

F4

Minstakvadrat-metoden för överbestämda
linjära ekvationssystem

Formulering

Statistik- Gauss-Markov

Modell-anpassning

Polynom

Minstakvadratmetoden I

NAM 2

Exempel:

Data-anpassning

Fel-utjämning

Formulering som linjärt överbestämt $m \times n$, $M > n$
ekvationssystem $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$

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

Nödvändigt villkor: Kolumnerna i $\mathbf{A}$ vinkelräta mot residualvektorn $\mathbf{r}$, *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 $\mathbf{x}$ ger minimum. Betrakta

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

för godtycklig vektor $\mathbf{v}$. f är kvadratisk i ε och minimum som måste antas för $\varepsilon = 0$ ges av att derivatan $= 0$ för $\varepsilon = 0$.

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

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

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

Minstakvadratmetoden III

Exempel

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

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

$$1 \cdot c_0 + x_1 \cdot c_1 + x_1^2 \cdot c_2 + \dots + x_1^n \cdot c_n = y_1$$

$$1 \cdot c_0 + x_2 \cdot c_1 + x_2^2 \cdot c_2 + \dots + x_2^n \cdot c_n = y_2$$

$$1 \cdot c_0 + x_3 \cdot c_1 + x_3^2 \cdot c_2 + \dots + x_3^n \cdot c_n = y_3$$

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

MATLAB:
`c = A \ y;`

Minstakvadratmetoden IV

Andra basfunktioner

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

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

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(cc, xpl-a);
```

Minstakvadratmetoden IV

Gauss-Markovs sats:

Om $\mathbf{y} = \mathbf{A}\mathbf{c} + \mathbf{e}$, 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 $\mathbf{c}$ 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 $[0, 2]$

polyfit med grad d ger d:te grads polynomet $P(x, d)$.

För $d = 0, 1, \dots, N$

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

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

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

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

Minstakvadratmetoden VI

```

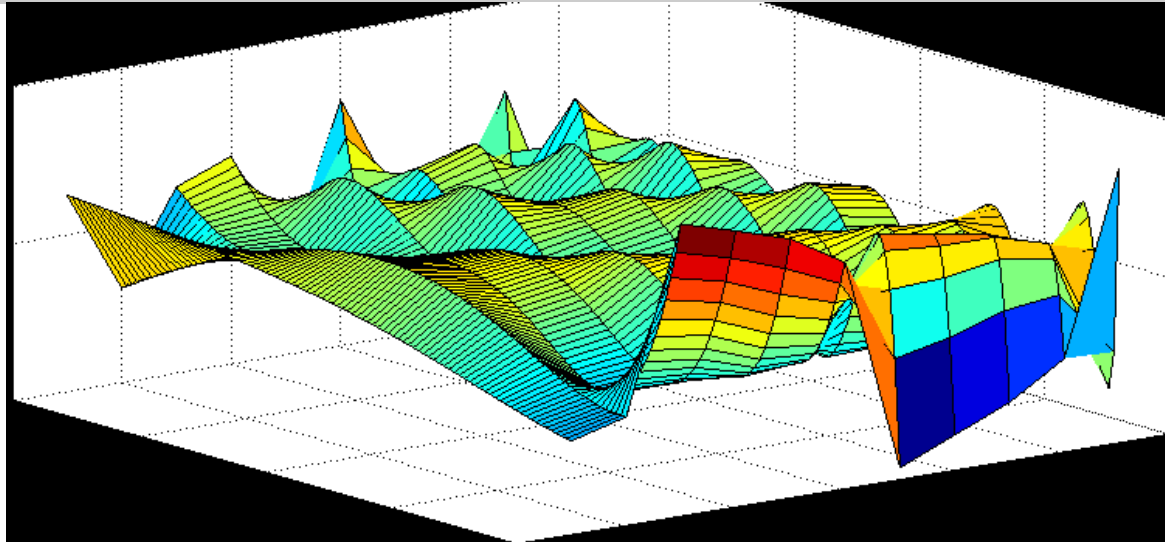
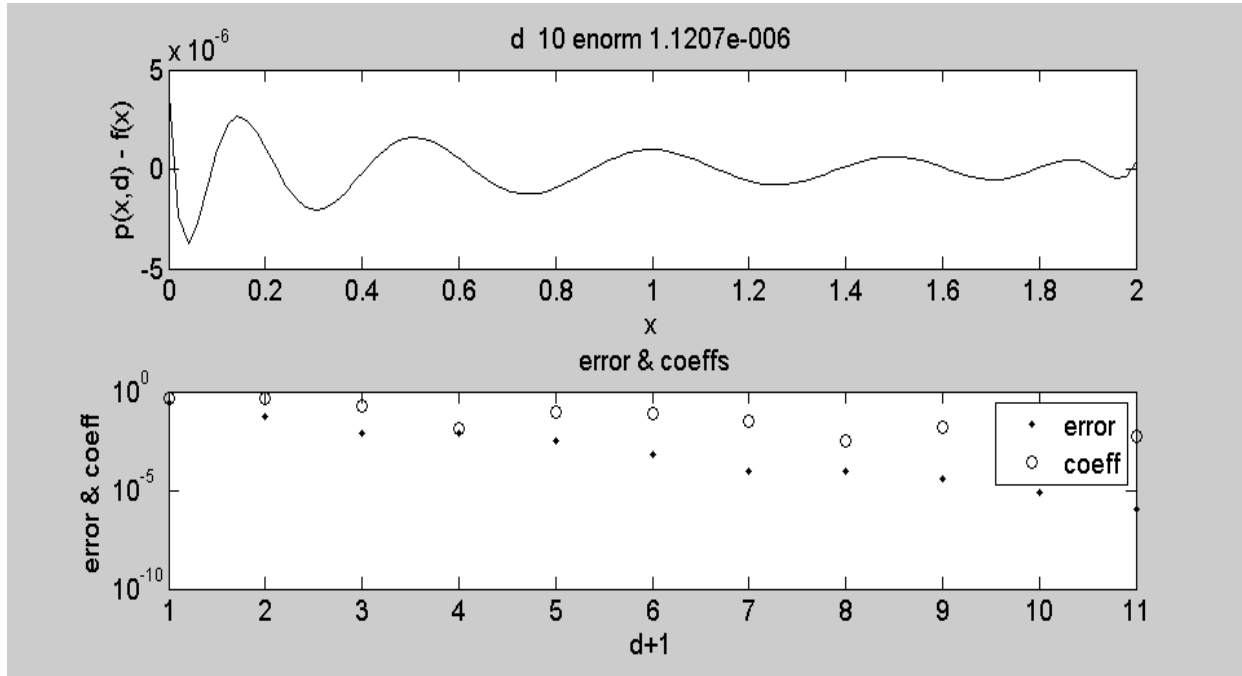
n = 100;
x = linspace(0,2,n)'; % ocentrerat !
f = 1./(x.^2+1+0.4*x);
N = 10;
etab = zeros(N+1,1); ctab = etab;
mm = zeros(length(x),N+1); % ska bli e sfa x & d
subplot(211)
for deg = 0:N
    c = polyfit(x,f,deg);
    e = polyval(c,x) - f;
    RMSe = norm(e)/sqrt(n);
    etab(deg+1) = RMSe;
    mm(:,deg+1) = e/RMSe;
    ctab(deg+1) = abs(c(1)); % högstagradscoeff
    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)

```

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

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

Minstakvadratmetoden VII



Minstakvadratmetoden VIII

Vad händer med ökat gradtal?

Prova 20, 40,...

- Illakonditionerat 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

