

6.4 Minsta-kvadrat-metoden

Vissa linjära ekvationssystem (i synnerhet överbestämda) saknar lösning.

Då är det önskvärt att hitta en "approximativ lösning": Dvs. om för givna $A, \vec{y}$ det inte finns någon uppsättning $\vec{x}$ så att $A\vec{x} = \vec{y}$, så vill vi komma fram till något $\vec{x}$ så att $A\vec{x} \approx \vec{y}$ i en mening som vi snart preciserar.

Minsta-kvadrat-metoden är ett sätt att fastställa hur vi mäter "nära" och hitta en sådan approximativ lösning $\vec{x}$ med egenskapen att $A\vec{x}$ är nära $\vec{y}$.

Vi börjar med ett exempel:

$$A\vec{x} = \vec{y} \quad \text{där} \quad A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \\ -2 & 3 \end{pmatrix} \quad \text{och} \quad \vec{y} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix} \quad (\text{överbestämt})$$

$$\left[\begin{array}{cc|c} 1 & 2 & 0 \\ 2 & 1 & 1 \\ -2 & 3 & 2 \end{array} \right] \Leftrightarrow \left[\begin{array}{cc|c} 1 & 2 & 0 \\ 0 & -3 & 1 \\ 0 & 7 & 2 \end{array} \right] \Leftrightarrow \left[\begin{array}{cc|c} 1 & 2 & 0 \\ 0 & -3 & 1 \\ 0 & 0 & 13 \end{array} \right] \rightarrow \text{lösning saknas}$$

"Minsta kvadrat" syftar då på att hitta $\vec{x}$ så att $\|A\vec{x} - \vec{y}\|$ minimeras.

(Om systemet inte saknar lösning kan vi såklart välja ett $\vec{x}$ med $\|A\vec{x} - \vec{y}\| = 0$)

som tidigare observerat (som följd av [Sats 6.2](#)) är om $A = (\vec{a}_1 \dots \vec{a}_m)$ och $\vec{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_m \end{pmatrix}$

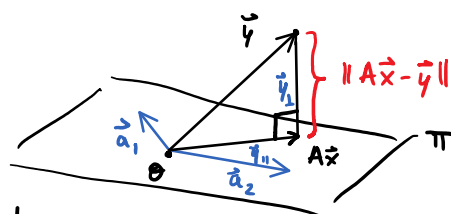
$$A\vec{x} = x_1 \vec{a}_1 + \dots + x_m \vec{a}_m.$$

I fallet ovan där A har form 3×2 har vi $A\vec{x} = x_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ -2 \end{pmatrix} + x_2 \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ 3 \end{pmatrix}$

vilket ($x_1, x_2 \in \mathbb{R}$ är godtyckliga) är parameterformen av ett plan π som spänns upp av vektorerna $\vec{a}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ -2 \end{pmatrix}$ och $\vec{a}_2 = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ 3 \end{pmatrix}$ och origo ligger i.

Vi har sett att $\vec{y} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix}$ inte ligger i planet π och då gäller det att hitta närmaste punkt $A\vec{x}$ i planet till $\vec{y}$:

Låt oss skriva $\vec{r} = A\vec{x} - \vec{y}$ för kortaste skillnaden, som kallas **residualvektor**.



Som vi vet från kapitlet om geometri och vektorer är det den ortogonala projektionen av $\vec{y}$ på π som är närmast

till $\vec{y}$, alltså när $\vec{r} \parallel \vec{n}$ (normalvektor till π) dvs. $\vec{r} \perp \vec{a}_1$ och $\vec{r} \perp \vec{a}_2$

I exemplet ovan är $\vec{r} = A\vec{x} - \vec{y} = \begin{pmatrix} x_1 + 2x_2 \\ 2x_1 + x_2 \\ -2x_1 + 3x_2 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 + 2x_2 \\ 2x_1 + x_2 - 1 \\ -2x_1 + 3x_2 - 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_1 \\ r_2 \\ r_3 \end{pmatrix}$

och $\vec{a}_1 \cdot \vec{r} = 0$ samt $\vec{a}_2 \cdot \vec{r} = 0$ kan

$$\text{skrivs som} \quad \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 2 & -2 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix}}_{= A^T} \underbrace{\begin{pmatrix} r_1 \\ r_2 \\ r_3 \end{pmatrix}}_{\vec{r}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{dvs.} \quad A^T \vec{r} = A^T (A\vec{x} - \vec{y}) = \vec{0}$$

Då har vi kommit fram till den så kallade **normal ekvationen** till vårt eq. system $A\vec{x} = \vec{y}$ nämligen

$$A^T A \vec{x} = A^T \vec{y}$$

Exempel: $A^T A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & -2 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \\ -2 & 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 9 & -2 \\ -2 & 14 \end{pmatrix}$, $A^T \vec{y} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & -2 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -2 \\ 7 \end{pmatrix}$
 alltså $A^T A \vec{x} = A^T \vec{y} \Leftrightarrow \begin{pmatrix} 9 & -2 \\ -2 & 14 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -2 \\ 7 \end{pmatrix} \Leftrightarrow (x_1, x_2) = \begin{pmatrix} -\frac{7}{61} \\ \frac{59}{122} \end{pmatrix}$.
 $= A^T A \Rightarrow (A^T A)^{-1} = \frac{1}{122} \begin{pmatrix} 14 & 2 \\ 2 & 9 \end{pmatrix}$

- Om vi har fler ekvationer (än tre som i exemplet) kommer raderna $\vec{a}_1, \dots, \vec{a}_m$ ha större dimension och vår geometriska tolkning fungerar inte längre.
 Själva argumentet att avståndet minimeras av den ortogonala projektionen hålls fortfarande, dvs. överett dimension är den minsta-kvadrat-approximationen till systemet $A\vec{x} = \vec{y}$ (som möjligtvis saknar lösning, t.ex. om överbestämt) en lösning till motsvarande normalekvation $A^T A \vec{x} = A^T \vec{y}$.
- Att normalekvationen har lösning följer ur uppdelningen $\vec{y} = \vec{y}_{||} + \vec{y}_{\perp}$, där $\vec{y}_{||}$ ligger i π , $\vec{y}_{\perp}$ är $\perp$ mot alla kolonner $\vec{a}_i$ av A . [och $\vec{x}$ ges då av koefficienter i linjärkombinationen $\vec{y}_{||} = x_1 \vec{a}_1 + \dots + x_m \vec{a}_m \in \pi$].
- Vi kommer se i nästa kapitel att lösningen till normalekvationen är entydig om och endast om kolonnerna $\vec{a}_1, \dots, \vec{a}_m$ av A är linjärt oberoende.

Hur är det egentligen när $A\vec{x} = \vec{y}$ inte är överbestämt men ändå saknar lösning?

Ex.: $A = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 2 \\ -2 & 2 & -4 \end{pmatrix}$, $\vec{y} = \begin{pmatrix} -3 \\ 7 \end{pmatrix}$ (underbestämt)

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 1 & -1 & 2 & -3 \\ -2 & 2 & -4 & 7 \end{array} \right] \Leftrightarrow \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & -1 & 2 & -3 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{array} \right] \text{ saknar lösning}$$

Vi kommer gå in på det senare i detalj: varje matris har en så kallad rang, som ges av dimensionen av det kolonnerna spänner upp och dimension av det raderna spänner upp.

Här är alla rader (och alla kolonner) parallella alltså $\text{rang}(A) = 1$.

$$A\vec{x} = x_1 \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \end{pmatrix} + x_2 \begin{pmatrix} -1 \\ 2 \end{pmatrix} + x_3 \begin{pmatrix} 2 \\ -4 \end{pmatrix} = \overbrace{(x_1 - x_2 + 2x_3)}^{=: z} \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \end{pmatrix}.$$

Då x_1, x_2, x_3 är godtyckliga är ekv. systemet ekvivalent med $\begin{cases} z = -3 \\ -2z = 7 \end{cases}$ som är överbestämt.

Kurvans passning

En av de viktigaste tillämpningar av minsta-kvadrat-metoden är kurvanspassning. Det handlar då om att beskriva en mängd av data med en funktion (ur en förbestämd klass) så bra det bara går.

Ex.: Mät data vi fick är

x	0	1	2	3
y	0.5	1.1	1.4	1.9

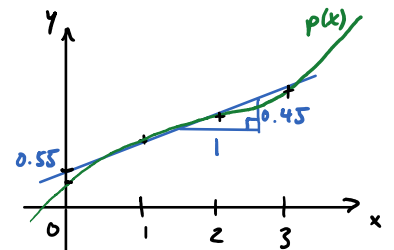
alltså $(x_1, x_2, x_3, x_4) = (0, 1, 2, 3)$
 $(y_1, y_2, y_3, y_4) = (0.5, 1.1, 1.4, 1.9)$

och vi ska anpassa en rät linje $y = kx + m$ (genom att välja k, m) till dessa punkter.

Skulle den första punkten ligga på linjen, måste det gälla $y_1 = kx_1 + m$. Med de andra tre punkterna får vi ekv. systemet

$$\begin{cases} 0.5 = k \cdot 0 + m \\ 1.1 = k \cdot 1 + m \\ 1.4 = k \cdot 2 + m \\ 1.9 = k \cdot 3 + m \end{cases} \quad \text{alltså } A \begin{pmatrix} k \\ m \end{pmatrix} = \vec{y} \quad \text{där}$$

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \\ 2 & 1 \\ 3 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{och } \vec{y} = \begin{pmatrix} 0.5 \\ 1.1 \\ 1.4 \\ 1.9 \end{pmatrix}; \quad A^T = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 & 3 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$



Tyvärr ligger våra punkter inte på en linje.

Därför använder vi minsta-kvadrat-metoden för att hitta en bra approximation.

$$A^T A = \begin{pmatrix} 14 & 6 \\ 6 & 4 \end{pmatrix} \quad \text{och} \quad A^T \vec{y} = \begin{pmatrix} 9.6 \\ 4.9 \end{pmatrix} \quad \text{ger normal ekvationen} \quad A^T A \begin{pmatrix} k \\ m \end{pmatrix} = A^T \vec{y} \quad \text{vilket blir}$$

$$\begin{pmatrix} 14k + 6m \\ 6k + 4m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 9.6 \\ 4.9 \end{pmatrix} \quad \text{och har lösningen } \begin{pmatrix} k \\ m \end{pmatrix} = \frac{1}{20} \begin{pmatrix} 4 & -6 \\ -6 & 14 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 9.6 \\ 4.9 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.45 \\ 0.55 \end{pmatrix}.$$

Den minimerar alltså längden av residualvektorn (och därmed dess kvadrat)

$$\|A \begin{pmatrix} k \\ m \end{pmatrix} - \vec{y}\|^2 = (x_1 k + m - y_1)^2 + (x_2 k + m - y_2)^2 + (x_3 k + m - y_3)^2 + (x_4 k + m - y_4)^2$$

vilket förklarar själva namnet "minsta-kvadrat-metoden".

OBS.: Vi kan lika bra anpassa högre grads polynom t.ex. $y = a_2 x^2 + a_1 x + a_0$ till datan (nu tre obekanta, i allmänhet: grad $n \rightarrow n+1$ obekanta koefficienter).

Från vår kunskap om linjära ekvationssystem är det nog grad $n-1$ som ska anpassas till n datapunkter så att vi får en exakt lösning (för då är systemet kvadratisk; en motsägelse får vi bara om vi har olika y -värden till samma x).

Om vi gör det i vårt exempel (4 datapunkter $\rightarrow$ grad 3) får vi systemet

$$\begin{cases} a_3 x_1^3 + a_2 x_1^2 + a_1 x_1 + a_0 = y_1 \\ a_3 x_2^3 + a_2 x_2^2 + a_1 x_2 + a_0 = y_2 \\ a_3 x_3^3 + a_2 x_3^2 + a_1 x_3 + a_0 = y_3 \\ a_3 x_4^3 + a_2 x_4^2 + a_1 x_4 + a_0 = y_4 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} a_0 = 0.5 \\ a_3 + a_2 + a_1 + a_0 = 1.1 \\ 8a_3 + 4a_2 + 2a_1 + a_0 = 1.4 \\ 27a_3 + 9a_2 + 3a_1 + a_0 = 1.9 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} a_0 = \frac{1}{2} \\ a_1 = \frac{11}{12} \\ a_2 = -\frac{2}{5} \\ a_3 = \frac{1}{12} \end{cases} \quad \text{en tydlig lösning}$$

$p(x) = \frac{1}{12}x^3 - \frac{2}{5}x^2 + \frac{11}{12}x + \frac{1}{2}$ går genom alla fyra punkter.

Att anpassa en kurva exakt kallas **interpolation** ("förbinda punkterna").

Vi kan såklart också hantera andra funktionsklasser med vår minsta-kvadrat-kurvanspassning, t.ex. trigonometriska (om datan är periodisk till exempel), alltså

$$y = a_0 + a_1 \cos x + b_1 \sin x + a_2 \cos(2x) + b_2 \sin(2x) \quad \text{exempelvis} \quad (5 \text{ obekanta})$$