F4

Minstakvadrat-metoden

Överbestämda linjära ekvationssystem

Formulering

Statistik- Gauss-Markov

Modell-anpassning

Linjärt ersättnings-problem

Polynom

Minstakvadratmetoden I
NAM 2

Exempel:

Data-anpassning

Fel-utjämning

Formulering som linjärt överbestämt m x n , $M > n$

ekvationssystem $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$

Principp $\min_{\mathbf{x}} \|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_2 = \min_{\mathbf{x}} \|\mathbf{r}\|_2; \quad \min_{\mathbf{x}} \sum_{i=1}^{m} r_i^2$

Nödvändigt villkor: Kolumnerna i **A** vinkelräta mot residualvektorn **r**, ***normalekvationerna***

$$\mathbf{A}^T\mathbf{Ax} = \mathbf{A}^T\mathbf{b}$$

Minstakvadratmetoden II

Bevis

Geometrisk tolkning, se NAM. Här analytisk metod, analog med variationskalkylen.

Antag att **x** ger minimum. Betrakta

$$f(\varepsilon) = (\mathbf{A}(\mathbf{x}+\varepsilon\mathbf{v})-\mathbf{b})^T(\mathbf{A}(\mathbf{x}+\varepsilon\mathbf{v})-\mathbf{b}) > (\mathbf{A}\mathbf{x}-\mathbf{b})^T(\mathbf{A}\mathbf{x}-\mathbf{b})$$

för godtycklig vektor **v**. *f* är kvadratisk i ε och minimum som måste antas för ε = 0 ges av att derivatan = 0 för ε = 0.

Alltså,

$$f'(\varepsilon) = (\mathbf{A}\mathbf{v})^T(\mathbf{A}(\mathbf{x}+\varepsilon\mathbf{v})-\mathbf{b}) + (\mathbf{A}(\mathbf{x}+\varepsilon\mathbf{v})-\mathbf{b})^T(\mathbf{A}\mathbf{v}),$$

$$f'(0) = 2(\mathbf{A}\mathbf{v})^T(\underbrace{\mathbf{A}\mathbf{x}-\mathbf{b}}_{\mathbf{r}}) = 2\mathbf{v}^T\mathbf{A}^T\mathbf{r} = 0$$

Eftersom detta gäller för alla **v** måste $\mathbf{A}^T\mathbf{r} = \mathbf{A}^T(\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}) = 0$

Minstakvadratmetoden III

Exempel

Minstakvadrat-anpassning av polynom $P(x)$ av grad n till m data-punkter (x_i,y_i), $i = 1,2,\ldots,m$. n+1 koefficienter c_j att bestämma

$$P(x_i) = \sum_{k=0}^{n} c_k x_i^k \approx y_i$$

$$1 \cdot c_0 + x_1 \cdot c_1 + x_1^2 \cdot c_2 + \ldots + x_1^n \cdot c_n = y_1$$
$$1 \cdot c_0 + x_2 \cdot c_1 + x_2^2 \cdot c_2 + \ldots + x_2^n \cdot c_n = y_2$$
$$1 \cdot c_0 + x_3 \cdot c_1 + x_3^2 \cdot c_2 + \ldots + x_3^n \cdot c_n = y_3$$
$$\ldots$$

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & \ldots & x_1^n \\ 1 & x_2 & x_2^2 & \ldots & x_2^n \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 1 & x_k & x_k^2 & \ldots & x_k^n \\ \ldots & & & & \\ 1 & x_m & x_m^2 & \ldots & x_m^n \end{pmatrix}, \mathbf{c} = \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \\ \ldots \\ c_n \end{pmatrix}, \mathbf{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ \ldots \\ y_m \end{pmatrix}$$

MATLAB:
```
c = A\y;
```

Minstakvadratmetoden IV

Andra basfunktioner

1. Polynom: $\phi_k(x) = (x-a)^k, k = 0,1,\ldots,n$

"Centrering" $a = (\sum_{k=1}^{m} x_k)/m$

ger bättre konditionerad matris

2. Fourier-analys $\phi_{2k-1}(x) = \sin(k\frac{2\pi x}{L}), \phi_{2k}(x) = \cos(k\frac{2\pi x}{L})$

för data med period L.

MATLAB, polynom:

```
c = polyfit(x,y) ypl = polyval(c,xpl)
…
a   = mean(x);
cc  = polyfit(x-a,y);
ypl = polyval(c,xpl-a);
```

Minstakvadratmetoden IV

Gauss-Markovs sats:

Om **y** = **Ac** + **e**, där e_k är normalfördelade, okorrelerade stokastiska variabler med medelvärde 0 och samma varians σ, så ger minsta-kvadratskattningen

$$\mathbf{A}^T\mathbf{A}\hat{\mathbf{c}} = \mathbf{A}^T(\mathbf{y}+\mathbf{e})$$

den medelvärdesriktiga skattningen av **c** som har *minst* (co)varians:

$$E[(\hat{\mathbf{c}}-\mathbf{c})(\hat{\mathbf{c}}-\mathbf{c})^T] = \sigma^2(\mathbf{A}^T\mathbf{A})^{-1}$$

σ kan skattas med $\sigma \approx \|\mathbf{r}\|_2 / \sqrt{m-n}$

vilket visar hur ”felet” minskar med antalet mätningar *m*.

Minstakvadratmetoden V

Exempel:

Minstakvadrat-approximation med polynom

$$f(x) = \frac{1}{x^2 + 1 + 0.4x}, x \in [0,2]$$

f's poler ligger vid $z_{1,2} \approx -0.2 \pm 0.98i$

Vi tar n = 100 punkter jämnt fördelade i [0,2]

och använder **`polyfit`** med grad d

som ger d:te grads polynomet $P(x,d)$. För $d = 0,1,\ldots,N$

plotta felkurvan $e(x,d) = P(x,d) - f(x)$

och därefter ${}^{10}\log(RMS(e))$ och $c(1,d)$ (högstagradskoeff.),

$$RMS(e) = \|e(.,d)\|_2 / \sqrt{\mathrm{n}}$$

och $e(x,d)/RMS(e)$ sfa. x och d

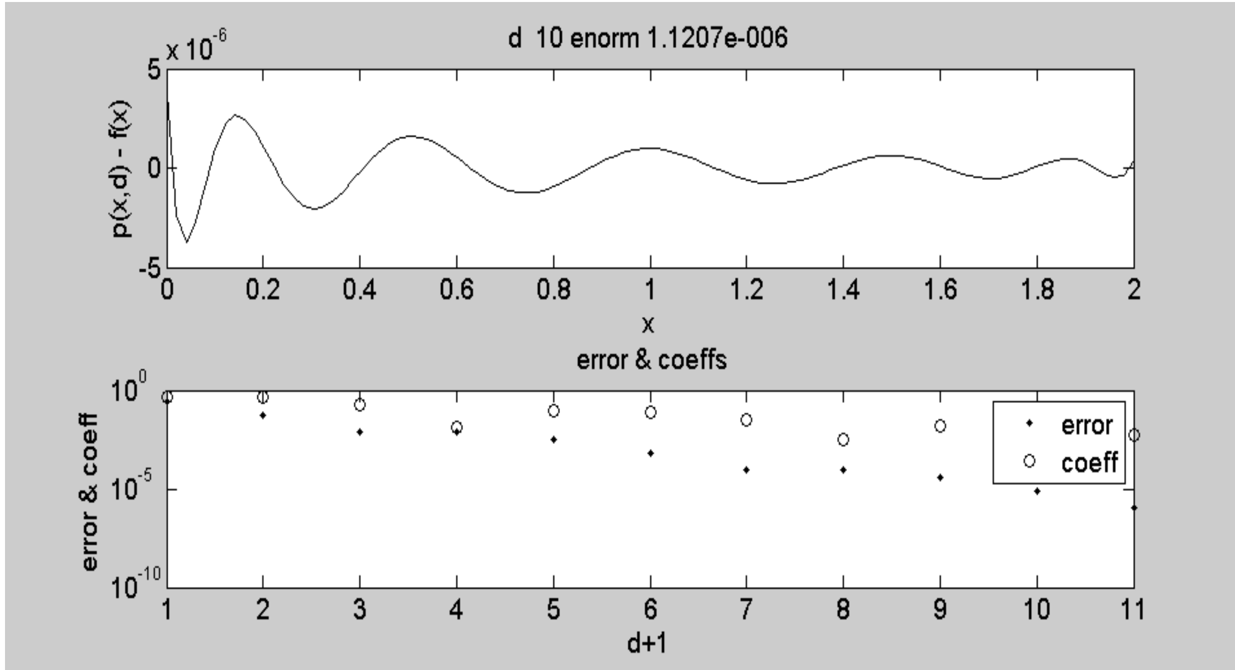
Minstakvadratmetoden VI

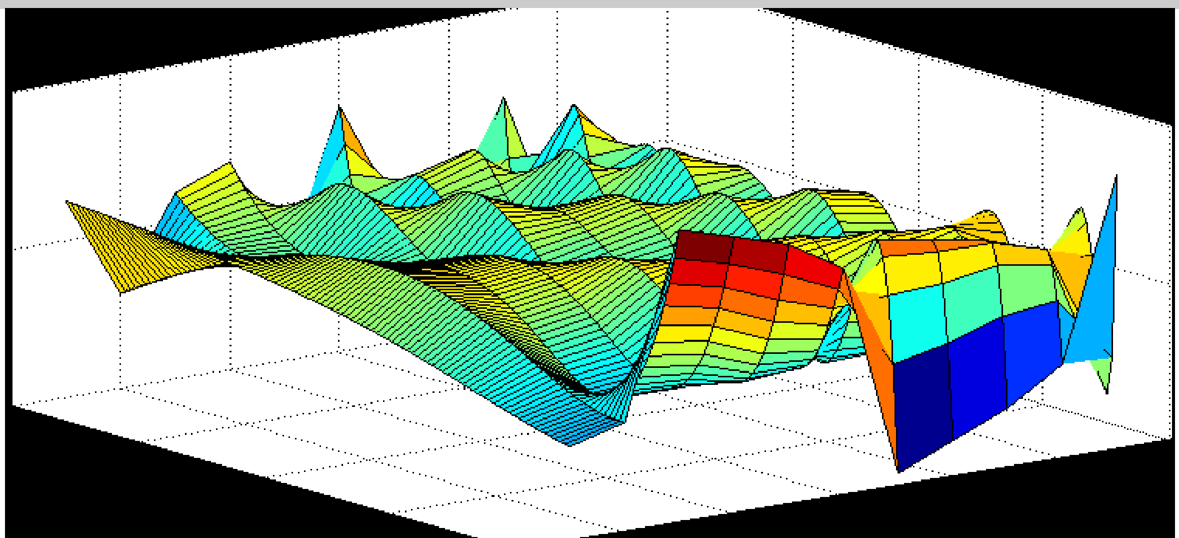
```
n = 100;
x = linspace(0,2,n)'; % ocentrerat !
f = 1./(x.^2+1+0.4*x);
N = 10;
etab = zeros(N+1,1); ctab = etab;
mm = zeros(length(x),N+1);  % ska bli e sfa x & d
subplot(211)
for deg = 0:N
    c = polyfit(x,f,deg);
    e = polyval(c,x) - f;
    RMSe = norm(e)/sqrt(n);
    etab(deg+1) = RMSe;
    mm(:,deg+1) = e/RMSe;
    ctab(deg+1) = abs(c(1)); % högstagradskoeff
    plot(x,e,'k')
    title(['d  ',num2str(deg),' enorm ',...
          num2str(RMSe)],'fontsize',14)
    pause(0.1)
end
hold on
xlabel('x','fontsize',14)
ylabel('p(x,d) - f(x)','fontsize',14)
```

$$e(x,d) = P(x,d) - f(x)$$

$$RMS(e) = \|e(.,d)\|_2 / \sqrt{\mathrm{n}}$$

Minstakvadratmetoden VII





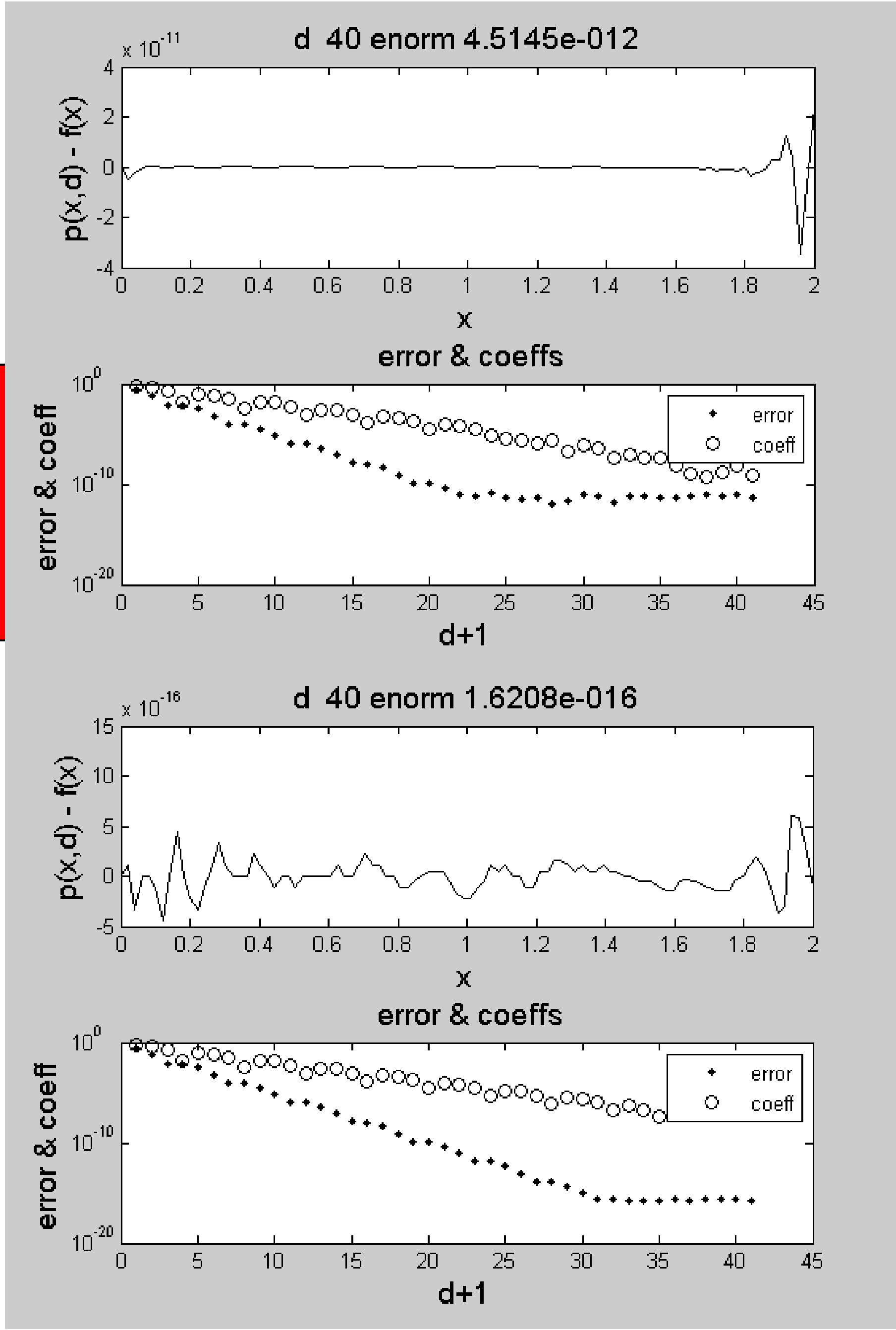
Minstakvadratmetoden VIII

Vad händer med ökat gradtal?
Prova 20, 40,..

- Illakonditíonerat problem (☹)
- Felet > 10^{-12} minskar inte grad > 25
- Stora fel i $x = 2$

Förbättring med centrering (☺):

- Fel ner till 10^{-16}
- Minskar till grad 32



Sekantmetod, konvergensordning

Sats:

Sekantmetoden $x_{n+1} = x_n - \dfrac{x_n - x_{n-1}}{f(x_n) - f(x_{n-1})} f(x_n), \varepsilon_n = \alpha - x_n$

har konvergensordning $\lim\limits_{n\to\infty} \dfrac{\varepsilon_n}{\left|\varepsilon_{n-1}\right|^p} = K, \quad p = \dfrac{1+\sqrt{5}}{2}$

Bevis :

Som vi kommer att se i avsnittet om polynom-interpolation gäller

$$0 = f(\alpha) = f(x_n) + \underbrace{\frac{f(x_n) - f(x_{n-1})}{x_n - x_{n-1}}}_{= f'(\eta)}(\alpha - x_n) + \frac{1}{2} f''(\xi)(\alpha - x_n)(\alpha - x_{n-1})$$

eller

$$0 = \underbrace{\frac{x_n - x_{n-1}}{f(x_n) - f(x_{n-1})} f(x_n) + \alpha - x_n}_{\alpha - x_{n+1}} + \frac{1}{2}\frac{f''(\xi)}{f'(\eta)}(\alpha - x_n)(\alpha - x_{n-1})$$

dvs. $\varepsilon_{n+1} = -\dfrac{1}{2}\dfrac{f''(\xi)}{f'(\eta)}\varepsilon_n \varepsilon_{n-1} : \left|\varepsilon_{n+1}\right| = K\left|\varepsilon_n\right|\left|\varepsilon_{n-1}\right|, K \approx \left|-\dfrac{1}{2}\dfrac{f''(\alpha)}{f'(\alpha)}\right|$

$u_{n+1} = u_n + u_{n-1}, u_n = \ln(K\left|\varepsilon_n\right|)$ Fibonacci!

Sekantmetod, konvergensordning,II

$u_{n+1} = u_n + u_{n-1}$ kan satisfieras av $u_n = \gamma u_{n-1}$ om

$$\gamma^2 = \gamma + 1, \gamma = \frac{1 \pm \sqrt{5}}{2} = 1.618..., -0.618...$$

så att $\lim_{n\to\infty} \frac{\varepsilon_n}{|\varepsilon_{n-1}|^p} = K, \quad p = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$

$$|\varepsilon_n| = \frac{e^{u_n}}{K} \text{ ger } \frac{|\varepsilon_{n+1}|}{|\varepsilon_n|^p} = K^{p-1} e^{u_{n+1} - p u_n} = K^{p-1} e^{c\gamma^n(\gamma - p)}$$

som konvergerar, bara om $p = \gamma$, mot $K^{\gamma-1}$

QED