KAPITEL 5

Minstakvadratmetoden

Resultaten från ett experiment, det må vara fysikaliskt, medicinskt eller något annat, skrivs ofta i tabellform och ritas kanske också in i ett diagram. Tabellen och diagrammet bearbetas ibland på så sätt att en *kurva med lämplig form anpassas till mätvärdena,* så kallad *kurvanpassning.*

I allmänhet vill man att den sökta kurvan ska ha en viss *enkel* form, till exempel en rät linje. Denna grundläggande situation behandlas i avsnitt 5:2.

I avsnitt 5:3 formuleras approximationsproblemet allmänt, och den för det beskrivna anpassningsproblemet centrala *minstakvadratmetoden* presenteras. Problemet ger upphov till ett överbestämt ekvationssystem, varför avsnitt 5:1 inleder kapitlet med en kort presentation av denna sorts system.

I avsnitten 5:3B, C, D visas hur man på olika vägar kan härleda *normalekvationerna* i minstakvadratmetoden.

Om den *modellfunktion* som ska anpassas till givna data väljs olämpligt, blir normalekvationerna illa konditionerade. I avsnitt 5:3F rekommenderar vi därför *centrering* som en metod att dels förenkla det praktiska arbetet, dels förbättra konditionen.

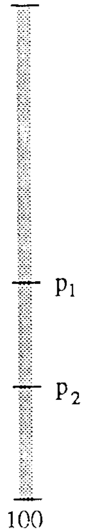
Om modellfunktionen är ickelinjär i de parametrar som bestämmer kurvans form, blir minstakvadratmetoden komplicerad. I vissa fall går det för sig att linearisera genom någon omskrivning av problemet; detta tar vi upp i avsnitt 5:3G. När inte det är möjligt, får man behandla det ickelinjära problemet med någon iterativ teknik. I avsnitt 5:4 visas med ett exempel en av de många metoder som finns.

Ur Pohl: Elementära numeriska metoder

5:1 ÖVERBESTÄMDA EKVATIONSSYSTEM

Ett linjärt ekvationssystem är *överbestämt* om antalet ekvationer är fler än antalet obekanta. I allmänhet finns ingen lösning som satisfierar alla ekvationerna exakt, utan man får försöka finna en så god approximativ lösning som möjligt.

EXEMPEL 5.1



Längs en hundrameters löparbana vill man ha markeringar vid 60 meter och 80 meter. Pelle, som anser sig ha enmeterskliv, stegar upp 60 steg och markerar platsen p_1. Från denna plats stegar han 20 steg till platsen p_2. Men därifrån till hundametersstrecket blir det bara 17 steg. Bäst att kontrollera, tycker Pelle och stegar tillbaka till p_1. Efter 38 steg är han där. Totalt finns nu fyra mätningar och två storheter att bestämma: $p_1 \approx 60$; $p_2 - p_1 \approx 20$; $100 - p_2 \approx 17$; $100 - p_1 \approx 38$. Vi får det överbestämda ekvationssystemet

$$\begin{cases} p_1 \approx 60 \\ -p_1 + p_2 \approx 20 \\ p_2 \approx 83 \\ p_1 \approx 62 \end{cases} \Rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -1 & 1 \\ 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} 60 \\ 20 \\ 83 \\ 62 \end{pmatrix}$$

Vi har fyra ekvationer men bara två obekanta storheter, p_1 och p_2. För att kunna lösa ut två obekanta krävs *två* ekvationer. Det gäller alltså att på listigt sätt kombinera de fyra ekvationerna så att informationen behålls men antalet ekvationer reduceras till två. Det överbestämda systemet kan skrivas i matrisform $\boldsymbol{Ap} \approx \boldsymbol{y}$ där $\boldsymbol{A}$ är 4×2-matrisen ovan. Genom multiplicering av båda leden med en lämplig matris med *två rader och fyra kolumner* åstadkommer man ett önskat litet system med två ekvationer och två obekanta. En matris med önskade dimensioner finns nära till hands, nämligen $\boldsymbol{A}^T$ — vi vet dock inte om den är lämplig för övrigt. Men det är värt att pröva! Bilda alltså $\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}$ och $\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{y}$:

$$\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -1 & 1 \\ 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 & -1 \\ -1 & 2 \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{y} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 60 \\ 20 \\ 83 \\ 62 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 102 \\ 103 \end{pmatrix}$$

Det överbestämda systemet ersätts av 2×2-systemet

$$\begin{pmatrix} 3 & -1 \\ -1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 102 \\ 103 \end{pmatrix}$$

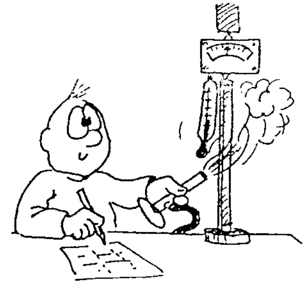
med lösningen $p_1 = 61.4$ och $p_2 = 82.2$. Vi sätter in de erhållna värdena på p_1 och p_2 i det ursprungliga ekvationssystemets vänsterled och jämför med högerledet — vi beräknar alltså *residualvektorn* $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{y} - \boldsymbol{Ap}$ (se i marginalen). Som synes är residualerna små och har varierande tecken. Den valda lösningsmetoden verkar vettig i detta fall. □

$$\begin{pmatrix} 60 \\ 20 \\ 83 \\ 62 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -1 & 1 \\ 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 61.4 \\ 82.2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1.4 \\ -0.8 \\ 0.8 \\ 0.6 \end{pmatrix}$$

Vi ska snart visa att den metod vi här har använt är *minstakvadratmetoden*, men vid härledningen ska vi följa några andra vägar. Nu, till att börja med, säger vi utan bevis:

> Lösningen i minstakvadratmetodens mening till det överbestämda linjära ekvationssystemet $\boldsymbol{Ac} \approx \boldsymbol{y}$ ges av lösningen till ekvationssystemet $\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{Ac} = \boldsymbol{A}^T\boldsymbol{y}$.

5:2 KURVANPASSNING

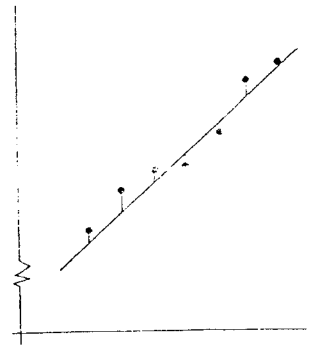


Kurvanpassning innebär att man försöker bestämma en (enkel) funktion så att funktionskurvan så bra som möjligt anpassar sig till givna datapunkter.

EXEMPEL 5.2

En stång upphettas och man avläser stångens längdökning y_i vid ökande temperaturer x_i och prickar in värdena i ett diagram. Man vet här att det finns ett linjärt samband mellan temperatur och längd. Att punkterna inte ligger exakt på rät linje beror på mätfel i observationerna. Med ögonmått och genomskinlig linjal går det riktigt bra att finna en acceptabel lösning — linjen anpassas så att några av punkterna hamnar strax över och andra strax under den. Det linjära sambandet kan skrivas

x	y
20	0.0
30	1.1
40	1.5
50	2.2
60	3.3
70	3.8
80	4.7



$$F(x) = c_1 + c_2x$$

Parametrarna c_1 och c_2 avläses ur den inritade linjen: c_1 är skärningspunkten med y-axeln och c_2 är linjens lutning. Sådan *grafisk teknik* fungerar bara om modellen är så enkel som här. I praktiken behöver man en bra numerisk metod för att ur tabellvärdena räkna fram parametrarna c_1 och c_2 i modellfunktionen $F(x)$. I detta fall har vi sju villkor för att bestämma två obekanta enligt ekvationssystemet nedan. Vi vill att avvikelserna mellan högerled och vänsterled ska vara så små som möjligt:

$$\begin{cases} c_1 + 20c_2 \approx 0.0 \\ c_1 + 30c_2 \approx 1.1 \\ c_1 + 40c_2 \approx 1.5 \\ c_1 + 50c_2 \approx 2.2 \\ c_1 + 60c_2 \approx 3.3 \\ c_1 + 70c_2 \approx 3.8 \\ c_1 + 80c_2 \approx 4.7 \end{cases} \Rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 20 \\ 1 & 30 \\ 1 & 40 \\ 1 & 50 \\ 1 & 60 \\ 1 & 70 \\ 1 & 80 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} 0.0 \\ 1.1 \\ 1.5 \\ 2.2 \\ 3.3 \\ 3.8 \\ 4.7 \end{pmatrix}$$

Därmed har som synes kurvanpassningsproblemet förvandlats till problemet att behandla ett överbestämt ekvationssystem. Vi använder därför den metod vi tog till i exempel 5.1, dvs multiplicerar systemet $\boldsymbol{Ac} = \boldsymbol{y}$ med $\boldsymbol{A}^T$,

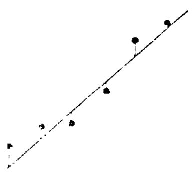
$$\boldsymbol{A}^T = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 20 & 30 & 40 & 50 & 60 & 70 & 80 \end{pmatrix}$$

Det överbestämda systemet ersätts då av 2×2-systemet

$$\begin{pmatrix} 7 & 350 \\ 350 & 20300 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 16.6 \\ 1043.0 \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{r} = \begin{pmatrix} -0.0893 \\ 0.2500 \\ -0.1107 \\ -0.1714 \\ 0.1679 \\ -0.0929 \\ 0.0465 \end{pmatrix}$$

med lösningen $c_1 = -1.4321$ och $c_2 = 0.07607$. Vi beräknar residualvektorn $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{y} - \boldsymbol{Ac}$ (se i marginalen), dvs sätter in de erhållna värdena på c_1 och c_2 i det ursprungliga systemets vänsterled och jämför med högerledet. Som synes är residualerna små och har varierande tecken. Den valda lösningsmetoden verkar vettig även i detta fall. □



Minstakvadratmetoden innebär att c_1 och c_2 i den räta linjen $F(x) = c_1 + c_2x$ bestäms så att ***summan av kvadraterna på avvikelserna*** $y_i - F(x_i)$ ***minimeras.***

Det finns andra sätt att försöka göra god anpassning: man kan försöka placera den räta linjen så att den ***största avvikelsen*** blir så liten som möjligt eller så att ***summan av beloppen av alla avvikelserna*** minimeras. Men för dessa båda minimeringsproblem är beräkningsalgoritmen mycket besvärligare än algoritmen för minstakvadratmetoden, som därför i praktiken har blivit den mest omtyckta kurvanpassningsmetoden.

Vi har här betraktat och kommer även i fortsättningen att studera de *vertikala* avvikelserna mellan mätpunkter och modell. Det betraktelsesättet förutsätter att felen i observationerna y_i är betydligt större än osäkerheten i x-värdena. De flesta mätexperiment brukar vara upplagda så att detta gäller.

5:3 LINJÄRA MINSTAKVADRATPROBLEM

5:3A PROBLEMETS FORMULERING

Betrakta kurvanpassningsproblemet i en allmännare form:

Givet är en uppsättning data (x_i, y_i), $i = 1, 2, \ldots, m$.

Ansätt en *modellfunktion*

$$F(x) = c_1\varphi_1(x) + c_2\varphi_2(x) + \ldots + c_n\varphi_n(x),$$

där $\varphi_1(x)$, $\varphi_2(x)$, ..., $\varphi_n(x)$ är givna ***basfunktioner*** med enkel matematisk form.

Problemet är att bestämma parametrarna $c_1, c_2, \ldots, c_n$ så att summan av kvadraterna på avvikelserna $y_i - F(x_i)$ minimeras, alltså att minimera $Q(c_1, c_2, \ldots, c_n) = \sum_{i=1}^{m}(y_i - F(x_i))^2$.

Modellfunktionen kan som i exempel 5.2 ha formen
$F(x) = c_1 + c_2x$ (då är basfunktionerna $\varphi_1(x) = 1$, $\varphi_2(x) = x$),
eller vara ett andragradspolynom:
$F(x) = c_1 + c_2x + c_3x^2$, då $\varphi_1(x) = 1$, $\varphi_2(x) = x$, $\varphi_3(x) = x^2$.
Trigonometriska uttryck är tillåtna, till exempel
$F(x) = c_1 \sin x + c_2 \cos x$, där $\varphi_1(x) = \sin x$, $\varphi_2(x) = \cos x$,
eller exponentialuttryck:
$F(x) = c_1 + c_2e^{-2x}$, med basfunktionerna $\varphi_1(x) = 1$, $\varphi_2(x) = e^{-2x}$, eller blandade uttryck som
$F(x) = c_1x + c_2 \cdot \frac{1}{x} + c_3 \cos x$, med $\varphi_1(x) = x$, $\varphi_2(x) = \frac{1}{x}$, $\varphi_3(x) = \cos x$.

Modellfunktionen ska alltså skrivas som en ***linjär kombination*** av de på förhand valda basfunktionerna $\varphi_1, \varphi_2, \ldots, \varphi_n$, som ska vara ***linjärt oberoende.***

Funktionen $c_1 + c_2 \sin^2 x + c_3 \cos^2 x$ duger inte till modellfunktion, ty basfunktionerna är linjärt beroende: $\sin^2 x + \cos^2 x = 1$.

5:3B NORMALEKVATIONERNA

Vi ska härleda minstakvadratmetoden för fallet med två parametrar, alltså då $F(x) = c_1\varphi_1(x) + c_2\varphi_2(x)$. Teorin kan sedan lätt utsträckas till det allmänna fallet då $F(x)$ är en linjärkombination av n basfunktioner.

Givet är tabellvärdena $(x_i, y_i), i = 1, 2, \ldots, m$ som kan representeras av kolumnvektorerna $\boldsymbol{x}$ och $\boldsymbol{y}$. Bestäm c_1 och c_2 så att $Q(c_1, c_2)$ minimeras där

$$Q(c_1, c_2) = \sum_{i=1}^{m}(y_i - F(x_i))^2 = \sum_{i=1}^{m}(c_1\varphi_1(x_i) + c_2\varphi_2(x_i) - y_i)^2.$$

Genom att beräkna $\frac{\partial Q}{\partial c_1}$ och $\frac{\partial Q}{\partial c_2}$ och sätta derivatorna lika med noll får vi två ekvationer för att bestämma c_1 och c_2:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial Q}{\partial c_1} = \displaystyle\sum_{i=1}^{m} 2\varphi_1(x_i)\cdot(c_1\varphi_1(x_i) + c_2\varphi_2(x_i) - y_i) = 0\,, \\ \dfrac{\partial Q}{\partial c_2} = \displaystyle\sum_{i=1}^{m} 2\varphi_2(x_i)\cdot(c_1\varphi_1(x_i) + c_2\varphi_2(x_i) - y_i) = 0\,, \end{cases}$$

vilket också kan skrivas

$$\begin{cases} c_1\sum_i \varphi_1(x_i)\cdot\varphi_1(x_i) + c_2\sum_i \varphi_1(x_i)\cdot\varphi_2(x_i) = \sum_i \varphi_1(x_i)y_i\,, \\ c_1\sum_i \varphi_2(x_i)\cdot\varphi_1(x_i) + c_2\sum_i \varphi_2(x_i)\cdot\varphi_2(x_i) = \sum_i \varphi_2(x_i)y_i\,. \end{cases}$$

Ekvationerna, som kallas för *normalekvationerna*, kan skrivas kortare om vi inför vektorbeteckningar $\boldsymbol{\varphi}_1$ och $\boldsymbol{\varphi}_2$:

$$\boldsymbol{\varphi}_1 = \begin{pmatrix} \varphi_1(x_1) \\ \varphi_1(x_2) \\ \vdots \\ \varphi_1(x_m) \end{pmatrix} \qquad \boldsymbol{\varphi}_2 = \begin{pmatrix} \varphi_2(x_1) \\ \varphi_2(x_2) \\ \vdots \\ \varphi_2(x_m) \end{pmatrix}$$

I summorna ovan känner vi nämligen igen uttryck för skalärprodukter av vektorer. Normalekvationerna kan alltså skrivas:

$$\begin{cases} c_1\boldsymbol{\varphi}_1^T\boldsymbol{\varphi}_1 + c_2\boldsymbol{\varphi}_1^T\boldsymbol{\varphi}_2 = \boldsymbol{\varphi}_1^T\boldsymbol{y} \\ c_1\boldsymbol{\varphi}_2^T\boldsymbol{\varphi}_1 + c_2\boldsymbol{\varphi}_2^T\boldsymbol{\varphi}_2 = \boldsymbol{\varphi}_2^T\boldsymbol{y} \end{cases} \Rightarrow \begin{pmatrix} \boldsymbol{\varphi}_1^T\boldsymbol{\varphi}_1 & \boldsymbol{\varphi}_1^T\boldsymbol{\varphi}_2 \\ \boldsymbol{\varphi}_2^T\boldsymbol{\varphi}_1 & \boldsymbol{\varphi}_2^T\boldsymbol{\varphi}_2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\varphi}_1^T\boldsymbol{y} \\ \boldsymbol{\varphi}_2^T\boldsymbol{y} \end{pmatrix}$$

Genom att lösa detta lilla system bestämmer man parametrarna c_1 och c_2.

5:3C MATRISFORMULERING

Vi skriver ut sambanden $F(x_i) \approx y_i$, $i = 1, 2, \ldots, m$ som ett överbestämt ekvationssystem med vänsterleden $F(x_i) = c_1\varphi_1(x_i) + c_2\varphi_2(x_i)$:

$$\begin{cases} c_1\varphi_1(x_1) + c_2\varphi_2(x_1) \approx y_1 \\ c_1\varphi_1(x_2) + c_2\varphi_2(x_2) \approx y_2 \\ \qquad\vdots \\ c_1\varphi_1(x_m) + c_2\varphi_2(x_m) \approx y_m \end{cases}$$

eller $\boldsymbol{Ac} \approx \boldsymbol{y}$ med $\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} \varphi_1(x_1) & \varphi_2(x_1) \\ \varphi_1(x_2) & \varphi_2(x_2) \\ \vdots & \vdots \\ \varphi_1(x_m) & \varphi_2(x_m) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} | & | \\ \boldsymbol{\varphi}_1 & \boldsymbol{\varphi}_2 \\ | & | \end{pmatrix}$.

Matrisen $\boldsymbol{A}$ är uppbyggd av två kolumner som vi känner igen som vektorerna $\boldsymbol{\varphi}_1$ och $\boldsymbol{\varphi}_2$. Det betyder att den transponerade matrisen $\boldsymbol{A}^T$ kan skrivas

$$\boldsymbol{A}^T = \begin{pmatrix} - \boldsymbol{\varphi}_1^T - \\ - \boldsymbol{\varphi}_2^T - \end{pmatrix}.$$

Multipliceras $\boldsymbol{A}^T$ med $\boldsymbol{A}$ erhålls

$$\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\varphi}_1^T\boldsymbol{\varphi}_1 & \boldsymbol{\varphi}_1^T\boldsymbol{\varphi}_2 \\ \boldsymbol{\varphi}_2^T\boldsymbol{\varphi}_1 & \boldsymbol{\varphi}_2^T\boldsymbol{\varphi}_2 \end{pmatrix}$$

vilket ju är systemmatrisen i normalekvationerna ovan.

Vi bildar $\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{y} = \begin{pmatrix} - \boldsymbol{\varphi}_1^T - \\ - \boldsymbol{\varphi}_2^T - \end{pmatrix}\boldsymbol{y} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\varphi}_1^T\boldsymbol{y} \\ \boldsymbol{\varphi}_2^T\boldsymbol{y} \end{pmatrix}$ som är identiskt med högerleden i normalekvationerna. Matrisformuleringen av normalekvationerna blir alltså $\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{c} = \boldsymbol{A}^T\boldsymbol{y}$.

5:3D GEOMETRISK TOLKNING

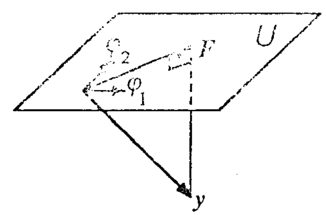
Det går att komma fram till normalekvationerna även utan derivering, om vi i stället försöker oss på en geometrisk tolkning av problemet att finna minstakvadratlösningen till det överbestämda ekvationssystemet $F(x_i) \approx y_i$, $i = 1, 2, \ldots, m$.

Vi skriver systemet på vektorformen $\boldsymbol{F} \approx \boldsymbol{y}$ där vektorn $\boldsymbol{F}$ utgörs av linjärkombinationen $\boldsymbol{F} = c_1\boldsymbol{\varphi}_1 + c_2\boldsymbol{\varphi}_2$.

Vektorerna $\boldsymbol{\varphi}_1$ och $\boldsymbol{\varphi}_2$ är kända medan c_1 och c_2 är okända, men de ska bestämmas så att summan av avvikelsernas kvadrater minimeras. I vektorsammanhang innebär det att man betraktar den *euklidiska normen* för $\boldsymbol{y} - \boldsymbol{F}$, ty enligt definitionen gäller:

$$\| \boldsymbol{y} - \boldsymbol{F} \|_2^2 = \sum_{i=1}^{m}(y_i - F(x_i))^2.$$

Man ska minimera den euklidiska normen $\| \boldsymbol{y} - \boldsymbol{F} \|_2$ (egentligen dess kvadrat, men det förändrar inte problemet). Minstakvadratproblemet kan alltså formuleras: *Sök den vektor $\boldsymbol{F}$ som gör längden av residualvektorn $\boldsymbol{y} - \boldsymbol{F}$ så liten som möjligt.*



Starta med vektorerna $\boldsymbol{\varphi}_1$ och $\boldsymbol{\varphi}_2$ (se figur). Mängden av alla linjärkombinationer av $\boldsymbol{\varphi}_1$ och $\boldsymbol{\varphi}_2$ dvs $a_1\boldsymbol{\varphi}_1 + a_2\boldsymbol{\varphi}_2$ bildar ett plan U. Den givna vektorn $\boldsymbol{y}$ tillhör inte detta plan annat än i undantagsfall (den kan i allmänhet inte skrivas som linjärkombination av $\boldsymbol{\varphi}_1$ och $\boldsymbol{\varphi}_2$). Däremot tillhör den sökta vektorn $\boldsymbol{F}$ planet U, eftersom den ansatts på formen $c_1\boldsymbol{\varphi}_1 + c_2\boldsymbol{\varphi}_2$.

Problemet är nu att i planet U finna den vektor som har det kortaste avståndet till den givna vektorn $\boldsymbol{y}$. Lösningen får man av det välkända förhållandet att det vinkelräta avståndet från en punkt till ett plan är det kortaste. Vektorn $\boldsymbol{y} - \boldsymbol{F}$ ska därför vara ortogonal mot planet. I planet ligger ju vektorerna $\boldsymbol{\varphi}_1$ och $\boldsymbol{\varphi}_2$, alltså gäller att $\boldsymbol{y} - \boldsymbol{F}$ ska vara ortogonal mot såväl $\boldsymbol{\varphi}_1$ som $\boldsymbol{\varphi}_2$. Två vektorer är ortogonala om deras skalärprodukt är lika med noll. Det innebär följande:

$$\varphi_1^T(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{F})=0 \text{ och } \varphi_2^T(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{F})=0, \text{ dvs}$$

$$\varphi_1^T\boldsymbol{F}=\varphi_1^T\boldsymbol{y} \text{ och } \varphi_2^T\boldsymbol{F}=\varphi_2^T\boldsymbol{y}.$$

Sätt in uttrycket för $\boldsymbol{F}$ i vänsterleden, så erhålls

$$\begin{cases} \varphi_1^T(c_1\varphi_1+c_2\varphi_2)=\varphi_1^T\boldsymbol{y}, \\ \varphi_2^T(c_1\varphi_1+c_2\varphi_2)=\varphi_2^T\boldsymbol{y} \end{cases},$$

som lite omformulerat blir

$$\begin{cases} c_1\varphi_1^T\varphi_1+c_2\varphi_1^T\varphi_2=\varphi_1^T\boldsymbol{y}, \\ c_1\varphi_2^T\varphi_1+c_2\varphi_2^T\varphi_2=\varphi_2^T\boldsymbol{y}, \end{cases}$$

dvs de tidigare erhållna normalekvationerna.

Egenskapen att residualvektorn $\boldsymbol{y}-\boldsymbol{F}$ är ortogonal mot vektorerna φ_1 och φ_2 kan användas som en kontroll av den erhållna lösningen. Bilda nämligen $\boldsymbol{r}=\boldsymbol{y}-\boldsymbol{F}$ och beräkna skalärprodukterna $\varphi_1^T\boldsymbol{r}$ och $\varphi_2^T\boldsymbol{r}$. På grund av ortogonaliteten ska dessa produkter i teorin bli noll, men i praktiken får man en liten avvikelse från noll på grund av avrundningsfelens inverkan.

5:3E MINSTAKVADRATLÖSNING, ALLMÄNNA FALLET

I det nyss behandlade fallet fanns bara två obekanta parametrar i formeln för modellfunktionen. Det är emellertid inte någon större svårighet att utsträcka teorin och härledningen till det allmänna fallet $\boldsymbol{F}=c_1\varphi_1+\ldots+c_n\varphi_n$.

> *Minstakvadratlösning*, allmänna fallet:
> $c_1, c_2, \ldots, c_n$ erhålls ur normalekvationerna
>
> $$\begin{cases} c_1\varphi_1^T\varphi_1+c_2\varphi_1^T\varphi_2+\ldots+c_n\varphi_1^T\varphi_n=\varphi_1^T\boldsymbol{y} \\ c_1\varphi_2^T\varphi_1+c_2\varphi_2^T\varphi_2+\ldots+c_n\varphi_2^T\varphi_n=\varphi_2^T\boldsymbol{y} \\ \vdots \\ c_1\varphi_n^T\varphi_1+c_2\varphi_n^T\varphi_2+\ldots+c_n\varphi_n^T\varphi_n=\varphi_n^T\boldsymbol{y} \end{cases}$$
>
> Matrisformuleringen av normalekvationerna blir
>
> $$\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{c}=\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{y}$$
>
> där matrisen $\boldsymbol{A}$ består av kolumnerna $\varphi_1, \varphi_2, \ldots, \varphi_n$.

5:3F VAL AV BASFUNKTIONER

Normalekvationerna utgör ett ekvationssystem med några trevliga egenskaper: systemmatrisen $\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}$ har liten ordning jämfört med ursprungliga matrisen $\boldsymbol{A}$, och $\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}$ är symmetrisk. Tyvärr finns också en sämre egenskap: det är lätt hänt att $\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}$ får ett mycket stort konditionstal. Det innebär att små avrundningsfel i matrisen eller små beräkningsfel som införs under lösningens gång fortplantas kraftigt och kan ha förödande effekt på de beräknade parametrarna. I kurvanpassningsproblem där modellfunktionen är ett polynom kan en enkel *centrering* förbättra konditionen avsevärt.

EXEMPEL 5.3

Vi ska tillämpa centrering på problemet i exempel 5.2. Där skrevs det linjära sambandet: $F(x)=c_1+c_2x$ men vi skulle lika gärna ha kunnat skriva uttrycket:

$$F(x)=a_1+a_2\cdot(x-s)$$

där s är ett lämpligt valt *centreringstal.* Teoretiskt sett är ansatserna ekvivalenta: $a_2=c_2$ (linjens lutningskoefficient), och $a_1-sa_2=c_1$ (konstanttermen), men beräkningsmässigt är den centrerade formen med valet $s=x_{medel}=50$ mycket bättre.

x	y
20	0.0
30	1.1
40	1.5
50	2.2
60	3.3
70	3.8
80	4.7

Basfunktionerna är nu $\varphi_1(x)=1$ och $\varphi_2(x)=x-50$. I vektorform får vi φ_1 och φ_2 så som anges här i marginalen.

$$\varphi_1=\begin{pmatrix}1\\1\\1\\1\\1\\1\\1\end{pmatrix} \quad \varphi_2=\begin{pmatrix}-30\\-20\\-10\\0\\10\\20\\30\end{pmatrix}$$

Normalekvationerna blir

$$\begin{pmatrix}7 & 0\\0 & 2800\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_1\\a_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}16.6\\213.0\end{pmatrix}$$

med lösningen $a_1=2.3714$, $a_2=0.07607$.
Den räta linjen blir alltså $F(x)=2.3714+0.07607(x-50)$.
Matrisen $\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}$ får nu ett konditionstal på 400 i stället för 22000 som matrisen har i den icke-centrerade ansatsen. Vi vinner som synes en hel del med centreringen: dels förbättras konditionen, dels blir räkningarna mycket enklare. □

Det är lätt att övertyga sig om att polynomet ovan är samma som det vi fick i exempel 5.2, $F(x)=-1.4321+0.07607x$. Man bör emellertid inte skriva polynomet på detta sätt, utan behålla det på den centrerade formen, eftersom denna i allmänhet har bättre egenskaper vid användning i beräkningar.

5:4 ICKELINJÄRA MINSTAKVADRATPROBLEM

För vissa modellfunktioner kan man inte skriva om problemet till ett linjärt minstakvadratproblem. Vi ska därför titta på en teknik att hantera ett sådant fall:

x	y
0.0	5.98218
0.1	5.58742
0.2	5.23262
0.3	4.93128
0.4	4.65586
0.5	4.42148
0.6	4.21366

Anpassa modellfunktionen $F(x) = c_1 + c_2 e^{-c_3 x}$ till mätdata i tabellen i marginalen.

Minstakvadratmetoden innebär som vanligt att välja parametrarna så att man minimerar

$$Q(c_1, c_2, c_3) = \sum_{i=1}^{7} (y_i - F(x_i))^2 ,$$

Om vi återvänder till härledningen av normalekvatinerna i avsnitt 5:3B, så ser vi att de uppkommer genom att man deriverar Q med avseende på en parameter i taget och sätter derivatan till noll:

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{\partial Q}{\partial c_1} &= \sum_{i=1}^{7}(-2)(y_i - F(x_i)) = 0 , \\ \frac{\partial Q}{\partial c_2} &= \sum_{i=1}^{7}(-2)e^{-c_3 x_i}(y_i - F(x_i)) = 0 , \\ \frac{\partial Q}{\partial c_3} &= \sum_{i=1}^{7} 2x_i e^{-c_3 x_i}(y_i - F(x_i)) = 0 . \end{aligned} \right.$$

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & e^{-0.1c_3} \\ 1 & e^{-0.2c_3} \\ 1 & e^{-0.3c_3} \\ 1 & e^{-0.4c_3} \\ 1 & e^{-0.5c_3} \\ 1 & e^{-0.6c_3} \end{pmatrix}$$

$$A^T A = \begin{pmatrix} 7 & \sum_i e^{-c_3 x_i} \\ \sum_i e^{-c_3 x_i} & \sum_i e^{-2c_3 x_i} \end{pmatrix}$$

$$A^T y = \begin{pmatrix} \sum_i y_i \\ \sum_i y_i e^{-c_3 x_i} \end{pmatrix}$$

Det här är ett ickelinjärt ekvationssystem som tycks rätt besvärligt att lösa. Vi provar att gå runt besvärligheterna genom att helt enkelt gissa något värde på c_3. Då får vi kvar ett linjärt minstakvadratproblem för parametrarna c_1 och c_2. Vi visar A här i marginalen (parametern c_3 har alltså ett gissat värde). Normalekvationerna ger nu c_1 och c_2 på vanligt sätt.

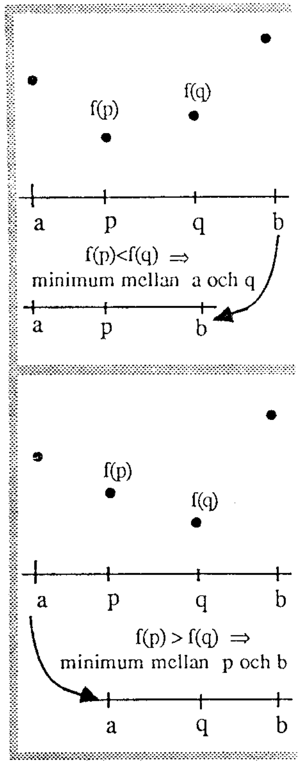
Nu får vi förstås inte den rätta lösningen (utom i det osannolikt tursamma fallet att vi gissade rätt c_3-värde), men vi kan sätta in c_1, c_2 och c_3 och få ett Q-värde.

Sedan gissar vi ett nytt c_3-värde och upprepar hela proceduren. Om det nya Q-värdet blir mindre än det gamla, så var den nya gissningen bättre.

Så här kan vi fortsätta, men välja nya c_3-värden systematiskt istället för att gissa, sedan ställa upp normalekvationerna och bestämma c_1 och c_2 samt avläsa Q-värden, tills det inte går att få Q mindre.

Metoden innebär alltså att ett ickelinjärt problem löses med *iteration*, där i varje iterationssteg ett linjärt problem behandlas.

Valet av nya c_3-värden kan göras på olika finurliga sätt. Vi använder en enkel metod för att finna minimum av en funktion av en variabel (c_3 i det här fallet) och tar hjälp av figuren här i marginalen för att förklara metoden. Den utgår från att det finns en enda minimipunkt och att man har lyckats stänga in denna i ett intervall $[a, b]$. Beroende på hur funktionsvärdena i två valda inre punkter i intervallet förhåller sig kan minimipunkten stängas in i ett mindre intervall. Så håller man på tills intervallet är tillräckligt kort för att man ska vara nöjd.



Även minimeringsmetoden innebär alltså *iteration*, där i varje iterationssteg en funktionsberäkning görs (Q beräknas). Ja, vi säger *en* funktionsberäkning, trots att det i figuren ser ut som två. Man utnyttjar nämligen i nästa iterationssteg att man redan har beräknat funktionsvärdet i en inre punkt, och gör alltså bara en funktionsberäkning till.

Vi visar här resultatet av en sådan körning (parametrarna är uppställda i den här ordningsföljden eftersom c_1 och c_2 bestäms efter att c_3 har tilldelats ett värde):

c_3	c_1	c_2	Q
1.0000	2.0390	3.9227	$1.57961 \cdot 10^{-3}$
2.0000	3.5036	2.5262	$8.49232 \cdot 10^{-3}$
1.3333	2.7717	3.2140	$5.48455 \cdot 10^{-5}$
1.2798	2.6798	3.3021	$3.46342 \cdot 10^{-5}$
1.2872	2.6928	3.2896	$3.14693 \cdot 10^{-5}$
1.2904	2.6986	3.2841	$3.06665 \cdot 10^{-5}$
1.2976	2.7112	3.2720	$3.02120 \cdot 10^{-5}$
1.2970	2.7101	3.2731	$3.01782 \cdot 10^{-5}$
1.2961	2.7086	3.2745	$3.01556 \cdot 10^{-5}$
1.2956	2.7076	3.2755	$3.01548 \cdot 10^{-5}$
1.2959	2.7081	3.2750	$3.01538 \cdot 10^{-5}$
1.2957	2.7079	3.2751	$3.01538 \cdot 10^{-5}$
1.2958	2.7080	3.2750	$3.01537 \cdot 10^{-5}$

Lösningen blir alltså $F(x) = 2.7080 + 3.2750e^{-1.2958x}$.

Q-värdena går snabbt ner till $\approx 3.0 \cdot 10^{-5}$ och håller sig där, även vid förhållandevis stora ändringar i parametrarna. Detta är det normala beteendet i okomplicerade kurvanpassningsproblem. Det är det som gör att man, när det är möjligt, vågar linearisera problemet i stil med vad vi har visat i exempel 5.5. Skillnaden mellan vad man då får och vad man skulle få med den ickelinjära modellfunktionen är liten, men skillnaden i arbete är betydande.