

# Minsta-kvadratmetoden

## 1 Inledning

Ett ofta förekommande problem inom teknik och vetenskap är att koppla samman mätdata med en formel eller kurva som man vill verifiera eller bygga upp.

## 2 Minsta-kvadratmetoden

Ett klassiskt problem är att anpassa en rät linje  $y = a + b \cdot t$  till givna mätdata  $(t_i, y_i)$ ,  $i = 1, \dots, n$ . Hur skall vi välja  $a$  och  $b$ ? Vi kan ju inte få den räta linjen att gå igenom mer än högst två punkter. Problemet vi skall lösa är följande överbestämde ekvationssystem

$$\begin{cases} a + b \cdot t_1 = y_1 \\ a + b \cdot t_2 = y_2 \\ \vdots \\ a + b \cdot t_n = y_n \end{cases}$$

(det är  $a$  och  $b$  som är de obekanta!) På matrisform,

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 1 & t_1 \\ 1 & t_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & t_n \end{bmatrix}}_{\mathbf{A}} \underbrace{\begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix}}_{\mathbf{x}} = \underbrace{\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}}_{\mathbf{y}}$$

Grundidén i minsta-kvadratmetoden är att projicera vektorn  $\mathbf{y}$  ortogonalt på kolonnrummet för matrisen  $\mathbf{A}$  ( $Col(\mathbf{A})$ ) och sedan lösa ekvationen  $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{p}$  där  $\mathbf{p}$  är projektionen. På så vis får vi en lösning  $\hat{\mathbf{x}}$  där avståndet  $\|\mathbf{A}\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{y}\|$  är det minsta möjliga och väljer vi nu  $a = \hat{x}_1$ ,  $b = \hat{x}_2$  så har vi minimerat summan av kvadraterna på avvikelserna:

$$\sum_{i=1}^n (a + b \cdot t_i - y_i)^2$$

Lösningen  $\hat{\mathbf{x}}$  till problemet  $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{p}$  ovan säges vara *minsta-kvadratlösningen* till det ursprungliga ekvationssystemet  $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{y}$ . Vi finner den genom att lösa den så kallade *normalekvationen*, (se Lay kap. 6.5, sats 13 och 14),

$$\mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{A}^T \mathbf{y} \quad (1)$$

(Notera att vi inte behöver bestämma projektionen  $\mathbf{p}$  för att bestämma  $\hat{\mathbf{x}}$ .)

Det *kvadratiska medelfelet*, den genomsnittliga avvikelsen, ges av

$$\varepsilon = \|\mathbf{A}\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{y}\| / \sqrt{n}$$

där  $n$  är antalet mätdata.

Låt oss nu bestämma den räta linje som i minsta-kvadratmening är bäst anpassad till följande data:

t	-1	0	1	2	3	4	6	7
y	-0.75	0.3	3	4	5.6	7	6.4	8.4

Då är

$$\mathbf{A}^T = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -1 & 0 & 1 & 2 & 3 & 4 & 6 & 7 \end{bmatrix}, \mathbf{A}^T \mathbf{A} = \begin{bmatrix} 8 & 22 \\ 22 & 116 \end{bmatrix}, \mathbf{A}^T \mathbf{y} = \begin{bmatrix} 33.95 \\ 153.75 \end{bmatrix}$$

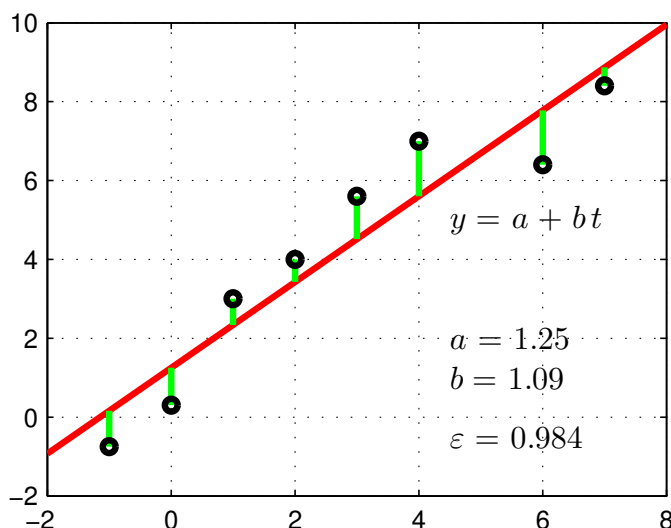
och normalekvationen är

$$\begin{bmatrix} 8 & 22 \\ 22 & 116 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 33.95 \\ 153.75 \end{bmatrix}$$

I MATLAB löser vi (1) med kommandot \ enligt

```
>> td=[-1 0 1 2 3 4 6 7]'; % t-data
>> yd=[-0.75 0.3 3 4 5.6 7 6.4 8.4]'; % y-data
>> A=[ones(size(td)) td]; % Designmatrisen
>> x=A\yd; a=x(1); b=x(2); % Minsta-kvadratlösningen
>> n=length(td); % Antalet mätdata
>> e=norm(A*x-yd)/sqrt(n); % Kvadratiske medelfelet
```

Vi kan nu rita upp följande figur



Vi minimerar summan av kvadraterna på de lodräta sträckorna.

**Uppgift 1.** Antag att variablerna  $t$  och  $y$  uppfyller sambandet  $y = a + b \cdot t$ . För att bestämma koefficienterna  $a$  och  $b$  utför vi mätningar av  $t$  och  $y$ :

t	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  $t$ .

- Lös normalekvationen (1) med minsta kvadratmetoden i MATLAB. Bestäm också kvadratiske medelfelet.
- Rita upp datapunkterna  $(t_i, y_i)$  och den anpassade funktionen  $y = a + b \cdot t$  i samma figur.

### 3 Tillämpning, Arrhenius ekvation

**Uppgift 2.** Arrhenius ekvation lyder  $k = k_0 e^{-E/(RT)}$ .

- (a). Logaritmera för hand på papper båda sidorna av Arrhenius ekvation.
- (b). Bestäm konstanten  $k_0$  och kvoten  $E/R$  från informationen i Tabell 2. Detta gör vi genom att den logaritmerade ekvationen ger en linjär relation mellan  $y = \ln(k)$  och  $t = 1/T$  på formen  $y = a + b \cdot t$ . Använd Tabell 2 till att generera datapunkter  $(t_i, y_i)$ , där  $t_i = 1/T_i$  och  $y_i = \ln(k_i)$ . Bilda ett linjärt ekvationssystem och lös det med minsta kvadratmetoden. Bestäm också kvadratiske medelfelet. I MATLAB ges  $\ln(k)$  av  $\log(k)$ .
- (c). Rita ut datapunkterna  $(t_i, y_i)$  och den anpassade funktionen  $y = a + b \cdot t$  i samma figur.

T[K]	343	353	363	373	383	393	403
k[s <sup>-1</sup> ]	2.8 10 <sup>-5</sup>	5.6 10 <sup>-5</sup>	11.2 10 <sup>-5</sup>	22.4 10 <sup>-5</sup>	44.8 10 <sup>-5</sup>	89.6 10 <sup>-5</sup>	179.2 10 <sup>-5</sup>

Tabell 2: Data till Arrhenius ekvation.

### 4 Allmän formulering

Härnäst skall vi bestämma den kurva

$$y = c_1 \cdot f_1(t) + c_2 \cdot f_2(t) + \dots + c_k \cdot f_k(t)$$

där  $f_1, f_2, \dots, f_k$  är kända funktioner, som i minsta kvadratmening är bäst anpassad till givna mätdata

$$\begin{array}{c|cccc} \mathbf{t} & t_1 & t_2 & \cdots & t_n \\ \hline \mathbf{y} & y_1 & y_2 & \cdots & y_n \end{array}$$

Matrisformuleringen av det överbestämde ekvationssystem vi intresserar oss för ges av

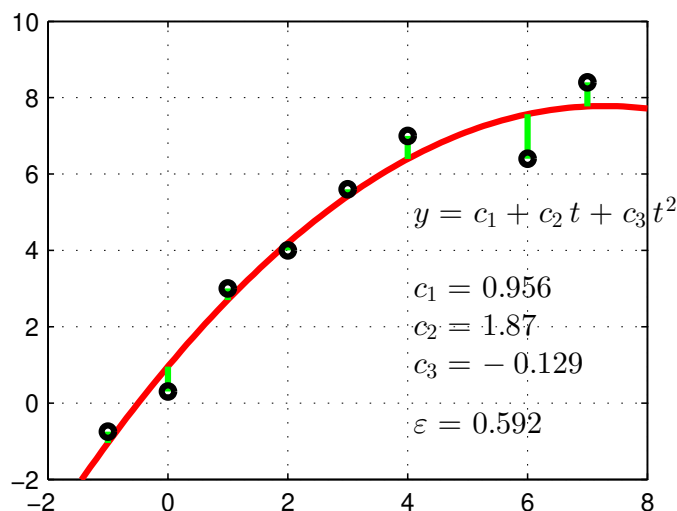
$$\underbrace{\begin{bmatrix} f_1\left(\begin{bmatrix} t_1 \\ t_2 \\ \vdots \\ t_n \end{bmatrix}\right) & f_2\left(\begin{bmatrix} t_1 \\ t_2 \\ \vdots \\ t_n \end{bmatrix}\right) & \cdots & f_k\left(\begin{bmatrix} t_1 \\ t_2 \\ \vdots \\ t_n \end{bmatrix}\right) \end{bmatrix}}_{\mathbf{A} \text{ (designmatrisen)}} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_k \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}}_{\mathbf{y}}$$

Precis som tidigare finner vi minsta-kvadratlösningen genom att lösa normalekvationen (1). Låt oss återgå till vårt första exempel ovan och istället anpassa ett andragradspolynom,  $y = c_1 + c_2 \cdot t + c_3 \cdot t^2$ , till givna mätpunkter. Här är  $f_1(t) = 1$ ,  $f_2(t) = t$ ,  $f_3(t) = t^2$  och designmatrisen  $\mathbf{A}$  och minsta-kvadratlösningen skapas i MATLAB på liknande sätt som tidigare

```
>> td=[-1 0 1 2 3 4 6 7]';           % t-data
>> yd=[-0.75 0.3 3 4 5.6 7 6.4 8.4]'; % y-data
>> A=[ones(size(td)) td td.^2];      % Designmatrisen
>> c=A\yd;                           % Minsta-kvadratlösningen
```

```
>> n=length(td); % Antalet mätdata
>> e=norm(A*c-yd)/sqrt(n); % Kvadratiske medelfelet
>> y=@(t)c(1)+c(2)*t+c(3)*t.^2;
>> t=linspace(-2,8);
>> plot(td,yd,'ko',t,y(t),'r','linewidth',2)
```

Vi kan nu rita figuren



Vi minimerar summan av kvadraterna på de lodräta sträckorna.

**Uppgift 3.** Anpassa ett tredjegradspolynom till mätdata i uppgift 1. Rita ut datapunkter och den anpassade kurvan i samma figur och ange kvadratiske medelfelet.

**Uppgift 4.** Lös uppgift 6.6.10 i Lay. Rita figur i MATLAB!

**Uppgift 5.** Tabellen nedan visar (en del av) utfallet  $y$  av ett försök då man varierar två faktorer  $s$  och  $t$ .

$s$	41.9	43.4	43.9	44.5	47.3	47.5	47.9	50.2	...
$t$	29.1	29.3	29.5	29.7	29.9	30.3	30.5	30.7	...
$y$	251.3	251.3	248.3	267.5	273.0	276.5	270.3	274.9	...

- (a). Datafilen `labdata.mat` på studiohemsidan innehåller hela uppsättningen data lagrad i tre variabler `sd`, `td` och `yd`. Hämta filen och ladda in i MATLAB med `load` och rita upp data med `plot3` enligt

```
>> load('labdata')
>> smin=min(sd); smax=max(sd); tmin=min(td); tmax=max(td);
>> plot3(sd,td,yd,'ro','linewidth',2), hold on
>> axis([smin smax tmin tmax]), axis vis3d, box on
```

Vänd och vrid för att se om data ligger nära ett plan.

- (b). Anpassa en linjär modell

$$y = a + b \cdot s + c \cdot t$$

till data med minsta-kvadratmetoden. Rita ut, tillsammans med mätdata, det plan som beskriver modellen.

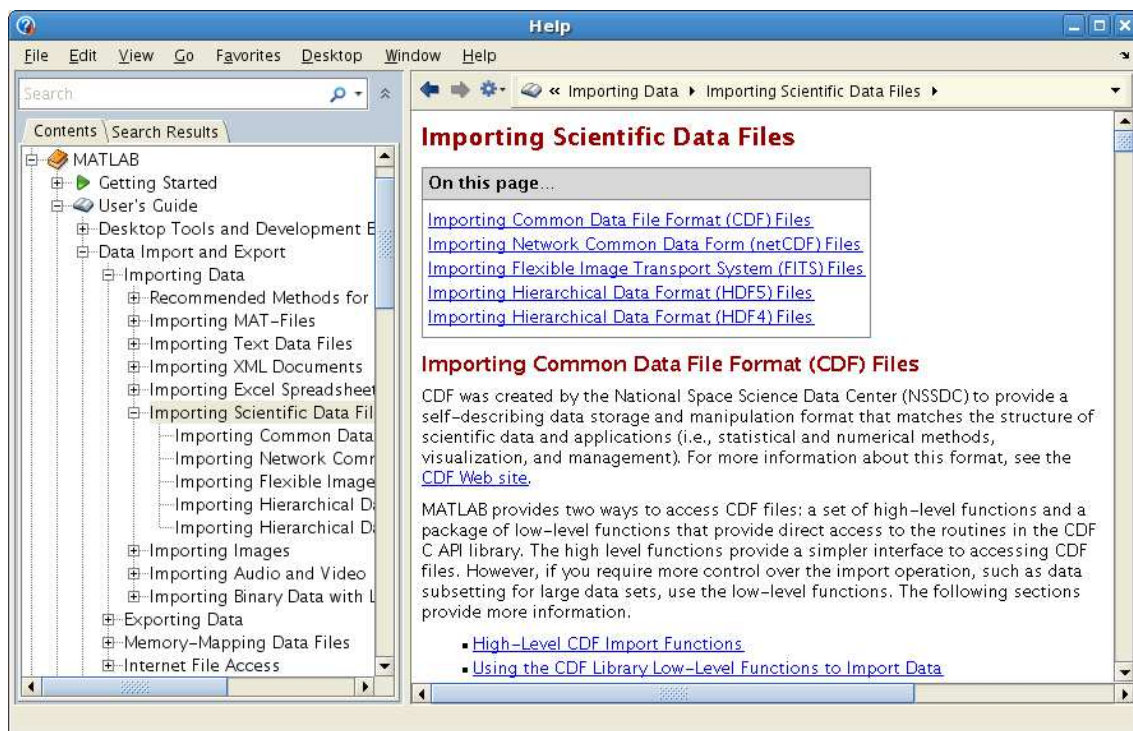
Om koefficienterna ligger samlade i en vektor  $c$  så ritar du upp modellen med

```
>> y=@(s,t)c(1)+c(2)*s+c(3)*t;  
>> S=[smin smax smax smin]; T=[tmin tmin tmax tmax];  
>> fill3(S,T,y(S,T),'b','facealpha',0.2)  
>> xlabel('s'), ylabel('t'), zlabel('y(s,t)'), grid on
```

Vänd och vrid för att se om ert plan ligger nära data.

## 5 Import av data

För att hantera mätdata behöver man bl.a. kunna hantera olika fil-format. För import av data har MATLAB en Import Wizard som man kan läsa om i Helpdesk.



Vid behov läser man mer på detta i Helpdesk.