään $z = x$ alkuperäistä pituuskaalaa. Sen lisäksi tarvitaan lyhyt pituuskaala $\xi = x/\varepsilon$.

Mittakaavamuunnokset vaikuttavat luonnollisesti paikkaderivaattojen laskentaan. Menetelmän erityispiirre on, että molempien mittakaavojen derivaatat jätetään näkyviin yhtä aikaa (toisin kuin, jos olisi kyse tavanomaisesta muuttujanvaihdosta). Niinpä yhtälöissä esiintyvillä derivaatoille saadaan lausekkeet

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} &= \frac{d}{dz} + \frac{1}{\varepsilon} \frac{d}{d\xi}, \\ \frac{d^2}{dx^2} &= \frac{d^2}{dz^2} + \frac{2}{\varepsilon} \frac{d^2}{dzd\xi} + \frac{1}{\varepsilon^2} \frac{d^2}{d\xi^2}. \end{aligned}$$

Korvataan nyt yhtälössä u kehitelmällä $u = u_0(z, \xi) + \varepsilon u_1(z, \xi) + \dots$ ja sijoitetaan kehitelmä yhtälöön

$$[232] \quad 0 = \frac{1}{\varepsilon}(-u_{0,\xi\xi} + u_{0,\xi}) + (-u_{1,\xi\xi} + u_{1,\xi} - 2u_{0,\xi z} + u_{0,z} + u_0) + \dots$$

Kehtelmän ensimmäisestä termistä (kerroin $1/\varepsilon$) voidaan aluksi päätellä, että u_0 on muotoa $u_0 = A + B e^\xi$, missä $A = A(z)$, $B = B(z)$.

Nyt on määrättävä A ja B . Monen skaalan menetelmän yhteydessä vapaiden kertoimien määrääminen (muiden skaalojen funktiona) tehdään yleensä siten, että korkeamman asteen korjaustermeille saadaan halutut ominaisuudet. Käytännössä tämä tarkoittaa sitä, että korjaustermien on pysyttävä rajoitettuna lyhimmissä skaaloissa (joissa tarkasteluväli on käytännössä ääretön vaikka alkuperäinen tehtävä olisi määritelty äärellisellä välillä). Kirjoitetaan siis tehtävä korjaustermille u_1 :

$$-u_{1,\xi\xi} + u_{1,\xi} = 2u_{0,\xi z} - u_{0,z} - u_0 = (B_z - B)e^\xi - (A_z + A).$$

Tämän yhtälön ratkaisu u_1 pysyy (ε :sta riippumatta) rajoitettuna $1/\varepsilon$ pituisella välillä (vain), jos yhtälö on homogeeninen. Siten on siis oltava

$$A_z + A = 0, \quad B_z - B = 0.$$

Tästä seuraa edelleen, että $A = a e^{-z}$, $B = b e^z$, jolloin kehtelmän rajatermiksi saadaan (yleisessä muodossa)

$$u_0(z, \xi) = ae^{-z} + be^{z+\xi} = ae^{-x} + be^{x+x/\varepsilon}.$$

Ehdosta $u(0) = \alpha$ seuraa $a = \alpha - b$. Vastaavasti $b \approx (\beta - \alpha e^{-1})e^{-1-1/\varepsilon}$. Ratkaisu toteuttaa (likimain) reunaehdot ja käyttäytyy laadullisesti oikein.

Ratkaisun käyttäytymisestä voidaan tehdä havainto, että lähes koko alueessa ratkaisu käyttäytyy kuten yhden skaalan rajatehtävän ratkaisu, jolle reunaehto on kiinnitetty pisteessä 0. Lähellä pistettä 1 tapahtuu jotakin lyhyessä skaalassa. Tämä on tyypillistä singulaarisille häiriötehtäville. Rajatehtävä toimii hyvin lähes koko alueessa lukuun ottamatta ohutta rajakerrosta, jossa tarvitaan skaalattu tehtävä selittämään nopeat muutokset, joita 'ylimääräinen' reunaehto pakottaa ratkaisuun.

Tämä havainto voi helpottaa häiriöanalyysin tekoa. Jos tiedetään, missä rajakerros sijaitsee, voidaan usein ratkaista rajatehtävä (alkuperäisessä mittakaavassa) sen ulkopuolella ja tämän lisäksi tarkastella lyhyeen mittakaavaan muutettua yhtälöä rajakerroksen sisällä. Sovittamalla näin saadut kehittämät yhteen, saadaan ratkaisulle esitys koko alueessa. Käytännössä tähän liittyy kolme ongelmaa: pitää tietää/arvata, missä rajakerrokset ovat, mitä mittakaavoja niihin liittyy ja miten eri kehittämät liimataan oikein yhteen. Näihin kysymyksiin voi etsiä esimerkkejä ja vinkkejä esimerkiksi hakusanoilla "asymptotic analysis", "perturbation analysis" tai "matched asymptotics".

[233]

Vähän esimakua oikeista rajakerrosanalyyseistä saadaan, jos yritetään soveltaa menetelmää vaikka aiemmissa luvuissa esiintyneeseen Van der Pol-yhtälöön. Tämä voidaan kirjoittaa muotoon

$$u'' + u - \alpha(1 - u^2)u' = 0.$$

Jos α on pieni, kyse on pienestä, säännöllisestä häiriöstä tavalliseen harmoniseen oskillaattoriin ja häiriökehiteelmä on helppo laskea. Jos sen sijaan tarkastellaan toista ääritapausta, $\alpha = 1/\varepsilon$, kyse on singulaarisesta häiriöstä. Voidaan siis odottaa rajakerroksia ja niiden välille sijoittuvia hitaamman kehityksen alueita. Tarkastelualueella ei ole luonteivia reunoja, joten rajakerrosten sijoittuminen ei ole mitenkään selvää etukäteen.

Mitkä sitten ovat tarvittavat aikaskaalat? Tarkastellaan kolmea eri aika-skaalaa: nopeaa (t/ε), alkuperäistä (t) ja hidasta (εt).

Nopeassa skaalassa yhtälön johtavaksi termiksi saadaan

$$u'' - (1 - u^2)u' = 0,$$

joka on epälineaarinen toisen kertaluvun yhtälö, jolla voi odottaa olevan mielekkäitä ratkaisuja.

Alkuperäisessä skaalassa jäljelle jää puolestaan ehto

$$(1 - u^2)u' = 0,$$

joka käytännössä pakottaa ratkaisun vakioksi eikä tunnu antavan mitään mielekästä lisäinformaatiota.

Hitaassa skaalassa rajayhtälöksi saadaan puolestaan

$$u - (1 - u^2)u' = 0.$$

Jos $|u| \gg 1$, ratkaisu käyttäytyy likimain kuin laskeva eksponentiaalifunktio mutta lähestyttäessä, kriittistä arvoa $|u| = 1$ muutosnopeus kuitenkin kiihtyy.

Karkea analyysi näyttää siis viittaavan siihen, että Van der Pol -yhtälön ratkaisu jakautuu laadullisesti kahteen osaan: hitaaseen, jossa ajassa $1/\varepsilon$, ratkaisu lähestyy kiihtyvästi arvoa $u = 1$ ylhäältä päin (tai vastaavasti arvoa $u = -1$ alhaalta päin), ja nopeaan, jossa ajassa ε ratkaisu vaihtaa etumerkkiä aluksi hitaasti kiihdyttäen, sitten eksponentiaalisesti kasvaen ja lopuksi hidastaen. Vastaava käyttäytyminen on tunnistettavissa yksittäisen ratkaisun graafista, mutta siitä ei voida suoraan päätellä aikavakioiden käyttäytymistä kerroinparametrin funktiona. Tätä ei tietysti voida päätellä vielä edellä kuvatustakaan, koska eri ratkaisukomponenttien yhteensopivuutta (ja siten valittujen aikaskaalojen oikeellisuutta) ei ole todennettu. Ilman rajayhtälöiden ratkaisemista on myös vaikeaa päätellä mitään u :n maksimi-arvon ja ε :n riippuvuudesta.

[234]

10.5 Dimension alentaminen

Kun halutaan ymmärtää mallien käyttäytymistä laadullisesti on usein hyödyllistä pyrkiä alentamaan mallin dimensiota (eli riippumattomien muuttujien määrää). Ilmeisin tapa tähän on olettaa kaikki malliin vaikuttavat suureet ja itse ratkaisu vakioiksi tiettyyn suuntaan, jolloin vastaava koordinaatti voidaan unohtaa tarkastelusta. Joissakin tapauksissa tämä voidaan tehdä mielekkäästi vain erityisissä koordinaatistoissa (esim. napa- tai pallokoordinaateissa). Näin toimien voidaan usein paikkariippuvuus redusoida yhteen paikkamuuttujaan.

Aika- ja paikkariippuvuutta voidaan pyrkiä tarkastelemaan erikseen, jolloin on usein mahdollista päästä differentiaaliyhtälömalleihin, joita on helppo käsitellä analyttisesti ja symbolisesti. Näin ei kuitenkaan päästä kiinni kaikkiin mallin ominaisuuksiin. Onneksi on mahdollista etsiä myös erikoistapauksia, joissa aika- ja paikkariippuvuudella on jokin yhdistävä tekijä, jonka tunnistaminen paljastaa usein oleellisia piirteitä mallista ja sen ratkaisuisista.

Periaatteessa kyse on siitä, voidaanko ratkaisulle $u = u(x, t)$ löytää esitys $u(x, t) = f(s(x, t))$, missä $s(x, t)$ on jokin ajan ja paikan funktio ja f kuvaa ratkaisua s :n funktiona.

Yksinkertaisin relevantti ajan ja paikan funktio on tyyppiä $s = x - ct$, joka kuvaa nopeudella c etenevää aaltorintamaa. Tarkastellaan esimerkiksi yhtälöä

$$u_t - u_{xx} = au(1 - u)$$

ja etsitään tälle ratkaisua, joka olisi muodossa $u(x, t) = f(s(x, t))$, missä $s(x, t) = x - ct$. Tällöin $u_t = f_s s_t = -cf_s$ jne., jolloin yhtälö saadaan muotoon

$$-cf_s - f_{ss} = af(1 - f).$$

Se, että yhtälö pystytään kirjoittamaan pelkästään s derivaattojen avulla on jo hyvä merkki. Lisäksi on vielä osoitettava, että näin saadulla yhtälöllä on mielekkäitä ratkaisuja ja tässä tapauksessa näin on. Riittävän suurilla c :n arvoilla on olemassa ratkaisu f , joka on monotonisesti laskeva ja jonka arvot ovat välillä $[0, 1]$. Tämä tarkoittaa, että alue, jossa u on likimain yksi, laajenee ajan kuluessa ja u kasvaa.

Periaatteessa s voi olla monimutkaisempikin funktio. Tällöin puhutaan usein similariteettimuuttujasta ja similariteettiratkaisusta. Tällöin taustalla on ajatus, että ratkaisu näyttää joka hetki samanlaiselta, ja vain mittakaava muuttuu. Jos esimerkiksi $s(x, t) = x/\sqrt{t}$, ratkaisu etenee hidastuen. Tarvitaan siis nelikertainen aika, jotta muutos etenee kaksinkertaisen matkan päähän. Similariteetti x/\sqrt{t} on tyypillinen lämpöyhtälölle

$$T_t - T_{xx} = 0.$$

(Kokeile kirjoittaa $T = f(x/\sqrt{t})$ ja ratkaista f .)

Tärkeä erikoistapaus ovat aikaharmoniset ratkaisut. Tällä tarkoitetaan tilanteita, joissa ratkaisu $u(x, t)$ voidaan kirjoittaa muodossa $u(x, t) = \cos(\omega t)f(x)$ (tai vielä yleisemmin $u(x, t) = e^{ct}f(x)$, jossa w tai c kiinnittävät aikakäyttäytymisen, jonka jälkeen jää pelkästään stationäärinen yhtälö f :n määrittämiseen.

10.6 Harjoitustehtäviä

1. Tarkastele tehtävän $x^2 + \varepsilon x - 1 = 0$ ratkaisua kehittämällä se ε :n suhteen asympotoottisena kehitelmänä.
 2. Miten tarkastelisit tehtävän $x^2 + x/\varepsilon - 1 = 0$ ratkaisua asympotoottisesti, kun ε on pieni?
 3. Muotoile säännöllinen häiriökehitelmä Van der Pol -yhtälölle.
 4. Tarkastellaan epäsäännöllistä häiriötehtävää Van der Pol -yhtälölle. Arvon $u = 1$ ympäristössä pitäisi sovittaa yhteen erittäin pitkä ja erittäin lyhyt mittakaava. Tarkastellaan mahdollisuutta löytää mittakaava, joka on näiden ääripäiden välissä ja jossa kaikki yhtälön kolme termiä olisivat yhtä aikaa relevantteja. Kirjoitetaan u muodossa $u = 1 + \varepsilon^s v$ ja tarkastellaan tilannetta mittakaavassa $t\varepsilon^r$. Löytyykö s ja r siten, että yhtälön kaikki termit ovat asympotoottisella rajalla mukana? Mitä vaikutuksia tarkastelulla voisi olla eri kehitelmien yhteensovittamiseen?
- [236]
5. Tarkastellaan (normeerattua) vaimennettua heiluria

$$u'' - \varepsilon u + u = 0.$$

Muotoile ratkaisulle säännöllinen häiriökehitelmä. Kuvaako kehitelmän ratkaisu todellista käyttäytymistä? Muodosta kehitelmä, jossa esiintyvät aikaskaalat t ja t/ε (ja halutessasi myös t/ε^2). Etsi myös suoraan ratkaisua muodossa $u = e^{ct}$ jollekin kompleksiselle c :lle.

Kirjallisuutta

- [1] J. D. Cole. *Perturbation methods in applied mathematics*. Blaisdell, 1968.
- [2] A. H. Nayfeh. *Introduction to perturbation techniques*. John Wiley & Sons, 1981.

11

Akustinen mallinnus

SEPPO POHJOLAINEN ja ANTTI SUUTALA

Merkintöjä

[238]

\mathbb{R} reaalityöt

\mathbb{C} kompleksiluvut

\mathbb{R}^3 xyz -koordinaatisto

$\mathbf{x} = (x, y, z) = (x_1, x_2, x_3)$ \mathbb{R}^3 :n alkio

$\mathbf{x} \cdot \mathbf{y} = x_1y_1 + x_2y_2 + x_3y_3$ pistetulo

$\nabla f(\mathbf{x}) = \left(\frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial y}, \frac{\partial f}{\partial z} \right)$ gradientti

$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ Laplacen operaattori

$\frac{\partial p}{\partial \mathbf{n}} = \nabla p \cdot \mathbf{n}$ funktion p derivaatta yksikkövektorin \mathbf{n} suunnassa (suunnattu derivaatta)

$i = \sqrt{-1}$

$\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)$ Diracin ”deltafunktio”

11.1 Akustinen malli

Tarkastellaan äänen käyttäytymistä kaasussa tai nestemäisessä väliaineessa. Fysikaaliselta kannalta kuulemamme ääni muodostuu korviemme aistimisesta paineen vaihteluista meitä ympäröivässä väliaineessa. Nesteen tai kaasun käyttäytymistä kuvaavat yhtälöt pohjautuvat yleisiin virtausmekaniikan yhtälöihin. Tästä juontaa myös akustiikassa yleinen tapa kutsua niitä fluideiksi. Seuraavassa esitetään yksinkertainen aaltoyhtälö, joka on yleisin (lineaari) akustiikan mallintamiseen käytetty yhtälö. Vaikka aaltoyhtälö on melko yksinkertaistettu malli, on se osoittautunut erittäin käyttökelpoiseksi kuvaamaan äänen käyttäytymistä mm. yleisimmin kohtaamassamme fluidissa, ilmassa.

Käytetty tarkastelutapa on osin heuristinen eikä pyri täydelliseen matemaattiseen tarkkuuteen.

11.1.1 Lineaarinen aaltoyhtälö

Tarkastellaan äänikenttää (paineenttä) kolmiulotteisessa avaruudessa, jonka paikkavektori $\mathbf{x} = (x, y, z)$. Fluidin tiheys $\rho(\mathbf{x}, t)$, fluidin nopeus $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$ ja paine $p(\mathbf{x}, t)$ ovat paikan \mathbf{x} ja ajan t funktioita. Mallin muodostaminen nojautuu kontinuumimekaniikkaa käsittelevässä luvussa esitettyihin massan- ja liikemäärän säilymsyhtälöihin ja paineen ja tiheyden välistä yhteyttä kuvaaviin termodynaamisiin yhtälöihin. Yleisessä muodossaan nämä yhtälöt muodostavat epälineaarisen osittaisdifferentiaaliyhtälöryhmän, jonka ratkaiseminen numeerisestikin voi olla vaikeaa. Seuraavassa esitetään suhteellisen yksinkertainen malli, jolla voidaan sangen hyvin arvioida äänen käyttäytymistä.

Tarkastellaan idealisoitua kitkatonta (viskositeetti on nolla) fluidia. Fluidin oletetaan olevan varauksetonta, jolloin siihen ei kohdistu sähkökentän aiheuttamia voimia. Painovoiman vaikutus on merkittävä vain erittäin alhaisilla taajuuksilla, joten myös se jätetään huomiotta. Fluidin kokoonpuristumis- ja laajenemisprosessi oletetaan adiabaattiseksi, jolloin fluidiolkoiden välillä ei tapahdu lämmön siirtoa niiden puristumisen tai laajenemisen aikana. Lisäksi oletetaan, että fluidin käyttäytymistä voidaan tarkastella tasapainotilan ympäristössä, jolloin muutokset muodostuvat pienistä tasapainotilan häiriöistä.

Edellä mainittujen säilymis- ja termodynaamisten yhtälöiden linearisointuja versioita voidaan siten tarkastella tasapainotilan ympärillä. Merkitään

$$\begin{aligned} p(\mathbf{x}, t) &= p_0(\mathbf{x}, t) + p_1(\mathbf{x}, t), \\ \rho(\mathbf{x}, t) &= \rho_0(\mathbf{x}, t) + \rho_1(\mathbf{x}, t), \\ \mathbf{v}(\mathbf{x}, t) &= \mathbf{v}_0(\mathbf{x}, t) + \mathbf{v}_1(\mathbf{x}, t), \end{aligned}$$

missä alaindeksillä 0 merkityt suureet ovat kyseisten suureiden arvoja tasapainotilassa ja alaindeksillä 1 merkityt ovat poikkeamia tasapainotilasta. Yleisessä tapauksessa tasapainotilat voivat olla ajan ja/tai paikan funktioita.

Tarkastellaan nyt yksinkertaisinta tapausta, jossa fluidin oletetaan olevan homogeenista, jolloin suureiden arvot tasapainotilassa ovat riippumattomia paikasta. Lisäksi fluidin oletetaan olevan levossa, jolloin suureiden arvot tasapainotilassa ovat riippumattomia ajasta ja nopeus tasapainotilassa on nolla eli $\mathbf{v}_0 = \mathbf{0}$. Näillä merkinnöillä ja oletuksilla saadaan linearisoitu yhtälöryhmä

$$\frac{\partial \rho_1(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \rho_0 \nabla \cdot \mathbf{v}_1(\mathbf{x}, t) = 0, \quad (11.1)$$

$$\rho_0 \frac{\partial \mathbf{v}_1(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \nabla p_1(\mathbf{x}, t) = 0, \quad (11.2)$$

$$p_1(\mathbf{x}, t) = c^2 \rho_1(\mathbf{x}, t), \quad (11.3)$$

missä c on äänen nopeus. Yhtälö (11.1) on massansäilymisyhtälö, yhtälö (11.2) liikemääränsäilymisyhtälö ja yhtälö (11.3) paineen ja tiheyden välinen lineaarinen yhteys. Koska sekaantumisen vaaraa ei ole, jätetään jatkossa alaindeksi 1 merkitsemättä, jolloin esimerkiksi p merkitsee jatkossa paineen poikkeamaa tasapainotilasta.

[240]

Derivoimalla nyt yhtälö (11.1) ajan suhteen, ottamalla divergenssi yhtälöstä (11.2) ja yhdistämällä näin saadut yhtälöt käyttämällä vielä apuna paineen ja tiheyden välistä yhtälöä (11.3) saadaan lopulta lineaarinen aaltoyhtälö

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 p(\mathbf{x}, t)}{\partial t^2} = \nabla^2 p(\mathbf{x}, t), \quad t > 0, \quad (11.4)$$

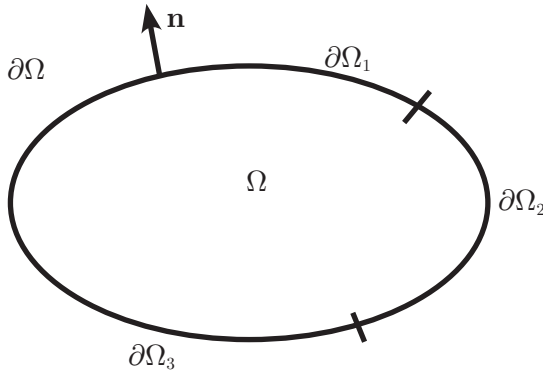
missä p on paine (poikkeama tasapainotilasta), t on aika, $\mathbf{x} = (x, y, z)$ on paikkakoordinaatti \mathbb{R}^3 :ssa. ∇^2 on Laplacen operaattori ja c on äänen nopeus (ilmassa n. 340 m/s).

Akustista mallintamista käsitellään tarkemmin mm. Piercen [6, luvut 2 ja 10] ja Morsen [5, luku 6] kirjoissa, joista löytyy myös tarkempaa tietoa yhtälöiden yleisemmistä muodoista

Yhtälön (11.4) ratkaisemiseksi tarvitaan vielä joitakin täsmennyksiä.

11.1.2 Määrittelyalue

Usein aaltoyhtälöä tarkastellaan suljetussa tilassa, kuten huoneessa. Oletetaan, että tämä tila on alue, joka matematiikassa tarkoittaa avointa yhtenäistä joukkoa, ja merkitään sitä Ω :lla. Alueen reunaa merkitään $\partial\Omega$:lla. Oletetaan, että reuna on riittävän säännöllinen muun muassa siten, että



Kuva 11.1. Alue Ω , jonka reuna $\partial\Omega$ muodostuu osista $\partial\Omega_1$, $\partial\Omega_2$ ja $\partial\Omega_3$. Pinnan ulospäin suuntautunut yksikkönormaali on \mathbf{n} . Pinta on piirretty \mathbb{R}^2 :ssa, vaikka tekstissä tarkastellaan mallintamista \mathbb{R}^3 :ssa.

sen jokaiseen pisteeseen voidaan piirtää pinnan ulospäin suuntautunut yksikkönormaali \mathbf{n} . Asiaa havainnollistetaan kuvassa 11.1.

11.1.3 $L_2(\Omega)$ -avaruus

[241]

Lisää matemaattista rakennetta ongelmalle saadaan, kun määritellään avaruus $L_2(\Omega)$, jossa aaltoyhtälö on määritelty.

$$L_2(\Omega) = \left\{ f : \Omega \rightarrow \mathbb{C} \mid \int_{\Omega} |f(\mathbf{x})|^2 d\Omega < \infty \right\}. \quad (11.5)$$

Tarkasti ottaen $L_2(\Omega)$ -avaruuksien määrittely edellyttää mitallisten funktioiden määrittelyä. Tässä ei tehdä näin vaan voidaan ajatella $L_2(\Omega)$:n alkoita paloittain jatkuvina, itseisesti neliöllisesti integroituvina funktioina. Vaikka tässä vaiheessa riittäisi reaalisen avaruuden määrittely, jatkon tarpeita ajatellen määritellään avaruus kompleksisena.

$L_2(\Omega)$ -avaruuden eräs tärkeä etu on siinä, että voidaan määritellä sisätulo

$$\langle f, g \rangle = \int_{\Omega} f(\mathbf{x}) \overline{g(\mathbf{x})} d\Omega, \quad (11.6)$$

missä $\overline{g(\mathbf{x})}$ on $g(\mathbf{x})$:n (kompleksikonjugaatti) liittoluku ja funktion normi (pituus)

$$\|f\| = \sqrt{\langle f, f \rangle}. \quad (11.7)$$

11.1.4 Reunaehdot

Äänenpaine toteuttaa alueen reunalla ns. reunaehdot. Tässä tyydymme tarkastelemaan kolmea erityyppistä reunaehto.

Dirichlet'n (homogeeninen) reunaehto Tässä reunaehdossa paine on nolla reunalla, ts.

$$p(\mathbf{x}, t) = 0, \text{ kun } \mathbf{x} \in \partial\Omega_1 \quad (11.8)$$

Neumannin (homogeeninen) reunaehto

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{n}} p(\mathbf{x}, t) = \nabla p \cdot \mathbf{n} = 0, \text{ kun } \mathbf{x} \in \partial\Omega_2 \quad (11.9)$$

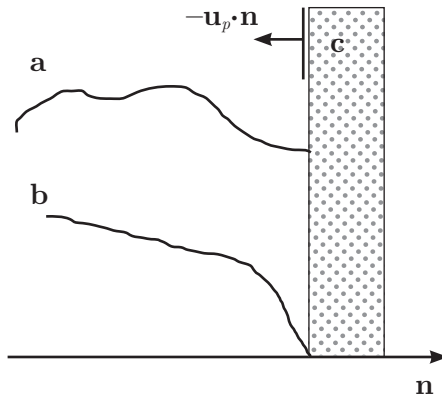
Tässä reunaehdossa paineen derivaatta pinnan normaalin suunnassa on nolla. Tällainen tilanne vallitsee, jos seinä $\partial\Omega_2$ on kova ja jäykkä ja heijastaa täydellisesti saapuvan aallon.

Neumannin epähomogeeninen reunaehto Jos reunan osa liikkuu, joko paineen vaikutuksesta tai sitä voidaan liikuttaa (aktiivinen materiaali, äänilähde) saadaan Neumannin epähomogeeninen reunaehto

[242]

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{n}} p(\mathbf{x}, t) = -\rho_0 \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{u}_p(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{n}, \quad \mathbf{x} \in \partial\Omega_3, \quad (11.10)$$

missä ρ_0 on fluidin tiheys ja $\mathbf{u}_p(\mathbf{x}, t)$ on reunan nopeus tai fluidin hiukkasnopeus reunan osalla $\partial\Omega_3$. Kuvassa 11.2 esitetään erilaisia reunaehtoja.



Kuva 11.2. Reunaehtoja. Käyrät (a) ja (b) kuvaavat painetta. (a) Neumannin homogeeninen reunaehto; (b) Dirichlet'n reunaehto; (c) liikkuvan reunan reunaehto, jossa seinän osa liikkuu nopeudella \mathbf{u}_p sisäänpäin.

11.1.5 Lähde-termi

Tilaan Ω voidaan tuoda ääntä ainakin kahdella tavalla. Alueen sisällä voi olla äänilähde. Tällaista äänilähdettä voidaan mallintaa yhtälöön (11.4) lisätyllä lähde-termillä $q(\mathbf{x}, t)$:

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} p(\mathbf{x}, t) = \nabla^2 p(\mathbf{x}, t) + q(\mathbf{x}, t). \quad (11.11)$$

Epähomogeeninen termi $q(\mathbf{x}, t)$ voi tulla yhtälöön joko massan tai liikemäärän säilymisyyhtälön kautta. Jos massaa lisätään (poistetaan) pisteessä \mathbf{x}_0 nopeudella $\dot{m}_S(t)$, tulee massan säilymisyyhtälön (11.2) oikealle puolelle termi

$$\dot{m}_S(t) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0).$$

Tällöin aaltoyhtälön lähde-termi on muotoa

$$q(\mathbf{x}, t) = \ddot{m}(t) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0).$$

Massan lisäysnopeustermi voidaan tulkita myös pisteen \mathbf{x}_0 ympärille asetetun pienen tilavuuden $V(t)$ koon muutosten syrjäyttämän fluidin massana. Tällöin

[243]

$$\dot{m}(t) = \rho_0 \int_{S(t)} \mathbf{v}_n dS,$$

missä $S(t)$ on tilavuutta $V(t)$ rajoittava suljettu pinta, ρ on fluidin tiheys pisteen \mathbf{x}_0 ympäristössä, \mathbf{v}_n on pinnan $S(t)$ normaalin suuntainen nopeus tilavuuden $V(t)$ muuttuessa. Tällöin lähde-termi on muotoa

$$q(\mathbf{x}, t) = -\rho \frac{d}{dt} \int_{S(t)} \mathbf{v}_n dS.$$

Tällaista pistemassalähdettä kutsutaan usein monopoli-lähteeksi. Laajempien lähteiden voidaan ajatella koostuvan laajemmalle alueelle jakautuneista monopoli-lähteistä. Näin voidaan joissakin tapauksissa mallintaa kotoitua kaiutinta.

Toinen mahdollisuus lähteen mallintamiseen tapahtuu liikemäärän säilymisyyhtälön (11.2) avulla. Pisteeseen \mathbf{x}_0 vaikuttava voima $\mathbf{F}(t)$ lisää termin $\mathbf{F}(t) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)$ linearisoidun liikemäärän säilymisyyhtälön (11.2) oikealle puolelle. Tällöin aaltoyhtälön lähde-termiksi tulee

$$q(\mathbf{x}, t) = -\mathbf{F}(t) \cdot \nabla_0 \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0),$$

missä ∇_0 tarkoittaa gradientin ottamista vektorin \mathbf{x}_0 suhteen [6, luku 4.4]. Tällaista lähdettä kutsutaan dipoliksi. Lähde-termi voi yksittäisen pisteen lisäksi muodostua myös joukossa määritellystä dipolilähdejakaumasta. Dipolilähteen voidaan ajatella syntyvän hyvin ohuen pienen levyn värähdellessä pisteen \mathbf{x}_0 suhteen. Dipolijakaumia voidaan käyttää mallinnettaessa koteloiomatonta kaiutinelementtiä tai approksimaationa refleksikotelossa olevalle kaiuttimelle.

Äänilähde voi sijaita myös alueen reunalla, jossa voi olla kaiutin tai seinä voi muodostua liikutettavasta älykkäästä materiaalista, jolloin äänilähdettä mallinnetaan Neumannin epähomogeenisella reunaehdolla (11.10). Myös edellä mainitut kaiuttimet ovat todellisuudessa alueen reunalla olevia lähteitä, koska ne todellisuudessa tekevät itsensä muotoisen aukon fluidiin ja lähteenä toimii tämän aukon reunojen liike. On myös tapauksia, joissa äänilähdettä ei voi esittää reunaehdon kautta. Esimerkiksi kaasupullon suuttimesta virtaavan kaasun suhinan tai suihkumoottorien synnyttämän melun mallintaminen ei ole kovinkaan yksinkertaista.

Lähdetermejä käsitellään tarkemmin useimmissa akustiikkaa koskevissa perusteoksissa, esimerkiksi Piercen [6] ja Morsen [5] kirjoissa. Näitä helpolukuisempaa esityksenä voidaan mainita Dowlingin ja Ffowcs Williamsin [1] kirja, jonka luvussa 7 käsitellään monopoli- ja dipolilähteitä.

[244]

11.2 Fourier'n muunnos

Seuraavassa ei kuitenkaan suoraan ryhdytä ratkaisemaan yhtälöitä (11.4)–(11.11), vaan tehdään niille Fourier'n muunnokset. Tuloksena saadaan Helmholtzin yhtälö, joka kertoo akustisen kentän käyttäytymisen taajuustasossa (kulma) taajuuden $\omega = 2\pi f$ funktiona. Määritellään funktion g Fourier-muunnos $Fg = \hat{g}$ yhtälöllä

$$(Fg)(\omega) = \hat{g}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} g(t)e^{-i\omega t} dt, \quad (11.12)$$

kun g on ajan t suhteen riittävän säännöllinen funktio. Fourier'n kääntäismuunnoksen

$$(F^{-1}\hat{g})(t) = g(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \hat{g}(\omega)e^{i\omega t} d\omega \quad (11.13)$$

avulla voidaan palata taajuustasosta aikatasoon.

Fourier'n muunnos F on lineaarinen ts.

$$F[\alpha f + \beta g] = \alpha Ff + \beta Fg, \quad (11.14)$$

lisäksi ajan suhteen otettu derivointi

$$F[g^{(n)}(t)] = (-i\omega)^n F[g(t)] \quad (11.15)$$

muuttuu kertolaskuksi taajuustasossa, kun oletetaan, että g on riittävän säännöllinen.

11.3 Helmholtzin yhtälö

Suoritetaan nyt Fourier'n muunnokset yhtälöön (11.11) ja sen reunaehtoihin (11.8)–(11.10). Merkitään paineen $p(\mathbf{x}, t)$ Fourier'n muunnosta $\hat{p}(\mathbf{x}, \omega)$:lla. Fourier'n muunnoksen ominaisuuksien perusteella saadaan yhtälö

$$\frac{\omega^2}{c^2} \hat{p}(\mathbf{x}, \omega) + \nabla^2 \hat{p}(\mathbf{x}, \omega) = -\hat{q}(\mathbf{x}, \omega), \quad (11.16)$$

missä ω on kulmataajuus ja \hat{q} lähdetermin Fourier-muunnos. Yhtälöä (11.16) sanotaan *Helmholtzin yhtälöksi*.

Fourier'n muunnoksen avulla saadaan yhtälöitä (11.8)–(11.10) vastaavat reunaehdot:

Dirichlet'n homogeeninen reunaehto

[245]

$$\hat{p}(\mathbf{x}, \omega) = 0. \quad (11.17)$$

Neumannin homogeeninen reunaehto

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{n}} \hat{p}(\mathbf{x}, \omega) = 0. \quad (11.18)$$

Neumannin epähomogeeninen reunaehto

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{n}} \hat{p}(\mathbf{x}, \omega) = -i\omega\rho_0 \hat{\mathbf{u}}_p(\mathbf{x}, \omega) \cdot \mathbf{n}. \quad (11.19)$$

11.3.1 Lokaalisti reagoiva reuna(ehto)

Taajuustasossa voidaan täydentää edellä esitettyä reunaehtoja. Nehän sisälvisivät vakiopaineen lisäksi vain kovan tai kovan ja liikkuvan seinän tapaukset. Usein reuna muodostuu kuitenkin joustavasta ja ääntä vaimentavasta materiaalista.

Tehdään yksinkertaistava oletus. Oletetaan, että seinän materiaali on lokaalisti reagoivaa, toisin sanoen, jos sitä painetaan yhdessä pisteessä,

materiaali joustaa vain siinä pisteessä, mutta jousto ei vaikuta viereisten pisteiden käyttäytymiseen. Näin voidaan mallintaa absorboivan (ääntä vaimentavan) materiaalin käyttäytymistä.

Määritellään alueen reunan akustinen pintaimpedanssi $z(\mathbf{x}, \omega)$ Fouriermuunnettujen paineen ja normaalisuuntaisen hiukkasnopeuden osamääränä kaavalla

$$z(\mathbf{x}, \omega) = \frac{\hat{p}(\mathbf{x}, \omega)}{\hat{\mathbf{u}}_p(\mathbf{x}, \omega) \cdot \mathbf{n}}, \quad \mathbf{x} \in \partial\Omega_3. \quad (11.20)$$

Akustinen pintaimpedanssi on kompleksinen suure, sillä on reaali- ja imaginaariosa

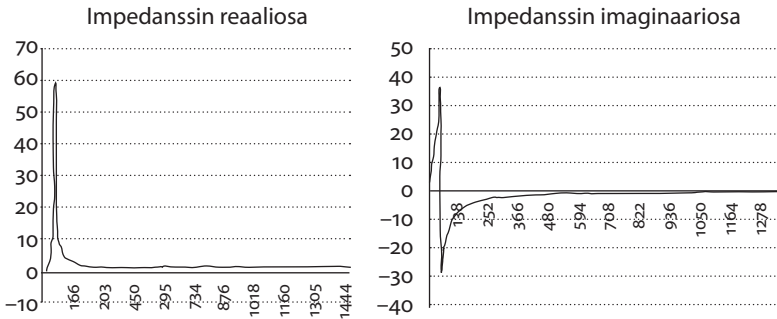
$$z(\mathbf{x}, \omega) = \Re[z(\mathbf{x}, \omega)] + i\Im[z(\mathbf{x}, \omega)] \quad (11.21)$$

ja se voidaan antaa myös vahvistuksen (itseisarvon) $|z|$ ja vaiheen (argumentin) ϕ avulla:

$$z(\mathbf{x}, \omega) = |z(\mathbf{x}, \omega)|e^{i\phi(\mathbf{x}, \omega)}. \quad (11.22)$$

Monien aineiden pintaimpedanssit voidaan mitata niin sanotun impedanssiputken avulla. Kuvassa 11.3 esitetään aaltoputkella mitatun materiaalin normalisoidun pintaimpedanssin reaali- ja imaginaariosa taajuuden funktiona [7].

[246]



Kuva 11.3. Aaltoputkella mitatun eristemateriaalin normalisoidun pinta-impedanssin $\frac{z(\mathbf{x}, \omega)}{\rho_0 c}$ reaali- ja imaginaariosa taajuuden funktiona. Mittaustulokset ovat epäluotettavia alle 100 Hz:n taajuuksilla. x -akseli on taajuus ja y -akselilla on normalisoidun pintaimpedanssin reaali- ja imaginaariosa vasemmanpuoleisessa kuvassa ja vastaavasti imaginaariosa oikeanpuoleisessa kuvassa.

11.4 Ominaisarvot ja ominaisfunktiot

Tarkastellaan aluksi homogeenista ($q = 0$) Helmholtzin yhtälöä

$$-\nabla^2 \hat{p}(\mathbf{x}, \omega) = k^2 \hat{p}(\mathbf{x}, \omega), \quad (11.23)$$

kun reunaehtona on Neumannin homogeeninen reunaehto koko reunalla

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{n}} \hat{p}(\mathbf{x}, \omega) = 0, \quad \mathbf{x} \in \partial\Omega. \quad (11.24)$$

Havaitaan, että yhtälöt (11.23) ja (11.24) muodostavat ominaisarvotehtävän Laplacen operaattorille ∇^2 . Voidaan osoittaa, että Laplacen operaattori määrittelee lineaarisen operaattorin $A : D(A) \rightarrow L_2(\Omega)$, $A = -\nabla^2$, kun määrittelyalue valitaan sopivasti. Lisäksi voidaan osoittaa, että operaattorin ominaisarvot, eli yhtälön

$$A\psi = k^2\psi, \quad k^2 \in \mathbb{C}, \quad \psi \in L_2(\Omega), \quad \psi \neq 0 \quad (11.25)$$

ratkaisut k_n^2 , $n = 0, 1, 2, \dots$, ovat reaaliset ja niitä vastaavat ominaisfunktiot ψ_n , $n = 0, 1, 2, \dots$, ovat ortonormaaleja, eli

$$\langle \psi_i, \psi_j \rangle = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j. \end{cases} \quad (11.26) \quad [247]$$

Oletetaan, että ominaisfunktiot muodostavat numeroituvan täydellisen funktiojoukon $\{\psi_0, \psi_1, \dots, \psi_n, \dots\}$ avaruudessa $L_2(\Omega)$. Tästä seuraa, että jokainen avaruuden $L_2(\Omega)$ funktio f voidaan esittää sarjana ominaisfunktioiden avulla:

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{n=0}^{\infty} \langle f, \psi_n \rangle \psi_n(\mathbf{x}). \quad (11.27)$$

Ominaisarvoja $k_n^2 = \left(\frac{\omega_n}{c}\right)^2$ vastaavia taajuuksia

$$f_n = \frac{k_n c}{2\pi}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (11.28)$$

sanotaan resonanssitaajuuksiksi.

11.5 Gaussin lause

Alkuperäisen Helmholtzin yhtälön (11.16) ratkaisu edellyttää tilavuusintegraalin muuttamista pintaintegraaliksi. Käytössä on tuttu Gaussin lause:

LAUSE 11.1

[Gaussin lause.] Olkoon Ω rajoitettu alue ja olkoon sen reuna $\partial\Omega$ riittävän säännöllinen. Olkoon \mathbf{n} pinnan ulospäin suuntautunut $\partial\Omega$ yksikkönormaa-li ja $\mathbf{v}(\mathbf{x}) = (v_1(\mathbf{x}), v_2(\mathbf{x}), v_3(\mathbf{x}))$ vektoriarvoinen funktio (vektorikenttä) \mathbb{R}^3 :ssa. Gaussin lauseen mukaan

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{v} d\Omega = \int_{\partial\Omega} \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} d\Omega, \quad (11.29)$$

missä ensimmäinen integraali on tilavuusintegraali ja jälkimmäinen pinta-integraali.

11.6 Greenin kaavat

Oletetaan, että u ja v ovat skalaariarvoisia funktioita. Tällöin $u\nabla v$ on vektoriarvoinen funktio. Kun sovelletaan Gaussin lausetta vektorikenttään $u\nabla v$, niin saadaan Greenin ensimmäinen kaava:

$$\int_{\Omega} (\nabla v \cdot \nabla u + u\nabla^2 v) d\Omega = \int_{\partial\Omega} u \frac{\partial v}{\partial \mathbf{n}} d\Omega. \quad (11.30)$$

[248]

Kun vaihdetaan u ja v keskenään ja johdetaan Greenin ensimmäinen kaava vektorikentälle $v\nabla u$ ja vähennetään saadut yhtälöt toisistaan, saadaan Greenin toinen kaava

$$\int_{\Omega} (u\nabla^2 v - v\nabla^2 u) d\Omega = \int_{\partial\Omega} \left(u \frac{\partial v}{\partial \mathbf{n}} - v \frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}} \right) d\Omega. \quad (11.31)$$

11.7 Helmholtzin yhtälön ratkaisu

Ratkaistaan nyt Helmholtzin yhtälö

$$k^2 \hat{p}(\mathbf{x}, \omega) + \nabla^2 \hat{p}(\mathbf{x}, \omega) = -\hat{q}(\mathbf{x}, \omega), \quad k = \frac{\omega}{c}, \quad (11.32)$$

kun reunaehtoina ovat Neumannin homogeeninen reunaehto osalla reunaan

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{n}} \hat{p}(\mathbf{x}, \omega) = 0, \quad \mathbf{x} \in \partial\Omega_1 \quad (11.33)$$

ja Neumannin epähomogeeninen reunaehto

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{n}} \hat{p}(\mathbf{x}, \omega) = \hat{h}(\mathbf{x}, \omega), \quad \mathbf{x} \in \partial\Omega_2 \quad (11.34)$$

reunan loppuosalla, ts. $\partial\Omega = \partial\Omega_1 \cup \partial\Omega_2$. Siis osa reunaa on jäykkä ja osa joko ei ole jäykkä tai ko. reunalla on äänilähde.

Seuraavissa kappaleissa esitettävän ratkaisun strategia on seuraava:

1. Määritellään kyseistä Helmholtzin yhtälöä vastaava Greenin funktio $\hat{G}_\omega(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0)$.
2. Ratkaistaan yhtälö Greenin funktion avulla esimerkiksi ominaisfunktiokehitystä käyttäen (jos se tunnetaan) tai muulla tavalla.
3. Muunnetaan Helmholtzin yhtälö Greenin toisen kaavan avulla tilavuus- ja pintaintegraaliksi.

11.7.1 Greenin funktio

Helmholtzin yhtälöön liittyvä Greenin funktio $\hat{G}_\omega(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0)$ on seuraavan yhtälön ratkaisu

$$k^2 \hat{G}_\omega(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) + \nabla^2 \hat{G}_\omega(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0), \quad k = \frac{\omega}{c}, \quad (11.35)$$

missä $\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)$ on pisteeseen \mathbf{x}_0 kohdistettu Diracin ”deltafunktio”. Yhtälön reunaehdot valitaan homogeenisiksi koko reunalla eli

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{n}} \hat{G}_\omega(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) = 0, \quad \mathbf{x} \in \partial\Omega_i, \quad (11.36)$$

kun $i = 1, 2$.

11.7.2 Greenin funktio ominaisfunktiokehityksen avulla

Koska ominaisfunktiot $\{\psi_n\}$ muodostavat oletuksen perusteella täydellisen ortonormaalien joukon avaruudessa $L_2(\Omega)$, etsitään Greenin funktiota muodossa

$$\hat{G}_\omega(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n(\omega) \psi_n(\mathbf{x}), \quad (11.37)$$

missä kertoimet $a_n(\omega)$ ovat tuntemattomia. Kun sijoitetaan yrite (11.37) yhtälöön (11.35), saadaan yhtälö

$$\sum_{n=0}^{\infty} -k_n^2 a_n(\omega) \psi_n(\mathbf{x}) + \sum_{n=0}^{\infty} k^2 a_n(\omega) \psi_n(\mathbf{x}) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0). \quad (11.38)$$

Otetaan nyt edellä olevasta yhtälöstä sisätulo puolittain ominaisfunktion ψ_m suhteen, jolloin tuntemattomille kertoimille $a_m(\omega)$ saadaan yhtälö

$$a_m(\omega)(-k_m^2 + k^2) \langle \psi_m, \psi_m \rangle = \langle \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0), \psi_m \rangle = \psi_m(\mathbf{x}_0). \quad (11.39)$$

Tästä voidaan ratkaista kertoimet

$$a_m(\omega) = \frac{\psi_m(\mathbf{x}_0)}{k^2 - k_m^2} = \frac{\psi_m(\mathbf{x}_0)}{\left(\frac{\omega}{c}\right)^2 - \left(\frac{\omega_m}{c}\right)^2}. \quad (11.40)$$

Etsitty Greenin funktio on siis

$$\hat{G}_\omega(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\psi_n(\mathbf{x}_0)}{k^2 - k_n^2} \psi_n(\mathbf{x}). \quad (11.41)$$

11.7.3 Helmholtzin yhtälön ratkaisu Greenin funktion avulla

Ratkaistaan nyt viimeinkin Helmholtzin yhtälö. Diracin ”deltafunktion” ominaisuuksien perusteella voidaan kirjoittaa

[250]

$$\hat{p}(\mathbf{x}_0, \omega) = \int_{\Omega} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \hat{p}(\mathbf{x}, \omega) d\Omega, \quad \mathbf{x}_0 \in \Omega. \quad (11.42)$$

Greenin funktion ratkaisuyhtälön (11.35) oikea puoli oli juuri Diracin ”deltafunktio”. Sijoitetaan tämä yhtälö edelliseen. Tällöin saadaan yhtälö

$$\begin{aligned} \hat{p}(\mathbf{x}, \omega) &= \int_{\Omega} \left(k^2 \hat{G}_\omega(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) + \nabla^2 \hat{G}_\omega(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) \right) \hat{p}(\mathbf{x}, \omega) d\Omega \\ &= \int_{\Omega} k^2 \hat{G}_\omega(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) \hat{p}(\mathbf{x}, \omega) d\Omega + \int_{\Omega} \nabla^2 \hat{G}_\omega(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) \hat{p}(\mathbf{x}, \omega) d\Omega \end{aligned} \quad (11.43)$$

Muunnetaan jälkimmäinen integraali Greenin toisen kaavan avulla sellaiseen muotoon, jossa Laplacen operaattori kohdistuu paineeseen \hat{p} . Näin saadaan yhtälö

$$\begin{aligned} \hat{p}(\mathbf{x}, \omega) &= k^2 \int_{\Omega} \hat{G}_\omega(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) \hat{p}(\mathbf{x}, \omega) d\Omega + \int_{\Omega} \nabla^2 \hat{G}_\omega(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) \hat{p}(\mathbf{x}, \omega) d\Omega \\ &= k^2 \int_{\Omega} \hat{G}_\omega(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) \hat{p}(\mathbf{x}, \omega) d\Omega + \int_{\Omega} \hat{G}_\omega(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) \nabla^2 \hat{p}(\mathbf{x}, \omega) d\Omega \\ &\quad + \int_{\partial\Omega} \left(\hat{p}(\mathbf{x}, \omega) \frac{\partial \hat{G}_\omega(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0)}{\partial \mathbf{n}} - \hat{G}_\omega(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) \frac{\partial \hat{p}(\mathbf{x}, \omega)}{\partial \mathbf{n}} \right) d\partial\Omega. \end{aligned} \quad (11.44)$$

Lasketaan yhteen kaksi ensimmäistä integraalia ja otetaan huomioon reunaehdot toisessa. Näin saadaan

$$\begin{aligned} \hat{p}(\mathbf{x}_0, \omega) = & \int_{\Omega} \hat{G}_{\omega}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) (\nabla^2 \hat{p}(\mathbf{x}, \omega) + k^2 \hat{p}(\mathbf{x}, \omega)) d\Omega + \\ & \int_{\partial\Omega_2} \left(-\hat{G}_{\omega}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) \hat{h}(\mathbf{x}, \omega) \right) d\partial\Omega. \end{aligned} \quad (11.45)$$

Sijoittamalla yhtälö (11.16) ensimmäiseen integraaliin ja ottamalla huomioon se, että piste \mathbf{x}_0 voidaan valita vapaasti alueesta Ω , saadaan lopulta ratkaisu

$$\hat{p}(\mathbf{x}_0, \omega) = - \int_{\Omega} \hat{G}_{\omega}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) \hat{q}(\mathbf{x}, \omega) d\Omega + \int_{\partial\Omega_2} \left(-\hat{G}_{\omega}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) \hat{h}(\mathbf{x}, \omega) \right) d\partial\Omega. \quad (11.46)$$

Kun tähän sijoitetaan Greenin funktio ominaisfunktiokehityksen (11.41) avulla, saadaan ratkaisu ominaisfunktioiden avulla.

Valitsemalla funktio $\hat{h}(\mathbf{x}, \omega)$ eri tavoin voidaan yhtälön (11.46) avulla mallintaa erilaisia tilanteita:

1. Nopeusreunaehto, kuten kaiuttimen kalvon liike

$$\hat{h}(\mathbf{x}, \omega) = -i\omega\rho_0\hat{u}_p(\mathbf{x}, \omega), \quad \mathbf{x} \in \partial\Omega_2, \quad (11.47)$$

missä $\hat{u}_p(\mathbf{x}, \omega)$ on kaiuttimen kalvon yksikkönormaalisiin suuntaan suuntautunut nopeus.

2. Pintaimpedanssilla kuvattu lokaalisesti reagoiva reuna

$$\hat{h}(\mathbf{x}, \omega) = \frac{-i\omega\rho_0}{z(\mathbf{x}, \omega)} \hat{p}(\mathbf{x}, \omega), \quad \mathbf{x} \in \partial\Omega_2. \quad (11.48)$$

Jälkimmäisessä tapauksessa ratkaistava paine $\hat{p}(\mathbf{x}, \omega)$ sisältyy myös yhtälön (11.46) oikeaan puoleen, joten yhtälö (11.46) ei anna ratkaisua $\hat{p}(\mathbf{x}, \omega)$ eksplisiittisesti. Sen sijaan se antaa integraaliyhtälön alueessa Ω lähteen \hat{q} ja reunan osalla $\partial\Omega_2$ olevan paineen avulla, josta paine tulee ratkaista.

$$\hat{p}(\mathbf{x}_0, \omega) = - \int_{\Omega} \hat{G}_{\omega}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) \hat{q}(\mathbf{x}, \omega) d\Omega + \int_{\partial\Omega_2} \left(-\hat{G}_{\omega}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) \frac{i\omega\rho_0}{z(\mathbf{x}, \omega)} \hat{p}(\mathbf{x}, \omega) \right) d\partial\Omega. \quad (11.49)$$

ESIMERKKI 11.1

Tarkastellaan suorakulmaisen särmiön, kuten huoneen, muotoisen tilan sisäistä kenttää. Tilan määrittämä alue on

$$\Omega = \{(x, y, z) \mid 0 < x < l_x, 0 < y < l_y, 0 < z < l_z\}. \quad (11.50)$$

Alueen reuna $\partial\Omega$ muodostuu suorakulmaisen särmiön sivutahkoista.

Ratkaistaan homogeenisen Helmholtzin yhtälön (11.23) ominaisarvot ja ψ -funktiot tekemällä ratkaisuyrite

$$\psi(x, y, z) = f(x)g(y)h(z). \quad (11.51)$$

Kun tämä yrite sijoitetaan homogeeniseen Helmholtzin yhtälöön (11.23), saadaan ominaisarvotehtävä muotoon

$$\frac{f''(x)}{f(x)} + \frac{g''(y)}{g(y)} + \frac{h''(z)}{h(z)} = k^2 \quad (11.52)$$

ja edelleen separoiduksi kolmeen erilliseen yhtälöön

$$[252] \quad \begin{cases} \frac{d^2 f(x)}{dx^2} = -k_x^2 f(x), & \frac{f}{dx}(0) = \frac{f}{dx}(l_x) = 0, \\ \frac{d^2 g(y)}{dy^2} = -k_y^2 g(y), & \frac{g}{dy}(0) = \frac{g}{dy}(l_y) = 0, \\ \frac{d^2 h(z)}{dz^2} = -k_z^2 h(z), & \frac{h}{dz}(0) = \frac{h}{dz}(l_z) = 0, \end{cases} \quad (11.53)$$

$$k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2. \quad (11.54)$$

Nämä yhtälöt voidaan ratkaista, kun otetaan huomioon reunaehdot. Ominaisarvoa

$$k_{n_x n_y n_z}^2 = \left(\frac{n_x \pi}{l_x}\right)^2 + \left(\frac{n_y \pi}{l_y}\right)^2 + \left(\frac{n_z \pi}{l_z}\right)^2 \quad (11.55)$$

vastaa ominaistaajuus

$$f_{n_x n_y n_z} = \frac{ck_{n_x n_y n_z}}{2\pi} = \frac{c}{2\pi} \sqrt{\left(\frac{n_x \pi}{l_x}\right)^2 + \left(\frac{n_y \pi}{l_y}\right)^2 + \left(\frac{n_z \pi}{l_z}\right)^2}. \quad (11.56)$$

Vastaaviksi ominaisfunktioiksi saadaan

$$\psi_{n_x n_y n_z}(x, y, z) = C \cos\left(\frac{n_x \pi x}{l_x}\right) \cos\left(\frac{n_y \pi y}{l_y}\right) \cos\left(\frac{n_z \pi z}{l_z}\right), \quad (11.57)$$

missä $n_x = 0, 1, 2, \dots$, $n_y = 0, 1, 2, \dots$, $n_z = 0, 1, 2, \dots$. Vakio C valitaan siten, että

$$\langle \psi_{n_x n_y n_z}, \psi_{n_x n_y n_z} \rangle = 1, \quad (11.58)$$

jolloin ominaisfunktion normi ts. sen pituus on ykkösen suuruinen. Laskemalla saadaan vakioksi

$$C_{n_x n_y n_z} = \sqrt{\frac{2^{f(n_x)+f(n_y)+f(n_z)}}{l_x l_y l_z}}, \quad (11.59)$$

missä $f(n) = 0$, jos $n = 0$ ja $f(n) = 1$, jos $n \neq 0$. Greenin funktio on tällöin

$$\hat{G}_\omega(\mathbf{x}, \mathbf{x}_0) = \frac{\sum_{n_x=0}^{\infty} \sum_{n_y=0}^{\infty} \sum_{n_z=0}^{\infty} 2^{f(n_x)+f(n_y)+f(n_z)} \cos\left(\frac{n_x \pi x_0}{l_x}\right) \cos\left(\frac{n_y \pi y_0}{l_y}\right) \cos\left(\frac{n_z \pi z_0}{l_z}\right) \cos\left(\frac{n_x \pi x}{l_x}\right) \cos\left(\frac{n_y \pi y}{l_y}\right) \cos\left(\frac{n_z \pi z}{l_z}\right)}{l_x l_y l_z \left(\left(\frac{n_x \pi}{l_x}\right)^2 + \left(\frac{n_y \pi}{l_y}\right)^2 + \left(\frac{n_z \pi}{l_z}\right)^2 - \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \right)}. \quad (11.60)$$

Edellä saadun Greenin funktion (11.60) avulla voidaan yhtälöiden (11.46) ja reunaehdon (11.47) avulla mallintaa äänikenttiä kovaseinäisissä ja näin ollen kaikuisissa suorakulmaisen särmiön muotoisissa tiloissa. Äänilähteen oletetaan olevan jollakin osalla alueen reunaan ja/tai alueen sisällä. Vaikka nämä mallit eivät vaimennuksen puutteensa ole kaikilta osin fysikaalisesti realistisia, ovat ne usein käyttökelpoisia esimerkiksi selvitetessä äänilähteen sijainnin vaikutusta tilaan muodostuvaan äänikenttään.

[253]

ESIMERKKI 11.2

[*Huoneen äänikenttä.*] Asennetaan kaksi kaksitiekaikutinta huoneen seinälle ja alimmista bassoista huolehtiva subwoofer huoneen sisätilaan. Kaiutinelementtien koot ja niiden jakotaajuudet pohjautuvat Genelecin seinälle asennettavaan AIW26 kaiuttimeen ja HTS4B subwooferiin [9]. Seinään upotetut elementit mallinnetaan mäntinä. Huoneen sisällä olevaa subwooferia taas approksimoidaan ympärisäteilevällä pallomaisella lähteellä.

Kaksitiekaikuttimien bassoelementin halkaisija on 182 mm ja diskanttielementin halkaisija on 19 mm. Diskanttielementin keskipiste on n. 142 mm bassoelementin keskipisteen yläpuolella. Kaiuttimen jakotaajuus on 3,5 kHz. Jakosuodin ohjaa jakotaajuutta pienemmät taajuudet bassoelementille ja jakotaajuiset ja sitä korkeammat taajuudet diskanttielementille. Taajuusalueen alapäässä bassoelementin toistoalueen oletetaan loppuvan taajuuteen 45 Hz. Subwooferin toistoalue on välillä 18–120 Hz.

Subwooferia approksimoidaan pallolla, jonka halkaisija on 305 mm. Pallon sisällä lähdetermin \hat{q} arvo on taajuusvasteita laskettaessa 1 taajuusvälillä 18–120 Hz ja muilla taajuuksilla 0. Vastaavasti taajuusvasteita laskettaessa asetetaan mäntien nopeuksien arvoiksi niiden kuvaamien elementtien toimintataajuuksilla 1 ja muilla taajuuksilla 0. xyz -koordinaatisto sijoitetaan huoneeseen siten, että origo on kaiuttimet sisältävän seinän vasemmassa alanurkassa ja kaiuttimet sisältävä seinä on xy -tasossa.

Resonansitaajuuudet (11.56) yksinään eivät kerro vielä kaikkea tilan sisäisestä äänikentästä. Lähteiden eli tässä tapauksessa kaiutinelementtien sijainti, koko ja muoto määräävät sen, mitkä ominaistaajuudet heräävät ja kuinka voimakkaina ne esiintyvät tilan akustisessa kentässä. Kaiutinelementin synnyttämää kenttää voidaan mallintaa yhtälön (11.46) avulla käyttäen Greenin funktiota (11.60). Oletetaan, että kaiutinelementit ovat alueen reunan osassa $\partial\Omega_2$ ja kuvataan niitä nopeusreunaehdon (11.47) avulla. Approksimoidaan elementtejä kuvaamalla ne mäntinä eli kovina ilmaa läpäisemättöminä pintoina, joiden kaikki pisteet liikkuvat samalla nopeudella. Eri elementtien pinnat voivat liikkua eri nopeuksilla. Subwoofer on alueen sisällä joukossa S eli $\hat{q}(\mathbf{x}, \omega) = 0$, kun $\mathbf{x} \notin S$. Tällöin yhtälön (11.46) on

[254]

$$\hat{p}(\mathbf{x}, t) = \int_{\partial\Omega_2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\psi_n(\mathbf{x})\psi_n(\mathbf{x}_0)}{\left(\frac{\omega}{c}\right)^2 - k_n^2} \hat{u}_p(\mathbf{x}, \omega) d\partial\Omega_{\mathbf{x}} + \int_S \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\psi_n(\mathbf{x})\psi_n(\mathbf{x}_0)}{\left(\frac{\omega}{c}\right)^2 - k_n^2} \hat{q}(\mathbf{x}, \omega) d\mathbf{x}. \quad (11.61)$$

Oletetaan, että sarjat suppenevat, jolloin saadaan likimääräinen ratkaisu korvaamalla äärettömät summat äärellisillä, kun summattavien termien määrä N valitaan riittävän suureksi. Ensimmäinen integraali muuttuu muotoon

$$\sum_{n=0}^N \frac{\int_{\partial\Omega_2} \psi_n(\mathbf{x}) \hat{u}_p(\mathbf{x}, \omega) d\partial\Omega}{\left(\frac{\omega}{c}\right)^2 - k_n^2} \psi_n(\mathbf{x}_0), \quad (11.62)$$

Tarkastellaan nyt summassa (11.62) esiintyvää pintaintegraalia. Koska seinällä on kaksi elementtiä, numeroidaan ne ja käytetään niille jatkossa indeksiä $j = 1, 2$. Kumpaakin elementtiä approksimoidaan männillä, joiden nopeus on vakio paikan suhteen alueessa $\partial\Omega_{2,j}$ eli $\hat{u}_{p,j}(\mathbf{x}, \omega) = \hat{u}_{p,j}(\omega)$. Koska elementit ovat kiekon muotoisia, kummankin elementin kohdalla integraali sieventyy muotoon

$$\begin{aligned}
 & \int_{\partial\Omega_{2,j}} \cos\left(\frac{n_x\pi x}{l_x}\right) \cos\left(\frac{n_y\pi y}{l_y}\right) \cos\left(\frac{n_z\pi z}{l_z}\right) \hat{u}_{p,j}(\mathbf{x}, \omega) d\partial\Omega \\
 &= \hat{u}_{p,j}(\omega) \int_{x_{e,j}-r_j}^{x_{e,j}+r_j} \int_{y_{e,j}-\sqrt{r_j^2-(x-x_{e,j})^2}}^{y_{e,j}+\sqrt{r_j^2-(x-x_{e,j})^2}} \cos\left(\frac{n_x\pi x}{l_x}\right) \cos\left(\frac{n_y\pi y}{l_y}\right) dy dx \\
 &= \begin{cases} 2\hat{u}_{p,j}(\omega) \cos\left(\frac{n_y\pi y_{e,j}}{l_y}\right) \int_{x_{e,j}-r_j}^{x_{e,j}+r_j} \frac{l_y}{n_y\pi} \cos\left(\frac{n_x\pi x}{l_x}\right) \sin\left(\frac{n_y\pi\sqrt{r_j^2-(x-x_{e,j})^2}}{l_y}\right) dx & n_y \neq 0, \\ 2\hat{u}_{p,j}(\omega) \int_{x_{e,j}-r_j}^{x_{e,j}+r_j} \cos\left(\frac{n_x\pi x}{l_x}\right) \sqrt{r_j^2-(x-x_{e,j})^2} dx & n_y = 0. \end{cases} \quad (11.63)
 \end{aligned}$$

Edellä $x_{e,j}$ ja $y_{e,j}$ ovat elementin j keskipisteen koordinaatit ja r_j on kyseisen elementin säde. Jos $\frac{n_y\pi y_{e,j}}{l_y} = \frac{(2m+1)\pi}{2}$ jollakin $m \in \mathbb{Z}$ eli $n_y y_{e,j} = \frac{(2m+1)l_y}{2}$, on kyseisen integraalin arvo 0.

Kahden elementin tapauksessa yhtälön (11.62) esiintyvä pintaintegraali voidaan kirjoittaa muotoon

$$\sum_{n=0}^N \frac{\sum_{j=1}^M \int_{\partial\Omega_{2,j}} \psi_n(\mathbf{x}) \hat{u}_{p,j}(\mathbf{x}, \omega) d\partial\Omega}{\left(\frac{\omega}{c}\right)^2 - k_n^2} \psi_n(\mathbf{x}_0), \quad (11.64)$$

[255]

missä M on elementtien määrä ja esiintyvät integraalit lasketaan kukin erikseen edellä esitetyllä tavalla.

Samantyyppinen tarkastelu tehdään myös tilassa olevalle lähteelle \hat{q} . Oletetaan nyt lähteen tilavuusnopeuden olevan saman koko lähdeettä kuvaavassa joukossa. Tällöin $\hat{q}(\mathbf{x}, \omega) = \hat{q}(\omega)$, kun $\mathbf{x} \in S$.

Kun subwooferia kuvataan (x_s, y_s, z_s) -keskisellä r_s -säteisellä pallolla, voidaan sen yli laskettua integraalia käsitellä samaan tapaan kuin edellä olevia integraaleja pallon suhteen eli integrointi voidaan suorittaa analyyttisesti yhden muuttujan yli ja muiden kahden yli integrointi joudutaan suorittamaan numeerisesti. Yhtälössä (11.62) esiintyvä tilavuusintegraali voidaan kirjoittaa muotoon

$$\sum_{n=0}^N \frac{\int_S \psi_n(\mathbf{x}) \hat{q}(\omega) d\mathbf{x}}{\left(\frac{\omega}{c}\right)^2 - k_n^2} \psi_n(\mathbf{x}_0), \quad (11.65)$$

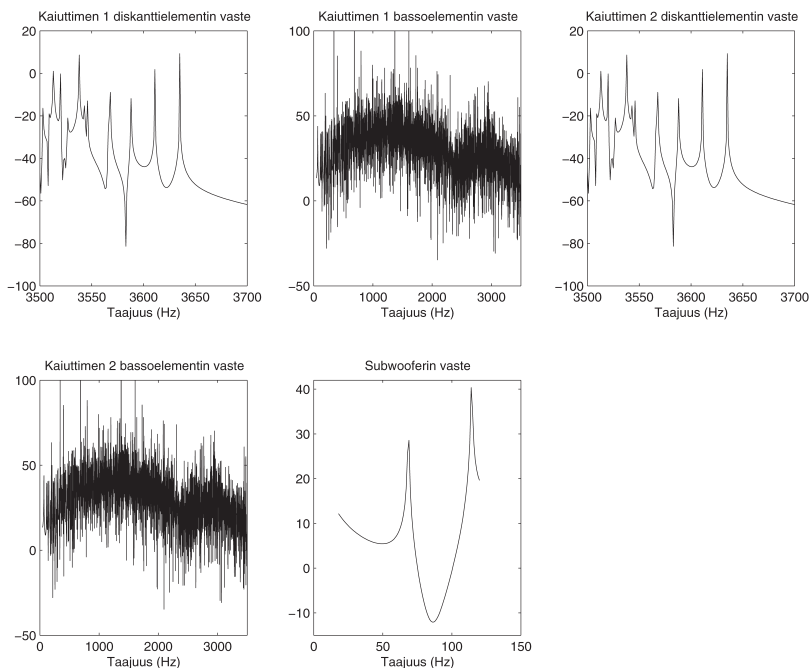
Koska ominaisarvojen (11.55) numerointi suuruusjärjestyksessä on hankalaa, esitetään summaus $\sum_{n=0}^N$ yhtälöissä (11.62) ja (11.64) indeksien n_x , n_y ja n_z avulla muodossa $\sum_{n_x=0}^{N_x} \sum_{n_y=0}^{N_y} \sum_{n_z=0}^{N_z}$, missä rajat N_x , N_y ja N_z valitaan tarpeeksi suuriksi.

Edellä olevien kehittämien pohjalta numeerisen laskennan toteuttaminen Matlab-ohjelmalla on kohtuullisen yksinkertaista. Numeerisena

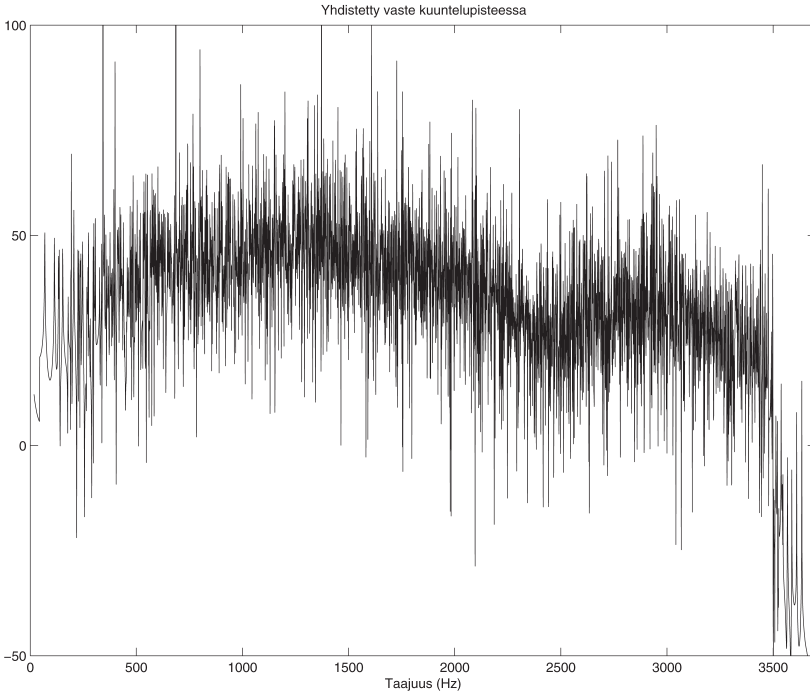
esimerkkinä lasketaan vasteet huoneessa, jossa $l_x = 3$ m, $l_y = 2,5$ m ja $l_z = 5$ m. Seinään upotetuista kaiuttimista ensimmäisen bassoelementin keskipiste on (1 m, 1 m, 0 m) ja toisen keskipiste on (2 m, 1 m, 0 m). Subwooferia kuvaavan pallon keskipiste on (1,5 m, 0,5 m, 1 m). Kuuntelupisteen sijainti on (1,5 m, 1,25 m, 2,5 m). Vasteet laskettiin taajuusalueella (0,3700] Hz. Laskennassa käytettiin summausrajoja $N_x = 40$, $N_y = 40$ ja $N_z = 40$.

Kuvassa 11.4 näkyvät eri äänilähteiden aiheuttamat vasteet kuuntelupisteessä ja kuvassa 11.5 vasteiden summa kuuntelupisteessämme. Kuvista havaitaan, että kyseessä on todella kaikuinen tila, esimerkiksi sileäpintaisilla laatoilla kauttaaltaan laatoitettu betonirunkoinen huone.

[256]



Kuva 11.4. Yksittäisten elementtien vasteet.



Kuva 11.5. Yhteenlaskettu vaste kaikista lähteistä.

[257]

11.8 Lopuksi

Tarkasteltiin lineaarisen aaltoyhtälön muokkaamista Helmholtzin yhtälöksi ja sen ratkaisua erilaisilla reunaehdoilla. Ratkaisun saamiseksi on tunnettava Greenin funktio joko ominaisfunktiokehityksen avulla tai muuten. Ominaisfunktiokehitys on usein olemassa, mutta ominaisfunktiokehityksen lausekkeita ei tunneta kuin joissakin geometrialtaan yksinkertaisissa tiloissa, kuten esimerkkinä tarkastellussa huoneessa. Käytännössä akustinen suunnittelu perustuu numeeristen menetelmien käyttöön. Tavallisia menetelmiä ovat äärellisten elementtien menetelmä (FEM) ja reunaelementtimenetelmä (BEM), jotka soveltuvat matalille taajuuksille. Korkeammilla taajuuksilla säteenseuranta- tai kovalähdemenetelmä tuottavat helpommin tuloksia. Näilläkin menetelmillä on omat rajoituksensa.

11.9 Harjoitustehtäviä

1. Osoita, että Fourier'n muunnos toteuttaa ehdot (11.14) ja (11.15) kun funktiot ovat riittävän säännöllisiä.
2. Johda Greenin kaavat Gaussin lauseen avulla.
3. Ratkaise Helmholtzin yhtälö. (Käy siis tarkasti ja yksityiskoh-
taisesti ratkaisun vaiheet lävitse. Kirjoita kaikki välivaiheet
näkyviin. Millaisia oletuksia tarvitaan, jotta päättely alkaisi
olla matemaattisesti pätevää?)

Kirjallisuutta

- [1] A. P. Dowling and J. E. Ffowcs Williams. *Sound and sources of sound*. Ellis Horwood Limited, 1983.
- [2] M. D. Greenberg. *Advanced engineering mathematics*. Prentice Hall, 1988.
- [3] G. James. *Advanced Modern Engineering Mathematics*. Prentice Hall, 2nd edition, 1999.
- [4] M. Karjalainen, V. Ikonen, P. Antsalu, P. Maijala, L. Savioja, A. Suutala, and S. Pohjolainen. Comparison of numerical simulation models and measured low-frequency behavior of loudspeaker enclosures. *Journal of Audio Engineering Society*, 49(12):1148–1166, 2001.
- [5] P. M. Morse and U. K. Ingard. *Theoretical acoustics*. Princeton University Press, Princeton, NJ, 2nd edition, 1986.
- [6] A. D. Pierce. *Acoustics, an introduction to its physical principles and applications*. Acoustical Society of America, 1989.
- [7] T. Rankonen. Akustisten materiaaliominaisuuksien mittaus ja mallinnus Diplomityö, TTKK, 2002.
- [8] A. Suutala. Matemaattinen mallintaminen akustiikassa. Diplomityö, TTKK, 1998.
- [9] www.genelec.com. Kyseisten mallien datalehdet löytyvät osoitteesta <http://www.genelec.fi/ht/tuki/esitteet.php>.

12

Harjoitusesimerkkejä

1. Lepsun jousen liikkeet

Tutki jousi-massa-värähtelijää, jossa jousivakio muuttuu asteittain siten, että jousi on toisesta päästään puolta löysempi. Kuvaile tällaisen ”lerpahtaneen” värähtelijän toimintaa.

2. Heilurimuunnelmia

[260]

- a) Mallinna seuraavan epätavallisen heilurin toimintaa. Vaakasuoraan sileään tankoon on kiinnitetty hahlo, joka liukuu kitkatta tankoa pitkin. Hahloon on kiinnitetty lanka ja sen päähän metallipallo. Tutki heilurin liikettä, kun sen annetaan heilua tangon kautta kulkevassa tasossa. Miten malli muuttuu, jos hahlon ja tangon välillä oletetaan olevan pieni kitka?
- b) Mitä tapahtuu jos tanko on kimmoisa pajukeppi ja lanka on solmittu kiinni sen keskelle?
- c) Tässä esimerkissä kiinteään pisteeseen on kiinnitetty lanka ja siihen metallipallo. Lanka osuu pystyasennossa esteeseen, joka on vaakasuorassa asennossa oleva rulla. Tällöin heilahduksen toisella puoliskolla lanka kiertyy rullan ympäri.

3. Muurahaiset ja hyönteiskarkote

Putkimaisen 10 m pitkän käytävän toisesta päästä putken sisälle virtaa muurahaisia nopeudella 50 grammaa/tunti. Muurahaisten liikehdintää säätelee kaksi lakia. Diffuusiolaki, jonka mukaan muurahaiset suuntaavat tiheämmästä tungoksesta harvemman suuntaan, nopeuden ollessa verrannollinen tiheyden gradienttiin. Toisen lain muodostaa putken toiseen päähän asetettu hyönteiskarkote. Hyönteiset kammoavat tuoksua, ja karkottava vaikutus pienenee etäisyyden funktiona lineaarisesti. Miten voitaisiin kuvata muurahaisten sijaintia putkessa?

4. Vaurioitumislogiikka

Syövyttävää kemikaalia sisältävä astia voi vaurioitua kahdella tavalla. Astian sisäpuolelle on kiinnitetty pinnoitekalvo, joka voi syöpyä puhki (vaurio A) tai astian vaipan juotosliitos voi heiketä ulkoisista syistä (vaurio B). Yhden viikon toimintajakson aikana näiden tapahtumien todennäköisyydet ovat $P(A) = 0,02$, $P(B) = 0,01$. Vauriot tapahtuvat toisistaan riippumatta. Jos molemmat vauriot ovat tapahtuneet (A ja B) astia alkaa vuotaa (vaurio C). Tapahtuman C todennäköisyys tässä tilanteessa on 0.05 yhden viikon aikana. Kuvaa tilan kehitystä 500 viikon käyttöiän aikana.

5. Vuotava astia heilurissa

Kimmoisan kumimaisesta aineesta tehdyn köyden (pituus 5 m) päässä riippuu 200 litran vetoinen astia. Astia on täytetty viskoosilla nesteellä (tiheys 1,0) joka valuu säiliöstä ulos nopeudella 0,5 litraa sekunnissa. Astian massa on 10 kg. Kuvaile systeemin pystysuuntaista heilahtelua.

6. Autokannan ikä

Tarkastellaan Suomen autokannan ikäjakaumaa ja sen kehitystä. Olkoon $x(k, i)$ vuoden i alussa oleva k -vuotiaiden autojen lukumäärä ja $X(i)$ ikäjakaumavektori $(x(0, i), x(1, i), x(2, i), \dots, x(20, i))$. Vuoden aikana k vuotta täyttäneistä autoista poistuu osuus $b(k)$ erilaisten vaurioiden takia. Oletetaan, että kaikki 20 vuotta täyttäneet poistuvat vuoden aikana. Vuonna i käyttöön otettavien uusien autojen määrä olkoon $u(i)$. Laadi autokannan ikäjakauman muutosta kuvaava laskentamalli. Selvitä, millä tavalla mallilla voitaisiin seurata ja ennustaa autojen keski-ikä kehitymistä.

[261]

7. Meteori

Meteori putoaa ilmakehässä kohtisuoraan 1 000 km:n korkeudesta, ja sen alkunopeus on 200 m/s. Meteorin massa on aluksi 10 000 kg, ja se menettää massaa pudotessaan ilmakehän kitkan vaikutuksesta 60 kg sekunnissa. Ilmakehän vastus kasvaa tasaisesti ilman tiheyden kasvaessa. Oletetaan, että vastuskerroin on 10-kertainen maanpinnalla lähtötasoon nähden.

8. Solun linkaari

Biotekniseen prosessiin osallistuvalla pieneliöllä on neljä peräkkäistä kehitysvaihetta: A, B, C, D sekä kuolemaa merkitsevä lopputila E. Yhden

vuorokauden aikana solu siirtyy vaiheesta A, B, ja C seuraavaan todennäköisyydellä 0,1. Vaihe B on kriittinen ja siihen tullut solu kuolee vuorokausijakson aikana todennäköisyydellä 0,5. Vaiheeseen D kehittynyt solu kuolee samoin todennäköisyydellä 0,5. Alussa soluja on 10 000 yksikköä, kaikki vaiheissa A. Kuvaa eri vaiheissa olevien osuuden kehitystä.

9. Korroosiotulppa

Nestesäiliössä (sisältö 2 000 kg) oleva liuenneen hapen määrä kasvaa tasan ajan mukana. Tämä happi aiheuttaa säiliön seinämässä korroosio-ilmion, säiliön seinämään alkaa muodostua hapettunut kerros. Reaktion nopeus on suoraan verrannollinen nesteen happipitoisuuteen. Toisaalta syntyvä hapettunut kerros ”suojaa” metallia, reaktion nopeus alkaa hidastua (tietystä alku-nopeudesta) korroosiokerroksen kasvaessa. Tehtävänä on kuvata korroosiokerroksen paksuuden $Y(t)$ muutosta.

10. Styroxmuru uima-altaassa

[262] Ämpärillinen styroxmuruja heitetään tyynen uima-altaan pintaan. Tehtävänä on luonnostella matemaattinen malli, joka selittää murujen leviämiskuviota ajan kuluessa. Miten selittyy se, että paikallinen kasa ennen pitkää leviää laajalle? Muuta seuraavaksi tehtävää niin, että murut heitetään hiljalleen virtaavaan jokeen.

11. Ketju

Maahan on laskettu pitkä ketju. Sen toista päätä nostetaan maasta, jolloin suurempi osa ketjusta vähitellen irtoaa alustasta. Mallinna ketjun muoto. Pyri kuvaamaan myös irtoamiskohdan eteneminen.

12. Vesi ja pressukat

Ulkoilmassa on ympyrän muotoinen kangaskatos, reunoistaan kiinnitettyinä, säde 10 metriä. Sateen jälkeen katolle on kerääntynyt 1 000 litraa vettä. Millaisilla yhtälöillä kalvon muotoa voisi kuvata?

Tässä yksiulotteinen vastine. Tasalevyinen (20 cm) nauha on päistään kiinnitetty siten, että se riippuu kahden pystysuoran lasiseinän välissä. Nauhalle kaadetaan liukkaita pieniä lasihelmiä, jolloin se painuu notkolle. Oletetaan, että helmien välinen kitka on niin pieni, että niiden yläpinta asettuu tasoksi. Johda nauhan muotoa kuvaava yhtälö. Nauhan pituus on 5 m, kiinnityskohtien väli on 4,4 m ja nauha oletetaan venymättömäksi.

13. Patjan tamppaus

Pölyistä patjaa puhdistetaan lyömällä sitä ulkosalla vaakasuoralla telineellä metrin mittaisella suoralla esineellä. Selitä ja kuvaa erilaisten lyöntivälineiden dynamiikkaa: suora harjanvarsi, pajukeppi, jousiteräspiiska, köysi, kumiletku, lyijyvaippakaapeli, ketju. Pohdittavana on erityisesti se, millä tavalla yksiulotteisen esineen ”materiaalin” erilaiset tyypit tulisi mallissa kuvata.

14. Lämmönsiirto tuntemattoman levyn läpi

Levyn sisäosa on tuntematonta materiaalia. Mitataan lämpövuoto syöttämällä erilaisia ”lämmitysohjelmia” ja mittaamalla seinän takaa läpi mennyt lämpö. Voidaanko sisäosan materiaaliominaisuuksia näin paljastaa (johdanto inversioproblemaan)? Entä jos tuntematon sisäosa korvataan yksinkertaisemmalla oletuksella: Seinämän sisällä on tuntemattomassa kohdassa eristekerros ja seinämän ja/tai eristeen k -arvo on tuntematon?

15. Lonksuva ratas

Kymmenkulmion muotoisen rattaan särmän pituus on 10 cm. Ratas lepää 50 cm:n levyisen vaakasuoran hyllyn keskellä. Rattaaseen kohdistuu satunnaisia sysäyksiä (tuuli, mekaanisia töytäisyjä jne.), jotka saavat rattaan lonksahtelemaan paikaltaan kohtisuoraan kohti hyllyn reunaa. Yhden minuutin aikana mahdolliset tapahtumat ja niiden todennäköisyydet ovat

1 askel eteen	tn 0,25	1 askel taakse	tn 0,20
2 askelta eteen	tn 0,06	2 askelta taakse	tn 0,04
0 askelta	tn 0,45		

Kuvaile sopivalla mallilla rattaan liikkeitä ja hyllyllä pysymistä 10 minuutin mittaisen jakson aikana.

16. Torakkaepidemia

Neljän omakotitalon poistovesiputket kytkeytyvät viemäriverkkoon siten, että muodostuu nelikulmiorakenne ABCD. Viemäriverkko mahdollistaa ikävän haittaötökän leviämisen talosta toiseen, nelikulmion sivuja pitkin. Ötökät vaeltavat satunnaisesti siten, että yhden vuorokauden kuluessa 4 prosenttia kussakin solmussa olevista mönkijöistä siirtyy naapureihin, 2 prosenttia kumpaankin suuntaan. Aloitushetkellä vain A-solmussa on 1 000 yksilön suuruinen esiintymä. Kuvaa populaation leviämistä 30 päivän jaksolla.

17. Huokoinen seinämä säiliössä

Kuution muotoisessa (särmä 1 metri) nestesäiliössä on huokoinen seinä, jonka läpi neste tihkuu toiseen samankokoiseen tilaan. Tihkuvirtauksen voimakkuus on suoraan verrannollinen nestepintojen korkeuseroon seinämän eri puolilla. Jälkimmäisestä astiasta haihtuu lisäksi nestettä 150 g/tunti. Kuvaile nestepintojen muutosta.

18. Kondensaattori ja kumilanka

Levykondensaattorin vaakasuorien levyjen pinta-ala on 10 cm^2 ja välimatka 5 mm. Ylempi levy on tuettu kiinteästi, alemmassa riippuu 50 g:n punnus. Tutki, voiko punnus kellua kondensaattorin varauksen synnyttämän Coulombisen voiman varassa. Selvitä, miten systeemi käyttäytyy eri suuruisilla varauksilla. Entä jos alempi levy on kiinteä ja ylempi riippuu kumilangan varassa?

19. Jätevedenpuhdistamo

[264]

Biologiseen jätevedenpuhdistamoon valuu tiettyä vahingollista jätettä nopeudella 0,6 kg tunnissa, jätteen massa $= y(t)$. Valuma-altaassa on mikrobikasvusto, massa $x(t)$, joka hävittää jätettä käyttämällä sitä ravinteanaan. Tässä prosessissa y :n määrä vähenee nopeudella $0,01x(t)y(t)$ ja mikrobikasvuston määrä x kasvaa $0,008x(t)y(t)$ tunnissa.

Mikrobipopulaatio vähenee myös itsestään kuoleamisen ja virtauksen aiheuttaman poishuuhtoutumisen ansiosta. Vähenemisnopeus on 20 prosenttia populaation massasta tunnissa. Aloitushetkellä y :n määrä on 40 kg ja mikrobipopulaation massa on 0,5 kg. Mallinna systeemin toiminta ja simuloi sen käyttäytymistä.

20. Saostuminen

Järven syvyys on 10 m ja sen veteen on liettyneenä hyvin hienojakoinen saviaines tasaisesti jakautuneena 4 g/litra. Savihiukkaset alkavat valua kohti pohjaa, hiukkasten vajoamisnopeus riippuu lietteen tiheydestä. Vapaassa vedessä hiukkanen vajoaa keskimäärin 0,1 cm/s. Lietteen sakeuden kasvaessa hiukkasten nopeus alenee. Tutki saostumisprosessia

- olettaen lineaarisesti pienenevä vajoamisnopeus
- kokeilemalla harkitsemaasi epälineaarista mallia.

21. Lattialämmitys

Lattialaatan paksuus on 10 cm ja sen alapintaan on kiinnitetty ohut vastuskalvo lattialämmityksen järjestämiseksi. Vastus kytkeytyy päälle, kun laatan pinnan lämpötila putoaa 16 asteeseen, ja vastus kytkeytyy pois päältä, kun pintalämpötila on noussut 21 asteeseen. Vastuksen antama lämmitysteho on 50 W/m^2 . Tee sopivat oletukset lämmönjohtavuudesta, reunaehdoista jne., ja kuvaa järjestelmän toimintaa.

22. Huojuva taakka nosturissa

Nosturin vaijerin pituus on alussa 40 m ja siinä riippuu 200 kg:n taakka. Nosturi kelaa vaijeria sisään nopeudella 0,4 m/s. Kuvaa taakan huojuntaa olettamalla heilahduksien tapahtuvan 2D-tasossa.

23. Lautan stabiointi

Kanavassa, jonka leveys on 20 m, kelluu lautta, jonka leveys on 10 m ja massa 10 tn. Lautan vaakasuuntaisten liikkeiden stabioloimiseksi kanavan laidoista ponttonin keskikohdan korkeudelle molemmille puolille on kiinnitetty 6 metrin pituinen ketju ja ketjun keskikohtaan betonipaino. Laadi systeemin toimintaa kuvaava malli ja tutki sen ominaisuuksia, kun betonipainojen massa on 200 kg tai 500 kg. Tutki myös, miten veden vaimennuksen huomion ottaminen muuttaisi mallia.

[265]

24. Marakatti ja bambu

Sirkusakrobaatti kannattelee kämmenellään 5 metrin mittaista kevyttä jäykkää ruokoa, jonka päässä keikkuu 3 kg painava marakatti. Pellen tarkoituksena on pitää marakatti tasapainossa liikuttelemalla kepin alapäätä sopivasti. Johda akrobaatin ongelmaa koskeva systeemimalli. Oleta liikkeen tapahtuvan tasossa.

25. Tankit ja nestetasot

Kemiallisessa prosessilaitoksessa tapahtuvassa nestekierrossa valvotaan kahden väliputkella yhdistetyn tankin nestetasoja ja niiden muutoksia. Johda tilannetta kuvaava systeemimalli. Tutki, syntyykö systeemiin tasapainotila (vakionestepinnat). Miten systeemi reagoi, jos poikkeamien sattuessa sisään menevää virtausta $q_1 = u(t)$ ohjataan tankista 2 ulos menevän virtauksen $q_2 = v(t)$ muutoksia seuraten kaavion $u(t) = u_0 - a(v(t) - v_0)$ mukaisesti?

26. Liukuva holkki ja tanko

Pneumaattisen sylinterin poikkipinnan ala on 20 cm^2 . Vaakasuurassa olevan männän massa on 4 kg ja siihen liittyy palauttajajousi, jonka jousivakio on $k = 20 \text{ N/m}$. Männän varsi ulottuu sylinteristä ulos ja siihen kiinnittyy massiivinen liukuva holkki, jonka massa on 6 kg . Akselin ja holkin välinen (viskoosikitkan) kitkakerroin on $m = 0,8 \text{ Ns/m}$. Sylinteriin työntävä ilman tilavuusvirta on muotoa $q(t) = at + b \sin(\omega t)$. Johda systeemin toimintaa kuvaava malli. Miten malli muuttuu, jos holkin kitka oletetaan coulombiseksi, voimakkuudeltaan 2 N ?

27. Reaktorin kinetiikka

Kemialliset yhdisteet A ja B reagoivat keskenään kaavion $A + B \rightarrow AB$ mukaisesti. Reaktionopeutta kuvaava kineettinen vakio $k = 0,3/\text{h mol}$. Yhdiste A on haihtuvaa laatua ja sitä häviää reaktioastiasta puoliintumisaajan ollessa 2 h . Yhdistettä B lisätään reaktoriin $0,2 \text{ mol/h}$. Kuva reaktorisysteemin toimintaa, kun alkutilassa yhdisteen A määrä on 10 mol ja B:n määrä 2 mol . Kolmen tankin ja väliputkien muodostamassa systeemissä tankissa 1 on $1\,000$ litraa väkevää happoa, joka alkaa valua tyhjiin tankkiin 2. Tankissa 3 on $1\,500$ litraa puhdasta vettä, ja sitä aletaan päästää samanaikaisesti tankkiin 2 väliventtiilin kautta. Tankissa 2 voidaan katsoa tapahtuvan nopea sekoittuminen. Johda nestepintojen tasoa kuvaava systeemimalli ja seuraa myös hapon väkevyyden muutosta tankeissa 2 ja 3.

[266]

28. Asuintalon lämpöhukka

Asuintalo koostuu kahdesta huoneesta. Huoneessa 1 on lämmityselementti. Siihen tulevaa sähkötehoa ohjataan huoneessa 2 olevan tuntoelimen mukaan periaatteella $W(t) = 200 - 20(u(t) - 10)$ (wattia). Yhden viikon aikana ulkolämpötilan vuorokausikeskiarvo nousee tasaisesti 5:sta 10 asteeseen, vuorokausivaihtelun amplitudi on 10 astetta. Johda malli talon molempien huoneiden lämpötilojen kehitykselle. Huoneiden lämpökapasiteetit C_1 , C_2 , ulkoseinän lämpövastus R ja huoneiden välisen seinän lämpövastus R_1 ovat tarvittavia vakioita, joille tulisi etsiä arvot rakennusalan kirjallisuudesta.

29. Tanko ja naru

Jäykkä, kevyt, 2 metriä pitkä vipu on akseloitu seinään. Vivun päähän on kiinnitetty 4 metriä pitkä köysi. Köyden vapaata päätä pyritään pitämään tasaisella kireydellä ja sitä liikutetaan pystysuoran liikkeen ollessa $u = u(t)$.

Johda systeemin reaktio eri suuruisille taajuuksille. Kokeile myös useamman sinivärähtelyn yhdistelmää.

30. *Sumea heiluri*

Tavallinen jousi-massa-yhdistelmä muodostaa heilurin, jonka fysikaalinen malli on tunnettu. Oletetaan, että jousivakio tunnetaan vain epämääräisesti, samoin heilurin vaimennuksen aiheuttama väliaine. Nämä kaksi fysikaalista parametria tiedetään vain sumeina lukuina. Pohdi, mitä voitaisiin kertoa heilurin liikkeistä.

31. *Digitaaliset hyönteiset*

Luodaan kaksi populaatiota piste-olioita, jotka liikkuvat tasossa kahden erilaisen motorisen profiilin mukaisesti. Populaatiot kuvaavat kahden eri hyönteislajin poikasia, jotka pieninä näyttäytyvät liikkuvina mustina pisteinä. Tehtävänä on luoda systeemi, joka tunnistaa ja luokittelee hyönteislajin sen liikuntatavan perusteella. Sen tulisi erottaa torakan pojat ja kotimuurahaiset toisistaan. Alkuosa muodostaa itsenäisen tehtävän. Miten muodostaa simulointitarkoitukseen kaksi erilaista liikkumisen tavaltaan poikkeavaa hyönteislajia?

Hakemisto

A

aaltoyhtälö
dipolilähde 244
lineaarinen 240
lähdetermi 243
monopolilähde 243
aikakompleksisuus 72
funktio 71
akustinen pintaimpedanssi 246
algoritmi 22
 ahne 63
 backpropagation- 118
 PageRank- 96
alue 240
anturi 22
approksimointi 85
avaruus
 aika- 93
 konfiguraatio- 166
 L_2 - 241
 päätös- 53
 tila- 93, 166

B

bias-termi 116
bioreaktori 38
Boylen laki 199

D

data-analyysi 24
data-mining 19
determinismi 161
diagnostiikka 31
dimensioanalyysi
 dimensiokuvaus 148
 dimensiomatriisi 149
 dimensioton luku 150
 perussuurejärjestelmä 148
disjunkttiivinen ehto 54
dynaaminen järjestelmä 21

E

Einsteinin summasääntö 189
ekologia 18
ekonometria 19
ekstrapolointi 77
elektronilitografia 29
elinkaari 261
elintarviketeollisuus 26
epidemia 263
erotuskaavio 81
erotososamäärä 79
erotososamääräkaavio 80
etsaus 29
Eulerin koordinaatti 190

F

Fickin laki 209
finanssi-instrumentti 38
fluidi 239
 homogeeninen 240
 ideaalinen 239
Fourier'n muunnos 244
funktio
 aktivaatio- 116
 Greenin 249
 jäsenyys- (sumean logiikka) 134
 kohde- 53
 rajoite- 53
 sigmoidi- 116

G

Gaussin lause 247
graafi 62
 di- 63
 painotettu 63
 suunnattu 63
 yhtenäinen 63
Greenin funktio
 Helmholtzin yhtälön ratkaisu 251
 sarjakehitelmä 250
Greenin kaavat 248

GUHA-tiedonlouhinta
 epästandardi kvanttori 109
 havaintopredikaattikieli 109
 KDD 107

H

hahmontunnistus 120
 hakukone 19
 heiluri 260, 267
 Helmholtzin
 homogeeninen yhtälö 247
 vapaa energia 195
 yhtälö 245
 Hooken laki 201
 hyönteiskarkote 260
 häiriökehitelämä 227

I

ikäjakauma 261
 innovaatio 25
 instrumentointi 22
 interpolointi 77
 itseorganisoituva kartta 115, 119
 iänmääritys 19

J

joukko
 invariantti 172
 käypä 53
 moni- 63
 sumea (osa-) 134
 jännitystensori 194
 jäähtyminen 35

K

kaari 62
 kaskadisuodatus 36
 kasvukerroin 99
 kausaalinen 161
 kenttä
 suunta- 168
 vektori- 169
 ketjun muoto 262
 kiinteä kustannus 56
 kilpailuoppiminen 118
 kinetiikka 266
 kiteytys 28
 kohde
 funktio 53
 solmu 65
 koordinaatti
 avaruus- 190
 Eulerin 190
 Lagrangen 190

materiaali- 190
 korrosio 262
 kuvankäsittely 37
 kysyntä 65

L

L_2 -avaruus
 sisätulo 241
 Lagrangen
 interpolaatiokaava 78
 interpolointipolynomi 78
 koordinaatti 190
 laki
 Boylen 199
 Fickin 209
 Hooken 201
 Laplacen operaattori 190, 240
 ominaisarvotehtävä 247
 lasin valmistus 35
 lattialämmitys 265
 liikenteen tasapainoittaminen 44
 käyttäjän tasapainotila 47
 Wardropin tasapainotila 46
 liittotila 230
 likviditeetti 38
 linearisointi 173
 logistiikka 19
 lokaalisti reagoiva reuna 245
 luokka
 NP 72
 P 72
 lämmönsiirto 263
 lämmönvaihtokerroin 204

M

malli
 eksponentiaalinen 86
 kvadraattinen 86
 Leslien väestönkasvu- 95
 liikenne- 29
 lineaarinen 85
 minimikustannusvirtaus- 65
 monikomponentti- 21
 potenssifunktio- 86
 verkosto- 27
 Markovin ketju 90, 93
 absorboiva tila 92
 palautuva tila 92
 stabiili 92
 Markovin ominaisuus 93
 materiaali
 derivaatta 191
 koordinaatti 190
 tutkimus 23

matriisi
 dimensio- 149
 Googlen 97
 insidensi- 67
 siirtymä- 90
 solmu-kaari- 67
 unimodulaarinen 61
 vierus- 65

menetelmä
 moniskaala- 231
 pienimmän neliösumman 85

micro array 37
 mikrobipopulaatio 33
 mittaustekniikka 22
 monikappalemekaniikka 30
 monikerrosperseptio 115, 117
 muunnoskerroin 69
 määrittelyalue 240

N
 nanoteknologia 29
 naru 266
 Newtonin interpolaatiokaava 79
 NP-täydellinen 72
 NP-vaikea 72

O
 ohjattu oppiminen 115
 ongelma
 kauppamatkustajan 57
 kohdistus- 68
 kuljetus- 60
 reppu- 56
 toimipisteen sijainti- 59
 uhkapelurin vararikko- 95

operaatiotutkimus 19
 operaattori
 Laplacen 190, 240
 lineaarinen 247

optimointi
 binääri 53
 BIP 53
 epälineaarinen sekaluku- 53
 IP 53
 lineaarinen sekaluku- 53
 MILP 53
 MINLP 53
 muodon 23

optinen kuitu 28
 optio 19, 38
 oskillaatio 38

P
 pehmeät menetelmät
 geneettiset algoritmit 105
 kaaosteoria 105
 neurolaskenta 105
 probabilistinen päättely 105
 sumean logiikka 105
 tiedonlouhinta 105

piiri 63
 pohjavesi 33
 polku 62
 virtaus 45

polymeeri 27
 potentiaali 180

problem
 assignment 68
 knapsack 56
 transportation 60
 traveling salesman 57
 TSP 57

prosessi
 laskenta- 98
 Poissonin 99
 riippumattomien lisäysten 98
 stationaaristen lisäysten 99
 stokastinen 93
 säätö 24
 tehdas 27

puu 63
 diagrammi 90
 kuivaus 36
 minimaalinen virittävä 63
 virittävä 63

päätös
 avaruus 53
 teoria 19

R
 rajakerros 231
 ratkaisu
 aaltorintama- 235
 käypä 53
 optimi 53
 similariteetti- 235

reaktori 266
 reunaehto
 Dirichlet'n 242, 245
 Neumannin 242
 Neumannin epähomogeeninen 242, 245
 Neumannin homogeeninen 245

riski 38
 ennuste 38
 teoria 19

S

saostuminen 264
 satunnaiskävely 94
 sedimentoituminen 37
 simulointi 11
 singulaarinen häiriö 231
 skenaario 38
 slurry 31, 37
 solmu 62
 kauttakulku- 65
 kohde- 65
 lähde- 65
 solmu-kaari-matriisi 67
 solu 261
 sosiaalitieteet 19
 splini 23
 kuutio 83
 luonnollinen 84
 pakotettu 84
 Stokesin yhtälö 199
 sumean logiikka
 BL-algebra 133
 BL-logiikka 133
 Gödel-logiikka 133
 JOS-NIIN-päätelysääntö 136
 jäsenyysfunktio 134
 Lukasiewicz-logiikka 133
 sumea (osa)joukko 134
 sumea päätelyjärjestelmä 136
 sumea samuus 135
 sumeat joukot 132
 sääntökanta 138
 tulologiikka 133
 synapsi 116
 systeemi 40
 diskreetti 40
 Hamiltonin 181
 identifiointi 123
 jatkuva 42
 stokastinen 40
 tasapainotila 40
 säilymlaki 181
 Clausiuksen ja Duhemin epä-
 yhtälö 195
 energian 194
 kulmaliikemäärän 194
 liikemäärän 193, 240
 massan 193, 240
 termodynamiikan II pääsääntö 195
 virtauksen 65

T

tanko 266
 tarjonta 65
 tasapainopiste 172
 asymptoottisesti stabiili 172
 hyperbolinen 173
 tasapainovektori 92
 teknologiasiirto 24
 tekstiiliteollisuus 32
 teollisuusmatematiikka 24
 teoria
 interpolaatio- 23
 kaaos- 105
 peli- 19
 päättös- 19
 riski- 19
 tietoliikenne 22
 tila
 avaruus 93, 166
 diagrammi 90
 vektori 91
 yhtälö 199
 tomografia 22
 tuotannonohjaus 24

U

universaali approksimaattori 121

V

validointi 11, 13
 Vandermonden determinantti 78
 vauriologiikka 261
 venymätensori 197
 verkko 65
 hybridi- 42
 monikerros- 117
 neuro- 115
 rekurrentti 116
 säteittäisiin kantafunktioihin perustu-
 va 118
 yleistetty 68
 videosignaali 32
 virtaus 65
 linkki- 46
 polku- 45
 putkisto- 31
 visualisointi 24
 väliaika (Poissonin prosessi) 100

Y

yhtälö

Helmholtzin 245

Helmholtzin homogeeninen 247

lämpö- 203

Stokesin 199

tilan- 199

yleistetty

kaari 69

verkko 68

ympäristönsuojelu 33

Ä

äänen nopeus 240

äänilähde 243