Föreläsning 1: Minsta kvadrat-metoden

Lärandemål

- Känna till minsta kvadrat-metoden och hur den används för att anpassa polynom till data
- Finna en anpassad kurva genom att lösa normalekvationerna för hand
- Använda **Fit**[ ] i Mathematica för minstakvadratanpassning

Ett vanligt problem vid experimentellt arbete är att finna ett matematiskt samband mellan två variabler x, och y, som uppmätts från experiment. Antag att vi har n mätpunkter

$$(x_1, y_1,), \ldots, (x_n, y_n)$$

Ett första steg är ofta att studera punkterna grafiskt för att försöka bedöma vilket typ av samband som råder (linjärt, exponentiellt, periodiskt etc.). Eftersom mätdata kommer från experiment som innehåller fel går det oftast inte att matcha en funktion "perfekt" till punkterna, och man försöker istället finna den "bästa" approximationen.

Som exempel tittar vi på fallet att finna en rät linje som beskriver förhållandet mellan punkterna! Så vi söker $y = ax + b$ som beskriver vår mätdata. Om punkterna verkligen låg på en rät linje skulle vi ha

$$\begin{aligned} y_1 &= a + bx_1 \\ &\vdots \\ y_n &= a + bx_n \end{aligned}$$

Som kan skrivas på matris-form

$$\begin{pmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$$

Eller mer kompakt, för $M = \begin{pmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_n \end{pmatrix}$, $\mathbf{v} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ och $\mathbf{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$, kan detta skrivas som

$$M\mathbf{v} = \mathbf{y} \tag{1}$$

I verkligheten ligger däremot inte punkterna på en rät linje, och vi söker istället den räta linje som minimerar summan av kvadraten av avstånden mellan mätpunkter och linje.

Från linjär algebra vet vi att den så kallade minsta kvadrat-lösningen till (1) är: finn $\mathbf{v}$ som minimerar minsta kvadrat-felet

$$||\mathbf{y} - M\mathbf{v}|| \tag{2}$$

Detta kan lösas genom att lösa den s.k. normalekvationen

$$\mathbf{v}^* = (M^T M)^{-1} M^T \mathbf{y}$$

där $\mathbf{v}^*$ är den vektor som minimerar felet i (2). För den intresserade studenten finns mer detaljerade framställningar i de flesta läroböcker i linjär algebra.

Ovanstående kan enkelt generaliseras till polynom av högre grad. Tag som exempel ett tredjegradspolynom $y = a + bx + cx^2 + dx^3$. Då har vi de n ekvationerna

$$\begin{aligned} y_1 &= a + bx_1 + cx_1^2 + dx_1^3 \\ &\vdots \\ y_n &= a + bx_n + cx_n^2 + dx_n^3 \end{aligned}$$

som på matrisform kan skrivas $M = \begin{pmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & x_1^3 \\ 1 & x_2 & x_2^2 & x_2^3 \\ \vdots & \vdots & & \\ 1 & x_n & x_n^2 & x_n^3 \end{pmatrix}$, $\mathbf{v} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ och $\mathbf{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$, och därmed även

$$M\mathbf{v} = \mathbf{y}$$

Den inbygda funktionen *Fit[]* i Mathematica utför precis detta!

Observera att en geometrisk tolkning av minsta kvadrat-metoden är att den minimerar summan av kvadraten på avståndet mellan punkt och kurva, summerat över all punkter. (Varför används kvadraten?)

Exempel 1 (Enkelt räkneexempel som jämförs med Mathematica)**.** *Givet punkterna* $(0,0), (0,2), (3,3.5), (3,4.5)$*, hitta minsta kvadrat-anpassningen av en rät linje. Vi har nu följande matrisproblem: beräkna* $\mathbf{v}^* = (M^T M)^{-1} M^T \mathbf{y}$ *där*

$$M = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 0 \\ 1 & 3 \\ 1 & 3 \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{y} = \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ 3.5 \\ 4.5 \end{pmatrix}$$

Vi får då $(M^TM)^{-1}) = \frac{1}{36}\begin{pmatrix} 18 & 18 & 0 & 0 \\ -6 & -6 & 6 & 6 \end{pmatrix}$ *Genom att nu multiplicera med* $\mathbf{y}$ *från höger får vi resultatet* $\mathbf{v}^* = (1,1)$, *alltså är linjen* $y = 1 + x$. *Nu jämför vi detta med resultatet från Mathematica!*