Studio 2b: Linjär algebra i $\mathbb{R}^n$: projektion och minsta-kvadratmetoden.

Analys och Linjär Algebra, del C, K1/Kf1/Bt1, vt09

23 januari 2009

1 Projektion

Låt kolonnvektorerna a, b, c och u i $\mathbb{R}^4$ och matriserna A och B vara givna av

```
a=[1; 2; 3; 4];
b=[4; 3; 2; 1];
c=2*a-3*b;
u=[1;1;1;0];
A=[a b c];
B=[a b];
```

Vektorn $\boldsymbol{u}$ tillhör inte mängden $V = \text{Span}\{\boldsymbol{a},\boldsymbol{b},\boldsymbol{c}\}$. Vi skall beräkna projektionen $\hat{\boldsymbol{u}}$ av $\boldsymbol{u}$ på V, det vill säga den vektor i V som ligger närmast $\boldsymbol{u}$. Mängden $\{\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}\}$ är linjärt oberoende men $\{\boldsymbol{a},\boldsymbol{b},\boldsymbol{c}\}$ är linjärt beroende, det vill säga $\{\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}\}$ är en bas för V och $V = \text{Span}\{\boldsymbol{a},\boldsymbol{b},\boldsymbol{c}\} = \text{Span}\{\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}\}$. Vektorn $\hat{\boldsymbol{u}}$ tillhör V, och är alltså en linjär kombination av $\boldsymbol{a}$ och $\boldsymbol{b}$, det vill säga

$$\hat{\boldsymbol{u}} = B\boldsymbol{x} = x_1\boldsymbol{a} + x_2\boldsymbol{b}.$$

Vi vill bestämma koefficienterna x_1 och x_2 så att residualen $\boldsymbol{u} - \hat{\boldsymbol{u}}$ är ortogonal mot V. Detta innebär att $(\boldsymbol{u} - \hat{\boldsymbol{u}}) \cdot \boldsymbol{v} = 0$ för alla $\boldsymbol{v}$ i V.

Eftersom $\boldsymbol{a}$ och $\boldsymbol{b}$ är en bas för V, är det tillräckligt att välja $\boldsymbol{v} = \boldsymbol{a}$ och $\boldsymbol{v} = \boldsymbol{b}$.

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{u} - \hat{\boldsymbol{u}}) \cdot \boldsymbol{a} = 0\\ (\boldsymbol{u} - \hat{\boldsymbol{u}}) \cdot \boldsymbol{b} = 0\end{aligned}$$

eller ekvivalent

$$\hat{\boldsymbol{u}} \cdot \boldsymbol{a} = \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{a}$$
$$\hat{\boldsymbol{u}} \cdot \boldsymbol{b} = \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{b}.$$

Med $\hat{\boldsymbol{u}} = x_1\boldsymbol{a} + x_2\boldsymbol{b}$ får vi följande system med två ekvationer.

$$\begin{aligned} x_1(\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{a}) + x_2(\boldsymbol{b} \cdot \boldsymbol{a}) &= \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{a}; \\ x_1(\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b}) + x_2(\boldsymbol{b} \cdot \boldsymbol{b}) &= \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{b}. \end{aligned} \tag{1}$$

Uppgifter

Använd de givna vektorerna $\boldsymbol{a}$, $\boldsymbol{b}$, $\boldsymbol{c}$ och $\boldsymbol{u}$ och matriserna A och B till följande beräkningar.

1. Visa att vektorn $\boldsymbol{u}$ inte tillhör Span$\{\boldsymbol{a},\boldsymbol{b},\boldsymbol{c}\}$.
2. Visa att $\{\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}\}$ är linjärt oberoende och att $\{\boldsymbol{a},\boldsymbol{b},\boldsymbol{c}\}$ är linjärt beroende.
3. Bestäm projektionen $\hat{\boldsymbol{u}}$ av $\boldsymbol{u}$ på V genom att lösa systemet (1). Skriv ett program som tar $\boldsymbol{a}$, $\boldsymbol{b}$ och $\boldsymbol{u}$ som indata och ger $\hat{\boldsymbol{u}}$. Kontrollera att $\boldsymbol{u} - \hat{\boldsymbol{u}}$ är ortogonal mot $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}, \boldsymbol{c}$ och $\hat{\boldsymbol{u}}$.
4. Hur bestämmer man enklast $\hat{\boldsymbol{u}}$ om $\boldsymbol{a}$ och $\boldsymbol{b}$ är ortogonala? Hur gör man om de är ortonormala?

2 Minsta kvadratmetoden

Låt kolonnvektorerna $\boldsymbol{a}$, $\boldsymbol{b}$ och $\boldsymbol{u}$ i $\mathbb{R}^4$ och matrisen B vara givna som ovan.

Vi påminner om att vektorn $\boldsymbol{u}$ inte tillhör mängden $V = \text{Span}\{\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}\}$, dvs ekvationen $B\boldsymbol{x} = \boldsymbol{u}$ har ingen lösning. Residualen $B\boldsymbol{x} - \boldsymbol{u}$ kan alltså inte bli noll. Vi minimerar istället normen av residualen: Bestäm ett $\boldsymbol{x}$ i $\mathbb{R}^2$ så att $\|B\boldsymbol{x} - \boldsymbol{u}\|^2$ minimeras.

Detta kallas minsta kvadratmetoden. Vi vet att avståndet $\|B\boldsymbol{x} - \boldsymbol{u}\|$ är minimalt då $B\boldsymbol{x}$ är projektionen av $\boldsymbol{u}$ på $V = \text{Span}\{\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}\}$, vilket är vad vi beräknade ovan. Vi har alltså redan beräknat minsta kvadratlösningen $\boldsymbol{x}$. Nu skall vi göra det igen utgående från en annan härledning.

Projektionen $\hat{\boldsymbol{u}}$ är bestämd av ekvationen

$$(\boldsymbol{u} - \hat{\boldsymbol{u}}) \cdot \boldsymbol{v} = 0 \text{ för alla } \boldsymbol{v} \text{ i } V = \text{Span}\{\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}\}.$$

Här är $\hat{\boldsymbol{u}} = B\boldsymbol{x}$ och $\boldsymbol{v} = B\boldsymbol{y}$ för $\boldsymbol{x}$ och $\boldsymbol{y}$ i $\mathbb{R}^2$. Alltså vill vi bestämma $\boldsymbol{x}$ i $\mathbb{R}^2$ så att

$$(\boldsymbol{u} - B\boldsymbol{x}) \cdot (B\boldsymbol{y}) = 0 \text{ för alla } \boldsymbol{y} \text{ i } \mathbb{R}^2.$$

Det gäller att $(\boldsymbol{u} - B\boldsymbol{x}) \cdot (B\boldsymbol{y}) = (B^{\mathrm{T}}\boldsymbol{u} - B^{\mathrm{T}}B\boldsymbol{x}) \cdot \boldsymbol{y}$, det vill säga $(B^{\mathrm{T}}\boldsymbol{u} - B^{\mathrm{T}}B\boldsymbol{x}) \cdot \boldsymbol{y} = 0$ för alla $\boldsymbol{y}$ i $\mathbb{R}^2$.

Detta medför att

$$B^{\mathrm{T}}B\boldsymbol{x} = B^{\mathrm{T}}\boldsymbol{u},$$

vilket kallas normalekvationerna.

Uppgifter

1. Visa att $B^{\mathrm{T}}B$ är en symmetrisk matris.
2. Bilda normalekvationerna med de givna B och $\boldsymbol{u}$ och lös ekvationerna med `x = (B'*B)\(B'*u)`. Jämför med vad du fick i avsnitt 1. Vad händer om du endast skriver `x = B\u`?

I Matlab ger `x = B\u` minsta kvadratlösningen om ekvationen $B\boldsymbol{x} = \boldsymbol{u}$ saknar lösning.

3 Exempel

Antag att variablerna x och y uppfyller att $y = kx + m$. För att betämma koefficienterna k och m gör vi mätningar av x och y:

x	5	6	7	8	9	10
y	19.5888	23.4043	25.5754	29.1231	31.9575	35.8116

Tabell 1: Mätvärden av y för vissa x.

Detta leder till ett överbestämt ekvationssystem på formen

$$\begin{cases} kx_1 + m = y_1 \\ \vdots \\ kx_6 + m = y_6 \end{cases}$$

eller, på matrisform, $A\boldsymbol{v} = \boldsymbol{y}$, där den obekanta vektorn är $\boldsymbol{v} = \begin{bmatrix} k \\ m \end{bmatrix}$.

Uppgifter

1. Lös systemet med minsta kvadratmetoden i Matlab.

T[K]	343	353	363	373	383	393	403
k[s^{-1}]	2.8 10^{-5}	5.6 10^{-5}	11.2 10^{-5}	22.4 10^{-5}	44.8 10^{-5}	89.6 10^{-5}	179.2 10^{-5}

Tabell 2: Data till Arrhenius ekvation.

2. Plotta datapunkterna (x_i,y_i) och den anpassade funktionen $y = kx+m$ i samma figur.

3. Anpassa datapunkterna till ett tredjegradspolynom $y = a_3x^3 + a_2x^2 + a_1x + a_0$. Plotta punkterna och funktionen.

4 Tillämpning, Arrhenius ekvation

Uppgift att redovisa

Arrhenius ekvation lyder $k = k_0e^{-E/(RT)}$.

1. Bestäm konstanten k_0 och kvoten E/R från informationen i tabell 2. Detta gör vi genom att logaritmera ekvationen så att en linjär relation mellan $y = \ln(k)$ och $x = 1/T$ erhålls. Denna blir på formen $y = b+ax$. Använd Tabell 2 till att generera datapunkter (x_i,y_i), där $x_i = 1/T_i$ och $y_i = \ln(k_i)$. Bilda ett linjärt ekvationssystem och lös det med minsta kvadratmetoden.

2. Plotta datapunkterna(x_i,y_i) och den anpassade funktionen $y = b + ax$ i samma figur.