MA8020 Tekniska beräkningar

Något om minstakvadratmetoden

Mikael Hindgren

HÖGSKOLAN I HALMSTAD

13 november 2025

Minstakvadratmetoden

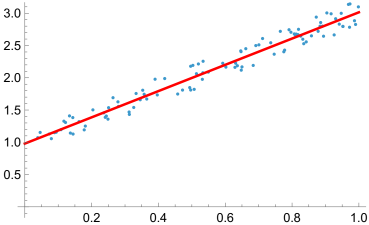
- Används för att approximera lösningar till överbestämda system och för att anpassa modeller till data.
- Metoden är central inom numerisk analys, statistik och ingenjörsvetenskap.

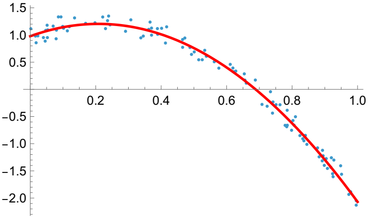
Tillämpningsområden:

- Dataanpassning och regression: Anpassning av linjer eller kurvor till experimentella mätdata.
- Positionsbestämning (GPS): Beräkning av en punkt som bäst överensstämmer med flera mätningar med fel.
- Systemidentifiering i reglerteknik: Bestämning av modellparametrar baserat på mätdata från systemets in- och utsignaler.
- Signal- och bildbehandling: Brusreducering eller rekonstruktion genom att minimera kvadratiska fel.
- Maskininlärning och AI: Träning av modeller genom att minimera summan av kvadrerade fel mellan prediktion och observation.

Minstakvadratmetoden

- Verkliga data innehåller ofta brus eller felaktigheter.
- Vi vill hitta en modell (t.ex. en linje eller kurva) som bäst passar data.
- Minstakvadratmetoden minimerar summan av kvadratskillnader mellan observerade och förutspådda värden.



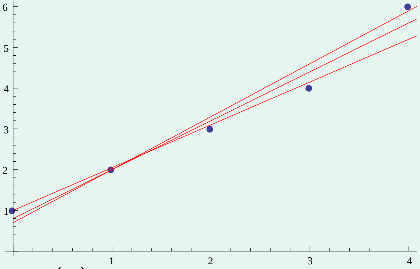


Anpassning till mätserie

Exempel 1

En rät linje $f(x) = kx + m$ skall anpassas till följande mätvärden:

x	0	1	2	3	4
y	1	2	3	4	6



Hur bestämmer vi de parametrar $\boldsymbol{p} = \begin{pmatrix} k \\ m \end{pmatrix}$ som ger "bäst" anpassning?

$$\begin{cases} k \cdot 0 + m = 1 \\ k \cdot 1 + m = 2 \\ k \cdot 2 + m = 3 \\ k \cdot 3 + m = 4 \\ k \cdot 4 + m = 6 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \\ 2 & 1 \\ 3 & 1 \\ 4 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k \\ m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 6 \end{pmatrix} \Leftrightarrow A\boldsymbol{p} = \boldsymbol{y}$$

Minimering av residualen

- Ekvationssystemet $A\boldsymbol{p} = \boldsymbol{y}$ är överbestämt och saknar normalt exakt lösning!
- Vi försöker hitta den lösning som gör $|A\boldsymbol{p} - \boldsymbol{y}|$ minimal.

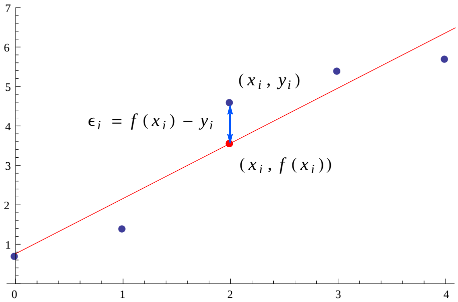
Definition 1

Om $A\boldsymbol{p} = \boldsymbol{y}$ är ett överbestämt ekvationssystem så är

- $\boldsymbol{r} = A\boldsymbol{p} - \boldsymbol{y}$ residualvektorn.
- $|\boldsymbol{r}| = |A\boldsymbol{p} - \boldsymbol{y}|$ residualen som är ett mått på felet i lösningen $\boldsymbol{p}$.
- Minstakvadratlösningen den vektor $\boldsymbol{p}$ som minimerar residualen.

Normalekvationerna

Ex: En rät linje $f(x, \boldsymbol{p}) = kx + m$ ska anpassas till n st mätvärden $(x_i, y_i),\ i = 1, 2, ..., n$.



Metod: Bilda felkvadratsumman

$$S(\boldsymbol{p}) = \epsilon_1^2 + \epsilon_2^2 + ... + \epsilon_n^2 = \sum_{i=1}^{n} \epsilon_i^2 = \sum_{i=1}^{n} (f(x_i, \boldsymbol{p}) - y_i)^2 = \sum_{i=1}^{n} (kx_i + m - y_i)^2 = |\boldsymbol{r}|^2$$

Bästa anpassning i minstakvadratmening ges alltså då S (dvs $|\boldsymbol{r}|$) har min.

Minstakvadratmetoden

Vi söker de partiella derivatornas nollställen ($\nabla S = \mathbf{0}$):

$$
\begin{aligned}
S(\boldsymbol{p}) &= \sum_{i=1}^{n}(f(x,\boldsymbol{p}) - y_i)^2 = \sum_{i=1}^{n} r_i^2 = \sum_{i=1}^{n}(kx_i + m - y_i)^2 \\
&\Rightarrow \begin{cases} \frac{\partial S}{\partial k} = 2\sum_{i=1}^{n} x_i(kx_i + m - y_i) = 0 \\ \frac{\partial S}{\partial m} = 2\sum_{i=1}^{n}(kx_i + m - y_i) = 0 \end{cases} \\
&\Leftrightarrow \begin{cases} k\sum_{i=1}^{n} x_i^2 + m\sum_{i=1}^{n} x_i = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i \\ k\sum_{i=1}^{n} x_i + nm = \sum_{i=1}^{n} y_i \end{cases} \\
&\Leftrightarrow \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{n} x_i^2 & \sum_{i=1}^{n} x_i \\ \sum_{i=1}^{n} x_i & n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k \\ m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{n} x_i y_i \\ \sum_{i=1}^{n} y_i \end{pmatrix} \\
&\Leftrightarrow \begin{pmatrix} x_1 & x_2 & \dots & x_n \\ 1 & 1 & \dots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 & 1 \\ x_2 & 1 \\ \vdots & \vdots \\ x_n & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k \\ m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 & x_2 & \dots & x_n \\ 1 & 1 & \dots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} \\
&\Leftrightarrow A^T A\boldsymbol{p} = A^T\boldsymbol{y} \qquad \leftarrow \text{Normalekvationerna}
\end{aligned}
$$

Minstakvadratmetoden

- Kan vi vara säkra på att den stationära punkten är ett minimum?
- Ja, $S(\boldsymbol{p}) = \sum_{i=1}^{n}(f(x,\boldsymbol{p}) - y_i)^2$ är en summa av positiva kvadratiska termer (konvex funktion) och därför är varje stationär punkt globalt minimum.

Sats 1 (Minstakvadratmetoden (MKM))

- *En lösning* $\boldsymbol{p}$ *till normalekvationerna*

$$A^T A\boldsymbol{p} = A^T\boldsymbol{y}$$

minimerar residualen $|\boldsymbol{r}| = |A\boldsymbol{p} - \boldsymbol{y}|$.

- *Residualen har exakt en minimipunkt omm kolonnvektorerna i* A *är linjärt oberoende.*

Minstakvadratmetoden

Exempel 1 (Forts.)

En rät linje $f(x) = kx + m$ skall anpassas till följande mätvärden:

x	0	1	2	3	4
y	1	2	3	4	6

Normalekvationerna:

$$A^T A\mathbf{p} = A^T\mathbf{y} \quad \Leftrightarrow \quad \begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 & 3 & 4 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \\ 2 & 1 \\ 3 & 1 \\ 4 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k \\ m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 & 3 & 4 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 6 \end{pmatrix}$$

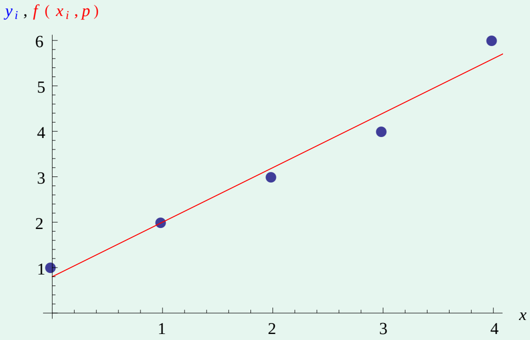
$$\Leftrightarrow \quad \begin{pmatrix} 30 & 10 \\ 10 & 5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k \\ m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 44 \\ 16 \end{pmatrix}$$

$$\Leftrightarrow \quad \begin{pmatrix} k \\ m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 30 & 10 \\ 10 & 5 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 44 \\ 16 \end{pmatrix} = \frac{1}{10} \begin{pmatrix} 1 & -2 \\ -2 & 6 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 44 \\ 16 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 6/5 \\ 4/5 \end{pmatrix}$$

Minstakvadratmetoden

Exempel 1 (Forts.)

$\therefore$ Linjen $f(x, \boldsymbol{p}) = 1.2x + 0.8$ är anpassad till mätdata i MKM-mening



Linjär minstakvadratmetod

$$f(x,\boldsymbol{p}) = \boldsymbol{f}^T \cdot \boldsymbol{p} \quad \text{där} \quad \boldsymbol{f} = \begin{pmatrix} f_0(x) \\ f_1(x) \\ \vdots \\ f_n(x) \end{pmatrix} \text{ och } \boldsymbol{p} = \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix}$$

Exempel 2

- Anpassning till rät linje: $f(x,\boldsymbol{p}) = \boldsymbol{f}^T \cdot \boldsymbol{p} = \begin{pmatrix} x & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} k \\ m \end{pmatrix} = kx + m$
- Anpassning till 2:a-gradspolynom :

  $$f(x,\boldsymbol{p}) = \boldsymbol{f}^T \cdot \boldsymbol{p} = \begin{pmatrix} x^2 & x & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = ax^2 + bx + c$$
- Anpassning till annan icke-linjär funktion :

  $$f(x,\boldsymbol{p}) = \boldsymbol{f}^T \cdot \boldsymbol{p} = \begin{pmatrix} \ln x & x & \cos x \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = a\ln x + bx + c\cos x$$

Anm: f är alltså linjär med avseende på parametrarna $\boldsymbol{p}$ men inte nödvändigtvis med avseende på x.

Icke-linjär minstakvadratmetod

- Vid linjär minstakvadratmetod ger anpassning till $f(x, \boldsymbol{p})$ ett linjärt ekvationssystem (normalekvationerna).
- Vid icke-linjär minstakvadratmetod är f inte linjär med avseende på $\boldsymbol{p}$:
  $\Rightarrow f(x, \boldsymbol{p}) \neq \boldsymbol{f}^T \cdot \boldsymbol{p}$
  $\Rightarrow \frac{\partial S_i}{\partial p_j} = \frac{\partial}{\partial p_j}(r_i^2) = 2r_i \frac{\partial r_i}{\partial p_j}$ där $\frac{\partial r_i}{\partial p_j}$ är beroende av både x och $\boldsymbol{p}$
  $\Rightarrow$ icke-linjärt ekvationssystem $\nabla S = \mathbf{0}$ vilket kräver andra metoder.

Exempel 3

$$f(x, \boldsymbol{p}) = ae^{bx} + \ln(cx) \neq \boldsymbol{f}^T \cdot \boldsymbol{p} \quad \leftarrow \text{icke-linjär funktion med avseende på } \boldsymbol{p}$$

Anpassning av data-punkter till denna funktion kan inte formuleras som ett linjärt ekvationssystem (som normalekvationerna).

Anm: Ibland kan problemet linjariseras:

$$y = ae^{bx} \Leftrightarrow \underbrace{\ln y}_{\tilde{y}} = \underbrace{\ln a}_{\tilde{m}} + \underbrace{b}_{\tilde{k}}x \Leftrightarrow \tilde{y} = \tilde{k}x + \tilde{m}$$

dvs genom att logaritmera y-värdena kan vi i det här fallet använda linjär minstakvadratmetod för anpassning till en rät linje.

Minstakvadratmetoden

Exempel 4

För MKM-anpassning av polynomet $f(x,\boldsymbol{p}) = ax^2 + bx + c$ till n st mätvärden $(x_i, y_i),\ i = 1, 2, ..., n$ får vi:

$$\begin{cases} ax_1^2 + bx_1 + c = y_1 \\ ax_2^2 + bx_2 + c = y_2 \\ \quad\vdots \\ ax_n^2 + bx_n + c = y_n \end{cases} \Leftrightarrow \begin{pmatrix} x_1^2 & x_1 & 1 \\ x_2^2 & x_2 & 1 \\ & \vdots & \\ x_n^2 & x_n & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} \Leftrightarrow \boldsymbol{A}\boldsymbol{p} = \boldsymbol{y}$$

Exempel 5

Gör en MKM-anpassning av polynomet $f(x,\boldsymbol{p}) = ax^2 + bx + c$ till mätvärdena:

x	0	1	2	3	4
y	3	2	3	4	8

Minstakvadratmetoden

Exempel 6

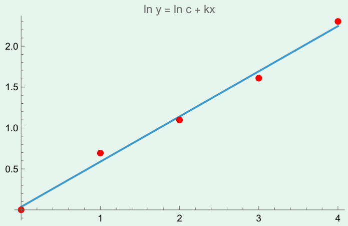
Gör en MKM-anpassning av $f(x, \boldsymbol{p}) = ce^{kx}$ till mätvärdena:

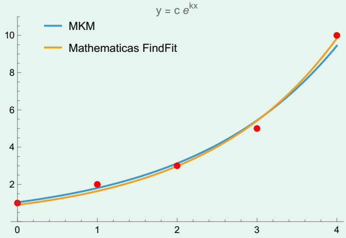
x	0	1	2	3	4
y	1	2	3	5	10

Problemet kan linjariseras:

$$y = ce^{kx} \Leftrightarrow \ln y = \ln c + kx$$

Mathematica ger: $c = 1.03714,\ k = 0.552146$.





Minstakvadratmetoden i Mathematica

- Linjär: Anpassa data till $f(x, \boldsymbol{p}) = ax^2 + bx + c$:

```
Fit[data,{1,x,x^2},x]
```

- Icke-linjär: Anpassa data till $f(x, \boldsymbol{p}) = a \sin bx + c$:

```
FindFit[data,a*Sin[b*x]+c,{a,b,c},x]
```

Kontinuerlig minstakvadratmetod

Diskreta minsta kvadratmetoden kan generaliseras:

$$\min_{\boldsymbol{p}} S(\boldsymbol{p}) = \min_{\boldsymbol{p}} \sum_{i=1}^{n} \omega_i (f(x_i, \boldsymbol{p}) - y_i)^2 \underset{n\to\infty}{\longrightarrow} \min_{\boldsymbol{p}} \int_{\Omega} \omega(x)(f(x, \boldsymbol{p}) - y(x))^2 dx$$

- ω_i är en viktfunktion som kan ge mätvärdena i det diskreta fallet olika stor betydelse. $\omega(x)$ är den kontinuerliga motsvarigheten till ω_i.
- $\pi \int_a^b f(x)^2 dx$ är rotationsvolymen då $y = f(x)$, $a \leq x \leq b$, roterar kring x-axeln
  $\Rightarrow$ Kontinuerliga minstakvadratmetoden motsvarar minimering av rotationsvolymen då $f(x, \boldsymbol{p})$ roterar kring $y(x)$

Exempel 7

Använd kontinuerlig minstakvadratmetod och $\omega(x) = 1$ för att approximera

$$y(x) = 0.3 \cos 4x + e^x$$

med ett 1:a-, 2:a- och 3:dje-gradspolynom $f(x, \boldsymbol{p})$ i intervallet $[0, 1]$.

Kontinuerlig minstakvadratmetod

Exempel 7 (forts)

```
Remove["Global`*"]
y[x_] = 0.3 Cos[4 x] + Exp[x];
n = 3;
For[k = 1, k <= n, k ++,
 p = Table[c[i], {i, 0, k}];
 f[x_] = Table[x ^ i, {i, 0, k}].p;
 s = Integrate[(f[x] - y[x]) ^ 2, {x, 0, 1}];
 sol = Solve[D[s, {p}] == 0, p];
 Plot[{y[x], f[x] /. sol[[1]]}, {x, 0, 1},
   PlotLegends → {"y(x)", "f(x,p)"},
   Epilog → {Text["n = ", {0.46, 2}], Text[k, {0.5, 2}]}] // Print
]
```