

Aflevering i uge 17

Bemærkning. Da man ender med at skal løse nogle vanvittige polynomiumsligninger, hvis der er tale om at skulle finde en formel, der minimerer summen af kvadraterne af de *vinkelette* afstande fra nogle givne datapunkter til grafen for den fittede kurve, antager jeg, at der i begge opgaver er tale om de *lodrette* afstande.

Med hensyn til den graf, der skal tegnes, så kan den ses på side 5.

Opgave 6.5.6

Først nogle generelle beregninger for at finde en forskrift for det bedste fit til en ret linje med forskriften $y = ax + b$, hvor $a, b \in \mathbb{R}$ med $a \neq 0$: Definitionen på *det bedste fit* er, at summen af kvadraterne af de lodrette afstande fra nogle givne datapunkter (x_i, y_i) , $i = \{1, 2, \dots, n\}$, til grafen for den fittede kurve (denne afstand betegnes ofte med R^2), skal være så lille som mulig. Det vil sige, at jeg skal have minimeret følgende størrelse:

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

Som bekendt gøres dette for $\frac{\partial R^2}{\partial a}(a, b) = \frac{\partial R^2}{\partial b}(a, b) = 0$, så af (1) finder jeg nu nemt, at

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

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

Ved at forkorte med -2 , splitte summerne op (de er oplagt konvergente, så det må man godt) og bytte rundt på leddene, fås følgende:

$$a \sum_{i=1}^n x_i + b \sum_{i=1}^n 1 = \sum_{i=1}^n y_i,$$

$$a \sum_{i=1}^n x_i^2 + b \sum_{i=1}^n x_i = \sum_{i=1}^n x_i y_i.$$

Med fordel kan dette ligningssystem skrives på matrixform, som

$$\begin{pmatrix} \sum_{i=1}^n x_i & n \\ \sum_{i=1}^n x_i^2 & \sum_{i=1}^n x_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^n y_i \\ \sum_{i=1}^n x_i y_i \end{pmatrix}. \quad (2)$$

Nu kan man så finde eksplicitte udtryk for a og b , men det er hurtigere først at indsætte følgende data i (2):

$$\{(x_i, y_i)\} = \{(1, 1), (2, 4), (3, 6), (4, 9)\}. \quad (3)$$

Af (2) og (3) fås nu, med $n = 4$, at

$$A := \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^4 x_i & 4 \\ \sum_{i=1}^4 x_i^2 & \sum_{i=1}^4 x_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 + 2 + 3 + 4 & 4 \\ 1^2 + 2^2 + 3^2 + 4^2 & 1 + 2 + 3 + 4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 10 & 4 \\ 30 & 10 \end{pmatrix},$$

$$A^{-1} = \dots = \frac{1}{10} \begin{pmatrix} -5 & 2 \\ 15 & -5 \end{pmatrix},$$

$$B := \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^4 y_i \\ \sum_{i=1}^4 x_i y_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 + 4 + 6 + 9 \\ 1 \cdot 1 + 2 \cdot 4 + 3 \cdot 6 + 4 \cdot 9 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 20 \\ 63 \end{pmatrix}.$$

Lad nu $\mathbf{s} := (a, b)$,¹ så giver (2) mig, at

$$A\mathbf{s} = B \implies \mathbf{s} = A^{-1}B,$$

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{1}{10} \begin{pmatrix} -5 & 2 \\ 15 & -5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 20 \\ 63 \end{pmatrix} = \frac{1}{10} \begin{pmatrix} 15 \cdot 20 + (-5)63 \\ (-5)20 + 2 \cdot 63 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 13/5 \\ -3/2 \end{pmatrix}.$$

Disse værdier minimerer altså (1) mest muligt, så den bedste rette linje gennem punkterne i (3) har forskriften

$$y = \frac{13}{5}x - \frac{3}{2}. \quad (4)$$

Opgave 6.5.8

Nu skal dataene i (3) fittes til en parabel, hvis forskrift som bekendt er på formen $y = ax^2 + bx + c$, hvor $a, b, c \in \mathbb{R}$ med $a \neq 0$. Jeg skal altså have minimeret størrelsen

$$R^2(a, b, c) := \sum_{i=1}^n (y_i - (ax_i^2 + bx_i + c))^2 \quad (5)$$

mest muligt. Analogt Opgave 6.5.6, så opnås dette for

$$\frac{\partial R^2}{\partial a}(a, b, c) = \frac{\partial R^2}{\partial b}(a, b, c) = \frac{\partial R^2}{\partial c}(a, b, c) = 0.$$

¹ Dette er en vektor, og må derfor ikke forveksles med et talpar, som eksempelvis i (3).

Det ses let, at

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

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

$$\frac{\partial R^2}{\partial c}(a, b, c) = -2 \sum_{i=1}^n (y_i - (ax_i^2 + bx_i + c)) = 0.$$

Igen forkorter jeg med -2 , splitter summerne op (også de er oplagt konvergente, så det må man godt) og bytter rundt på leddene, således at jeg ender med

$$\begin{aligned} a \sum_{i=1}^n x_i^2 + b \sum_{i=1}^n x_i + c \sum_{i=1}^n 1 &= \sum_{i=1}^n y_i, \\ a \sum_{i=1}^n x_i^3 + b \sum_{i=1}^n x_i^2 + c \sum_{i=1}^n x_i &= \sum_{i=1}^n x_i y_i, \\ a \sum_{i=1}^n x_i^4 + b \sum_{i=1}^n x_i^3 + c \sum_{i=1}^n x_i^2 &= \sum_{i=1}^n x_i^2 y_i. \end{aligned}$$

En matrixligning for dette system ser ud som følger:

$$\begin{pmatrix} \sum_{i=1}^n x_i^2 & \sum_{i=1}^n x_i & n \\ \sum_{i=1}^n x_i^3 & \sum_{i=1}^n x_i^2 & \sum_{i=1}^n x_i \\ \sum_{i=1}^n x_i^4 & \sum_{i=1}^n x_i^3 & \sum_{i=1}^n x_i^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^n y_i \\ \sum_{i=1}^n x_i y_i \\ \sum_{i=1}^n x_i^2 y_i \end{pmatrix}. \quad (6)$$

Nu er det bare at gøre *fuldstændig* det samme som i Opgave 6.5.6, så jeg vil tage mig den firhed, blot at skrive resultaterne:² Igen bruger jeg $n = 4$, og finder så først, at

$$A := \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^4 x_i^2 & \sum_{i=1}^4 x_i & 4 \\ \sum_{i=1}^4 x_i^3 & \sum_{i=1}^4 x_i^2 & \sum_{i=1}^4 x_i \\ \sum_{i=1}^4 x_i^4 & \sum_{i=1}^4 x_i^3 & \sum_{i=1}^4 x_i^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 30 & 10 & 4 \\ 100 & 30 & 10 \\ 354 & 100 & 30 \end{pmatrix}.$$

² Jeg føler ikke, at disse beregninger er det vigtige i opgaven, derfor den hurtige gennemgang af denne del.

Videre gælder der, at

$$\mathbf{A}^{-1} = \frac{1}{20} \begin{pmatrix} 25 & -25 & 5 \\ -135 & 129 & -25 \\ 155 & -135 & 25 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{B} := \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^4 y_i \\ \sum_{i=1}^4 x_i y_i \\ \sum_{i=1}^4 x_i^2 y_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 20 \\ 63 \\ 215 \end{pmatrix}.$$

Lad dernæst $\mathbf{s} := (a, b, c)$. Af (6) finder man nu, at

$$\mathbf{A}\mathbf{s} = \mathbf{B} \implies \mathbf{s} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{B},$$

$$\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \frac{1}{20} \begin{pmatrix} 25 & -25 & 5 \\ -135 & 129 & -25 \\ 155 & -135 & 25 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 20 \\ 63 \\ 215 \end{pmatrix} = \dots = \begin{pmatrix} 0 \\ 13/5 \\ -3/2 \end{pmatrix}.$$

Disse værdier minimerer (5) mest muligt, så det bedste fit gennem punkterne – til ethvert polynomium af grad 2 eller lavere – i (3) har altså forskriften

$$y = \frac{13}{5}x - \frac{3}{2}. \quad (7)$$

Observation. Dette var også det fundne fit i Opgave 6.5.6, så der er altså ingen grund til at fitte til en parabel, set ud fra et kvalitativt synspunkt – hvorvidt man eventuelt kan have glæde af at fitte til polynomier af højere grad, skal jeg ikke kunne udtale mig om, men fittet vil formodentlig ikke blive markant bedre.

Bilag til Opgave 6.5.6

Følgende figur viser grafen for dataene fra (3) samt fittet (4):