Minsta-kvadratmetoden.

Analys och Linjär Algebra, del C, K1/Kf1/Bt1, vt10

1 Minsta kvadratmetoden

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.
Ett klassiskt problem är att anpassa en rät linje $y = a + b \cdot t$ till givna mätdata (t_i, y_i), $i = 1 \ldots n$. 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 överbestämda ekvationssystem

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

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

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

Grundiden i minsta-kvadratmetoden är att projicera vektorn $\boldsymbol{y}$ på kolonnrummet för matrisen $\boldsymbol{A}$ ($Col(\boldsymbol{A})$) och sedan lösa ekvationen $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{p}$ där $\boldsymbol{p}$ är projektionen. På så vis erhåller vi en lösning $\hat{\boldsymbol{x}}$ där avståndet $\|\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{y}\|$ 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 $\hat{\boldsymbol{x}}$ till problemet $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{p}$ ovan säges vara *minsta-kvadratlösningen* till det ursprungliga ekvationssystemet $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{y}$. Vi finner den genom att lösa den så kallade *normalekvationen*, (se Lay kap. 6.5, sats 13 och 14),

$$\boldsymbol{A}^T \boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{A}^T \boldsymbol{y} \tag{1}$$

(Notera att vi inte behöver bestämma projektionen $\boldsymbol{p}$ för att bestämma $\hat{\boldsymbol{x}}$.)
Låt oss nu bestämma den räta linje som i minsta-kvadratmening är bäst anpassad till följande data:

$\boldsymbol{t}$	-1	0	1	2	3	4	6	7
$\boldsymbol{y}$	-0.75	0.3	3	4	5.6	7	6.4	8.4

Då är

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

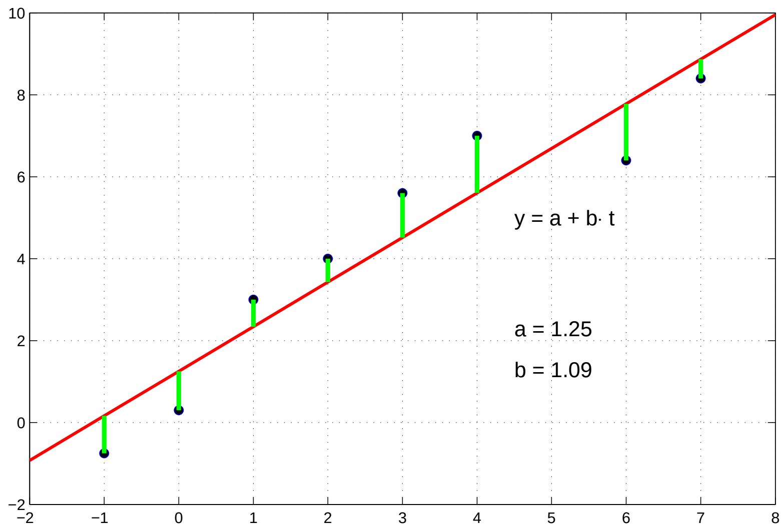
och normalekvationen är

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

I MATLAB löser vi (1) med kommandot \

```
>> td = [-1 0 1 2 3 4 6 7]';                % t-data
>> yd = [-.75 .3 3 4 5.6 7 6.4 8.4]';     % y-data
>> A = [ones(size(td)) td];                 % Designmatrisen
>> x = A\y; a=x(1); b=x(2);
```

Vi kan nu rita upp följande figur



Figur 1: Vi mininmerar summan av kvadraterna på de lodräta sträckorna.

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

$$\epsilon = \|\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{y}\|/\sqrt{n}$$

där n är antalet mätdata.
I vårt exempel så är $\|\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{y}\| = 2.78$ och $\epsilon = 2.78/\sqrt{8} = 0.98$. Följande kommandon i MATLAB ger oss dessa resultat:

```
>> S = norm(A*x - y);e=S/sqrt(8);
```

Övning 1. Antag att variablerna t och y uppfyller att $y = a + b \cdot t$. För att betämma 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.

a) Lös normalekvationen (1) med minsta kvadratmetoden i MATLAB . Bestäm också kvadratiska medelfelet.

b) Plotta datapunkterna (t_i,y_i) och den anpassade funktionen $y = a + b \cdot t$ i samma figur.

2 Tillämpning, Arrhenius ekvation

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

a) 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 $t = 1/T$ erhålls. Denna blir 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 kvadratiska medelfelet.

b) Plotta 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^{-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.

3 Allmän formulering

Härnäst skall vi bestämma den kurva

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

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

t	t_1	t_2	$\ldots$	t_n
y	y_1	y_2	$\ldots$	y_n

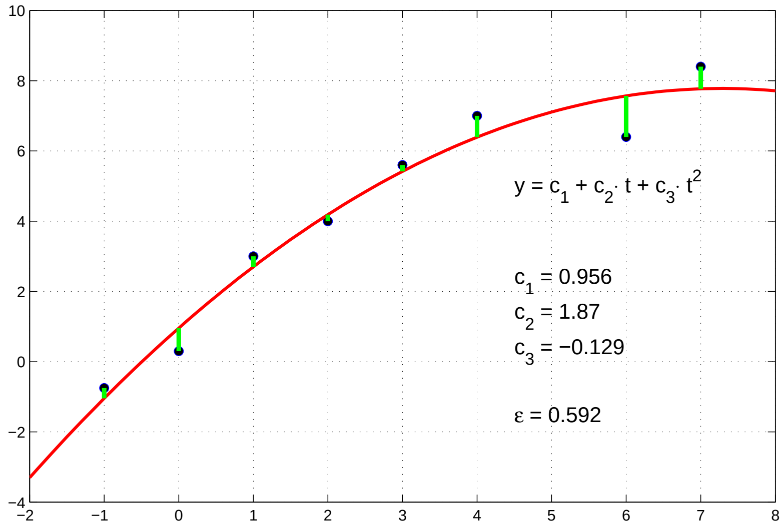
Matrisformuleringen av det överbestämda ekvationssystem vi intresserar oss för ges av

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

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, $y = c_1 + c_2 \cdot t + c_2 \cdot t^2$, till givna mätpunkter. Här är $f_1(t) = 1$, $f_2(t) = t$, $f_3(t) = t^2$ och designmatrisen $\boldsymbol{A}$ och minsta-kvadratlösningen skapas i MATLAB på liknande sätt som tidigare

```
>> td = [-1 0 1 2 3 4 6 7]';              % t-data
>> yd = [-.75 .3 3 4 5.6 7 6.4 8.4]';     % y-data
>> A = [ones(size(td)) td td.^2];         % Designmatrisen
>> x = A\y;                               % Minsta-kvadratlösningen
>> n=length(td);                          % Antalet mätdata
>> e = norm(A*x-yd)/sqrt(n);              % Kvadratiska medelfelet
```

Vi kan nu rita figuren



Figur 2: Vi mininmerar summan av kvadraterna på de lodräta sträckorna.

Övning 3. .

a) Anpassa ett tredjegradspolynom till mätdata i övning 1. Plotta datapunkter och den anpassade kurvan i samma figur och ange kvadratiska medelfelet.

b) Lös uppgift 6.6.10 i Lay. Rita figur i MATLAB !

c) Lös följande problem både för hand och med hjälp av MATLAB . (Uppgiften gavs 2006 som tentamensuppgift på Z-linjen)
Anpassa med hjälp av minsta kvadratmetoden en andragradskurva $y = a + b \cdot t + c \cdot t^2$ till följande data

t	-2	-1	0	1	2
y	5	0	0	-2	1

Beräkna kvadratiska medelfelet och rita till sist en beskrivande figur.