Mätvärdesbehandling

Max Isacson
med inspiration från
M. Ellert, M. Olvegård, och B. Lindgren

Avdelningen för högenergifysik
Institutionen för fysik och astronomi

UPPSALA
UNIVERSITET

Reviderad
16 september 2019

Studentportalen/DOKUMENT/Laborationer/Datorlabb

- matvarden.pdf (denna föreläsning)
- Kompendium.pdf
- Sammanfattning.pdf
- lektionsuppgift.pdf

Lektionsuppgiften består av 4 uppgifter. Gör de i ordning! Uppgift 1 är den viktigaste då den relaterar till Labb 4 (samt kommande kurser) men försök också hinna med 2 och 3. Uppgift 4 görs endast i mån av tid. *Fråga om ni kör fast!*

Men först några ord om mätvärdesbehandling...

Vi säger att en slumpvariabel X följer en sannolikhetsfördelning (pdf) $p(x)$ om

$$P(x < X < x + dx) = p(x)dx$$

dvs sannolikheten att X faller inom intervallet $(x, x + dx)$ är $p(x)dx$.

Vi säger att en slumpvariabel X följer en sannolikhetsfördelning (pdf) $p(x)$ om

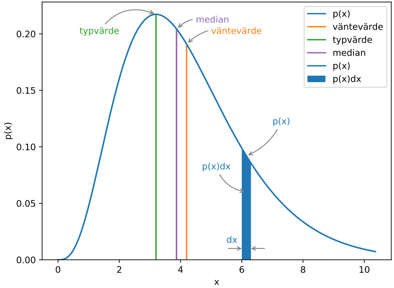
$$P(x < X < x + dx) = p(x)dx$$

dvs sannolikheten att X faller inom intervallet $(x, x + dx)$ är $p(x)dx$.

Funktionen $p(x)$ har egenskapen

$$\int_{\Omega} p(x)dx = 1$$

där Ω är utfallsrummet, dvs alla möjliga värden av X.



Vi säger att en slumpvariabel X följer en sannolikhetsfördelning (pdf) $p(x)$ om

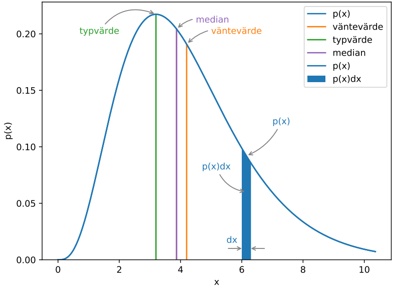
$$P(x < X < x + dx) = p(x)dx$$

dvs sannolikheten att X faller inom intervallet $(x, x + dx)$ är $p(x)dx$.

Funktionen $p(x)$ har egenskapen

$$\int_\Omega p(x)dx = 1$$

där Ω är utfallsrummet, dvs alla möjliga värden av X.

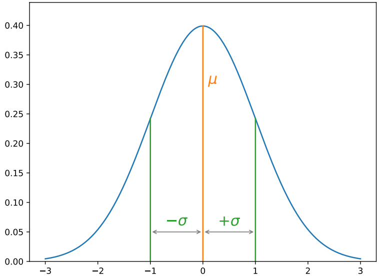


Två viktiga koncept är

- Väntevärdet: $\mu = E[x] = \int_\Omega xp(x)dx$
  - Väntevärdet $\neq$ typvärdet (troligaste värdet) generellt! Likhet endast för *symmetriska* fördelningar
- Standardavvikelsen: $\sigma = \sqrt{E[(x-\mu)^2]} = \sqrt{\int_\Omega (x-\mu)^2 p(x)dx}$
  - Ibland används istället variansen $V[x] = \sigma^2$

Säg att ni från slumpvariabeln X erhållit mätserien $\{x_i\}_1^n$. Viktiga frågor är då

1. Vad är det förväntade värdet för en mätning x_i?
2. Hur stor är spridningen hos mätvärdena?
3. Hur väl kan vi skatta det sanna väntevärdet av slumpvariabeln X?



Säg att ni från slumpvariabeln X erhållit mätserien $\{x_i\}_1^n$. Viktiga frågor är då

1. Vad är det förväntade värdet för en mätning x_i?
2. Hur stor är spridningen hos mätvärdena?
3. Hur väl kan vi skatta det sanna väntevärdet av slumpvariabeln X?

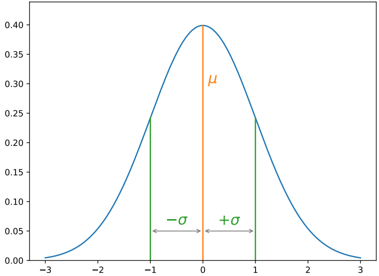
1. Medelvärdet: $\bar{x} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i$
   - $\bar{x}$ skattar väntevärdet $\mu = E[x]$.
2. Standardavvikelse:

   $$u(x) = \sqrt{\frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2}$$

   - $u(x)$ är ett mått på spridningen av mätvärdena x_i och skattar den sanna standardavvikelsen σ.
3. Standardosäkerhet i medelvärdet:

   $$u(\bar{x}) = \frac{u(x)}{\sqrt{n}} = \sqrt{\frac{1}{n(n-1)}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2}$$

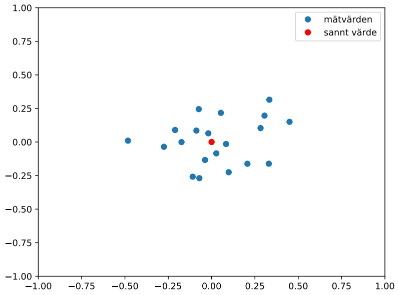
   - $u(\bar{x})$ skattar *spridningen i medelvärdet* vi skulle få om experimentet upprepades flera gånger.



Matlabexempel:

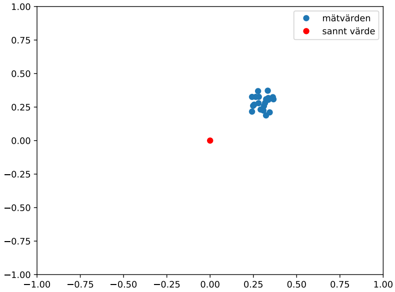
```
% generera 1000 mätvärden x_i med μ = 0 och σ = 1
x = normrnd(0, 1, 1, 1000);
m = mean(x); % medelvärde x̄ = 0.012431
u = std(x); % standardavvikelse u(x) = 0.973136

% standardosäkerhet i medelvärdet
um = u/sqrt(length(x)); % u(x̄) = 0.030773

% upprepa experimentet 500 gånger
means = zeros(1, 500);
for i=1:length(means)
% generera 1000 mätvärden x_i med mu=0 och sigma=1
    x = normrnd(0, 1, 1, 1000);
    means(i) = mean(x); % beräkna medelvärdet
end

% spridningen i medelvärdet från många experiment
umeans = std(means); % u(x̄) = 0.031604
```

Riktighet



- Medelvärdet $\bar{x}$ nära det sanna värdet μ
- Spridningen kan vara stor
- Osäkerheten kan förbättras med mer data

Precision



- Medelvärdet $\bar{x}$ kan skilja sig från det sanna värdet μ
- Liten spridning $u(x)$
- Systematiska fel som kan korrigeras

I experiment vill man ha hög riktighet (välkalibrerad utrustning) och hög precision (många mätningar) $\longrightarrow$ Hög *noggrannhet* (riktighet + precision)!

Exempel:

$$
\begin{aligned}
x_1 &= 0.97\,\mathrm{m} \\
x_2 &= 1.09\,\mathrm{m} \\
x_3 &= 1.16\,\mathrm{m} \\
x_4 &= 1.04\,\mathrm{m} \\
x_5 &= 1.12\,\mathrm{m}
\end{aligned}
$$

1. Beräkna medelvärdet
2. Beräkna standardavvikelsen
3. Beräkna standardosäkerheten i medelvärdet
4. Ange medelvärdet med dess osäkerhet

1. Medelvärdet:

$$\bar{x} = \frac{1}{5}\sum_{i=1}^{5} x_i = \frac{0.97 + 1.09 + 1.16 + 1.04 + 1.12}{5} = 1.08\,\mathrm{m}$$

1. Medelvärdet:

$$\bar{x} = \frac{1}{5}\sum_{i=1}^{5} x_i = \frac{0.97 + 1.09 + 1.16 + 1.04 + 1.12}{5} = 1.08\,\mathrm{m}$$

2. Standardavvikelsen:

$$u(x) = \sqrt{\frac{1}{5-1}\sum_{i=1}^{5}(x_i - \bar{x})^2}$$

$$= \sqrt{\frac{(0.97-1.08)^2 + (1.09-1.08)^2 + (1.16-1.08)^2 + (1.04-1.08)^2 + (1.12-1.08)^2}{5-1}}$$

$$= 0.07\,\mathrm{m}$$

1. Medelvärdet:

$$\bar{x} = \frac{1}{5}\sum_{i=1}^{5} x_i = \frac{0.97 + 1.09 + 1.16 + 1.04 + 1.12}{5} = 1.08\,\mathrm{m}$$

2. Standardavvikelsen:

$$u(x) = \sqrt{\frac{1}{5-1}\sum_{i=1}^{5}(x_i - \bar{x})^2}$$

$$= \sqrt{\frac{(0.97-1.08)^2 + (1.09-1.08)^2 + (1.16-1.08)^2 + (1.04-1.08)^2 + (1.12-1.08)^2}{5-1}}$$

$$= 0.07\,\mathrm{m}$$

3. Standardosäkerheten i medelvärdet:

$$u(\bar{x}) = \frac{0.07}{\sqrt{5}} = 0.03\,\mathrm{m}$$

1. Medelvärdet:

$$\bar{x} = \frac{1}{5}\sum_{i=1}^{5} x_i = \frac{0.97 + 1.09 + 1.16 + 1.04 + 1.12}{5} = 1.08\,\mathrm{m}$$

2. Standardavvikelsen:

$$u(x) = \sqrt{\frac{1}{5-1}\sum_{i=1}^{5}(x_i - \bar{x})^2}$$

$$= \sqrt{\frac{(0.97-1.08)^2 + (1.09-1.08)^2 + (1.16-1.08)^2 + (1.04-1.08)^2 + (1.12-1.08)^2}{5-1}}$$

$$= 0.07\,\mathrm{m}$$

3. Standardosäkerheten i medelvärdet:

$$u(\bar{x}) = \frac{0.07}{\sqrt{5}} = 0.03\,\mathrm{m}$$

4. $\bar{x} = 1.08(3)\,\mathrm{m} = (1.08 \pm 0.03)\,\mathrm{m}$

I Matlab:

```
% mätdata
x = [0.97, 1.09, 1.16, 1.04, 1.12]

% medelvärdet
m = mean(x)

% standardavvikelsen, u(x)
s = std(x)

% standardosäkerheten i medelvärdet, u(m)
sm = std(x)/sqrt(length(x))
```

Exempel: Periodtiden för en pendel kan mätas genom att anteckna tiden t_i vid varje fullbordad svängning. Detta ger mätserien $\{t_1, \ldots, t_i, \ldots, t_n\}$. Det är då lockande ta medelvärdet av $\Delta t_i = t_{i+1} - t_i$:

$$\bar{t} = \frac{1}{n} \sum_i \Delta t_i = \frac{t_2 - t_1 + t_3 - t_2 + \ldots + t_{n-1} - t_{n-2} + t_n - t_{n-1}}{n} = \frac{t_n - t_1}{n}$$

dvs hur många mätningar vi än gör använder vi bara den första och sista!
$\longrightarrow$ Lösningen är metoden för *återkommande intervall*.

Exempel: Periodtiden för en pendel kan mätas genom att anteckna tiden t_i vid varje fullbordad svängning. Detta ger mätserien $\{t_1, \ldots, t_i, \ldots, t_n\}$. Det är då lockande ta medelvärdet av $\Delta t_i = t_{i+1} - t_i$:

$$\bar{t} = \frac{1}{n}\sum_i \Delta t_i = \frac{t_2 - t_1 + t_3 - t_2 + \ldots + t_{n-1} - t_{n-2} + t_n - t_{n-1}}{n} = \frac{t_n - t_1}{n}$$

dvs hur många mätningar vi än gör använder vi bara den första och sista!
$\longrightarrow$ Lösningen är metoden för *återkommande intervall.*

Dela in mätningarna i $m = n/2$ intervall:

$$T_1 = \frac{t_{m+1} - t_1}{m}$$
$$T_2 = \frac{t_{m+2} - t_2}{m}$$
$$\vdots$$
$$T_m = \frac{t_{2m} - t_m}{m}$$

$$\begin{array}{c} t_1 \\ t_2 \\ \vdots \\ t_m \\ t_{m+1} \\ t_{m+2} \\ \vdots \\ t_{2m} \end{array} \qquad T_1 \quad T_2 \quad T_m$$

$$T_i = \frac{t_{m+i} - t_i}{m}$$

Medelvärde och osäkerheter kan då beräknas med den nya mätserien $\{T_i\}_{i=1}^{m}$.

I Matlab:

```
t = [1.06 2.01 2.98 3.96 5.02 6.02]; % mätdata t_i
m = length(t)/2; % antal interval m

% t(m+1:2*m) ger övre mätserien [t_{m+1}, t_{2m}]
% t(1:m) ger undre mätserien [t_1, t_m]
T = ( t(m+1:2*m) - t(1:m) )/m; % ny mätserie T_i = (t_{m+i} - t_i)/m

% medelvärdet och dess osäkerhetet beräknas som vanligt
mT = mean(T);
umT = std(T)/sqrt(m);
```

Ovanstående exempel ger

$$\bar{T} = 0.994(14)\,\mathrm{s}$$

Hur många värdesiffor ska vi ange i svaret?

Allmänna regler:

Vid × och ÷ ges antalet *värdesiffror* av faktorn med *minst* antal värdesiffror

$$1.3 \times 1434 \times 5.10432 = 9.5 \times 10^3$$

$$431.5 \times 1.52/5.4 = 12$$

Vid + och − ges antalet *decimaler* av termen med *störst* osäkerhet

$$11.45 + 1.421 - 6.9321 = 5.94$$

Vi kommer dock nöja oss med följande **tumregel**:

- Avrunda osäkerheten till **två värdesiffror** och justera mätetalet därefter.

Exempel: Om beräkningar ger $\bar{x} = 22.1572$ och $u(\bar{x}) = 0.4217$ ska detta skrivas som

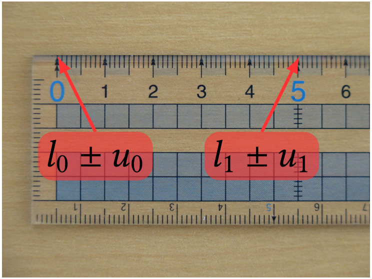
$$\bar{x} = 22.16(42) \quad \text{eller} \quad \bar{x} = 22.16 \pm 0.42$$

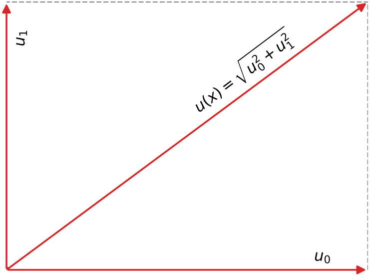
Om osäkerheten för ett mätvärde x kommer från flera *oberoende* källor måste dessa adderas kvadratiskt

$$u(x) = \sqrt{\sum_i u_i^2}$$

Exempelvis om x är en mätning av en sträcka $x = l_1 - l_0$ finns en avläsningsosäkerhet i både l_1 och l_0, så

$$u(x) = \sqrt{u_0^2 + u_1^2}$$





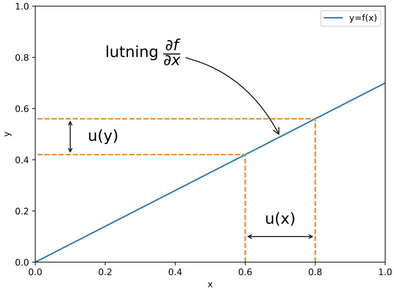
Ibland är vi intresserade av en storhet y som en funktion av en eller flera oberoende mätningar x_i,

$$y = f(x_1, x_2, \ldots, x_n)$$

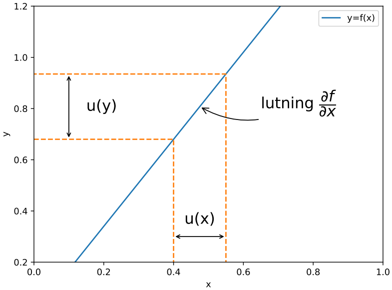
Mätosäkerheten i y beror då på mätosäkerheterna i x_i,

$$u(y) = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} \left(u(x_i) \frac{\partial f}{\partial x_i} \right)^2}$$

detta kallas *osäkerhetspropagering* (eller lite slarvigt *felpropagering*).



$\frac{\partial f}{\partial x} < 1$



$\frac{\partial f}{\partial x} > 1$

Exempel: Volymen V av en cylinder beror på radien r och höjden h

$$V(r,h) = \pi r^2 h$$

Hur relaterar mätosäkerheter i r och h till mätosäkerheten i V?

$$\frac{\partial V}{\partial r} = 2\pi r h, \quad \frac{\partial V}{\partial h} = \pi r^2$$

Detta ger att

$$u_V = \sqrt{\left(u_r \frac{\partial V}{\partial r}\right)^2 + \left(u_h \frac{\partial V}{\partial h}\right)^2} = \sqrt{(u_r 2\pi r h)^2 + (u_h \pi r^2)^2}$$
$$= \pi r^2 h \sqrt{4\left(\frac{u_r}{r}\right)^2 + \left(\frac{u_h}{h}\right)^2} = V\sqrt{4\left(\frac{u_r}{r}\right)^2 + \left(\frac{u_h}{h}\right)^2}$$

dvs den relativa mätosäkerheten är

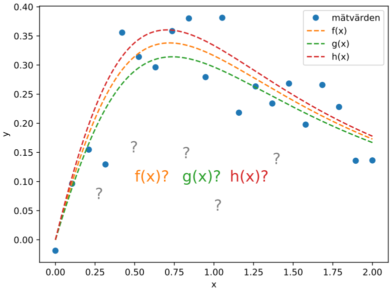
$$\frac{u_V}{V} = \sqrt{4\left(\frac{u_r}{r}\right)^2 + \left(\frac{u_h}{h}\right)^2}$$

Vi är oftast intresserade av *funktionella samband* mellan två eller flera storheter. Säg att vi har en storhet y som i sin tur beror på en annan storhet x.

- Position s som beror av en tid t
- Ström I beroende av en pålagd spänning V
- Periodtid T beroende av pendelarm L
- …

Genom att variera x och mäta y fås två mätserier $\{x_i\}_1^n$ och $\{y_i\}_1^n$, alternativ en mätserie av paren $\{x_i, y_i\}_1^n$.

Hur finner vi sambandet $y = f(x)$ med hjälp av dessa mätningar?



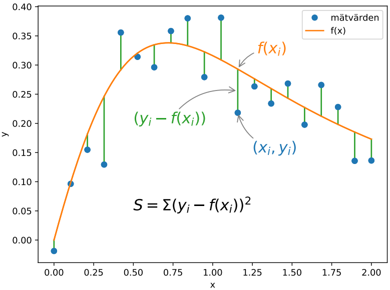
Sambandet f kan t.ex. vara en teoretisk modell beroende på ett antal parameterar a_j, dvs

$$y = f(x, a_1, a_2, \ldots, a_m)$$

Hur bra beskriver f vår mätdata $\{x_i, y_i\}$? Bilda kvadratsumman S:

$$S = \sum_i (y_i - f(x_i, a_1, \ldots, a_m))^2$$

$\longrightarrow$ Ju mindre skillnad mellan y_i och $f(x_i)$ desto mindre blir S.

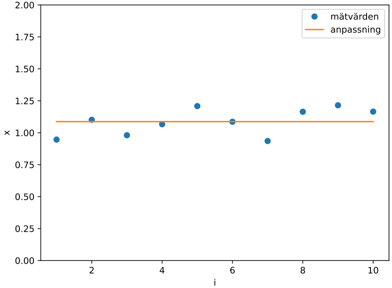


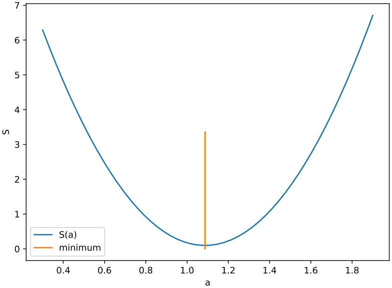
Vi kan alltså *minimera* S med avseende på parametrarna a_j för att få den bästa anpassningen till vår mätdata! Detta kallas för *minstakvadratanpassing*.

$$\frac{\partial S}{\partial a_1} = 0, \frac{\partial S}{\partial a_2} = 0, \quad \ldots, \frac{\partial S}{\partial a_m} = 0$$

Observera att derivatorna tas med avseende på parametrarna a_j (**inte** mätvärdena)!

Exempel: Anpassa en konstant a till en mätserie $\{x_i\}$.





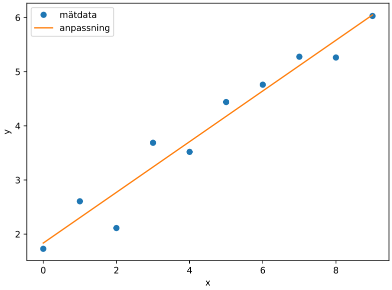
Bilda kvadratsumman S och derivera:

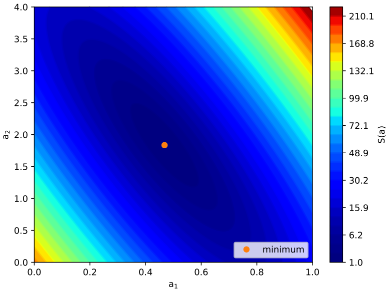
$$S(a) = \sum_i (x_i - a)^2 \quad \longrightarrow \quad \frac{\partial S}{\partial a} = -2\sum_i (x_i - a) = \left(-2\sum_i x_i\right) + 2na = 0$$

$$\longrightarrow \quad na = \sum_i x_i \quad \longrightarrow \quad a = \frac{1}{n}\sum_i x_i = \bar{x}$$

Så medelvärdet $\bar{x}$ är den konstant som passar vår data bäst! Här blir $a = 1.09$, medan det sanna värdet var 1.10.

Exempel: Anpassa en linje $y = a_1 x + a_2$ till en mätserie $\{x_i, y_i\}$.





Bilda kvadratsumman S:

$$S(a_1, a_2) = \sum_i (y_i - f(x_i, a_1, a_2))^2 = \sum_i (y_i - a_1 x_i - a_2)^2$$

S är nu en funktion av två variabler, a_1 och a_2, och måste minimeras över båda!

De partiella derivatorna är då:

$$\frac{\partial S}{\partial a_1} = -2\sum_i (y_i - a_1 x_i - a_2)x_i = -2\left(\sum_i y_i x_i - \sum_i a_1 x_i^2 - \sum_i a_2 x_i\right) = 0$$

$$\frac{\partial S}{\partial a_2} = -2\sum_i (y_i - a_1 x_i - a_2) = -2\left(\sum_i y_i - \sum_i a_1 x_i - \sum_i a_2\right) = 0$$

De partiella derivatorna är då:

$$\frac{\partial S}{\partial a_1} = -2\sum_i (y_i - a_1 x_i - a_2)x_i = -2\left(\sum_i y_i x_i - \sum_i a_1 x_i^2 - \sum_i a_2 x_i\right) = 0$$
$$\frac{\partial S}{\partial a_2} = -2\sum_i (y_i - a_1 x_i - a_2) = -2\left(\sum_i y_i - \sum_i a_1 x_i - \sum_i a_2\right) = 0$$

Och om vi arrangerar om termerna:

$$\sum_i y_i x_i = a_1 \sum_i x_i^2 + a_2 \sum_i x_i$$
$$\sum_i y_i = a_1 \sum_i x_i + a_2 \sum_i 1$$

Detta är ett *linjärt ekvationssystem* i variablerna a_1 och a_2, som kan skrivas om på matrisform (notera $\sum_i 1 = n$):

$$\begin{pmatrix} \sum_i y_i x_i \\ \sum_i y_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_i x_i^2 & \sum_i x_i \\ \sum_i x_i & n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}$$

Om vi sätter

$$\vec{h} = \begin{pmatrix} \sum_i y_i x_i \\ \sum_i y_i \end{pmatrix}, \quad G = \begin{pmatrix} \sum_i x_i^2 & \sum_i x_i \\ \sum_i x_i & n \end{pmatrix}, \quad \vec{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}$$

kan detta skrivas som $G\vec{a} = \vec{h}$ och allt vi behöver göra är att lösa för $\vec{a}$:

$$\vec{a} = G^{-1}\vec{h}$$

I Matlab:

```
x = [...]; y = [...]; % mätdata {x_i, y_i}
G = [sum(x.^2), sum(x); sum(x), length(x)]; % matrisen G
h = [sum(y.*x); sum(y)]; % högerledet h
a = inv(G)*h % de anpassade parametrarna a = (a_1, a_2)^T
```

I det exemplet fås $a_1 = 0.47$ och $a_2 = 1.84$, jmf sanna värdena $a_1 = 0.50$ och $a_2 = 1.70$.

Eftersom våra mätvärden $\{x_i, y_i\}$ har en viss spridning finns det en osäkerhet i de anpassade parametrarna $\vec{a} = (a_1, \ldots, a_j, \ldots, a_m)^\top$. Denna ges av

$$u(a_j) = \sqrt{\frac{(G^{-1})_{jj} S}{n - m}}$$

där

- $(G^{-1})_{jj}$ är diagonalelementen i G^{-1},
- $S = \sum_i (y_i - f(x_i, \vec{a}))^2$ är kvadratsumman som tidigare,
- n är antalet mätpunkter och m är antalet anpassade parametrar.
  - $n - m$ kallas för antalet *frihetsgrader* och betecknas $\nu = n - m$.

I Matlab:

```
a = inv(G)*h % de anpassade parametrarna a = (a_1, ..., a_m)^T
S = sum((y-f(x,a)).^2); % kvadratsumman S(a) = ∑(y_i − f(x_i, a))^2
n = length(x); m = length(a); % #mätvärden n och #parametrar m

% vektor med mätosäkerheterna u_a = (u_{a_1}, ..., u_{a_m})^T
ua = sqrt(diag(inv(G))*S/(n - m));
```

Komplett matlab-exempel för vår räta linje:

```
x = [...]; y = [...]; % mätdata {x_i, y_i}
G = [sum(x.^2), sum(x); sum(x), length(x)]; % matrisen G
h = [sum(y.*x); sum(y)]; % högerledet h
a = inv(G)*h % de anpassade parametrarna a = (a_1, a_2)^T

S = sum((y-a(1)*x-a(2)).^2); % kvadratsumman S(a) = ∑(y_i − a_1 x_i − a_2)^2
n = length(x); m = length(a); % #mätvärden n och #parametrar m
ua = sqrt(diag(inv(G))*S/(n - m)); % mätosäkerheter u_a = (u_{a_1}, u_{a_2})^T
```

Detta ger

$$\vec{a} = \begin{pmatrix} 0.468 \\ 1.84 \end{pmatrix}, \quad \vec{u}_a = \begin{pmatrix} 0.039 \\ 0.21 \end{pmatrix}$$

dvs

$$a_1 = 0.468(39)$$
$$a_2 = 1.84(21)$$

(notera att vi avrundat till två värdesiffor i mätosäkerheterna)

Om mätvärdena y_i har en associerad mätosäkerhet u_i måste dessa tas hänsyn till.

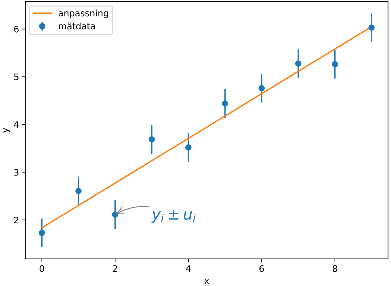
Detta görs genom att vikta varje term i kvadratsumman S med sin mätosäkerhet

$$S = \sum_i \frac{(y_i - f(x_i, \vec{a}))^2}{u_i^2}$$

och därefter fortsätta som vanligt, dvs genom att lösa

$$\frac{\partial S}{\partial a_j} = -2 \sum_i \frac{y_i - f(x_i, \vec{a})}{u_i^2} \frac{\partial f(x_i, \vec{a})}{\partial a_j} = 0$$

för varje parameter a_j.



Studentportalen/DOKUMENT/Laborationer/Datorlabb

- matvarden.pdf
- Kompendium.pdf
- Sammanfattning.pdf
- lektionsuppgift.pdf

Bonus

OBS! Allt som följer nu ingår *inte* i kursen utan är endast till för den intresserade :)

Linjär minstakvadratanpassning kan skrivas helt med hjälp av matriser, vilket ger en väldigt kompakt notation. Detta lämpar sig också väl för Matlab och dylikt.

Definiera $\vec{x}$, $\vec{y}$, och $\vec{a}$ som vanligt:

$$\vec{x} = (x_1, \ldots, x_n)^\top \quad \vec{y} = (y_1, \ldots, y_n)^\top \quad \vec{a} = (a_1, \ldots, a_m)^\top$$

Vi behöver två matriser till, designmatrisen X och kovariansmatrisen Σ:

$$X = \begin{pmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & \ldots & x_1^{m-1} \\ 1 & x_2 & x_2^2 & \ldots & x_2^{m-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \ldots & x_n^{m-1} \end{pmatrix}, \quad \Sigma = \operatorname{diag}\{u_i^2\} = \begin{pmatrix} u_1^2 & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & u_2^2 & \ldots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \ldots & u_n^2 \end{pmatrix}$$

Observera att formen på X ovan endast gäller för anpassning av polynom, $f(x) = a_1 + a_2 x + a_3 x^2 + \ldots + a_m x^{m-1}$.

Kvadratsummas S kan då skrivas som

$$S = (\vec{y} - X\vec{a})^\top \Sigma^{-1} (\vec{y} - X\vec{a})$$

Vi kan nu derivera S med avseende på *vektorn*[1][2] $\vec{a}$

$$\frac{\partial S}{\partial \vec{a}} = -2X^\top \Sigma^{-1} (\vec{y} - X\vec{a}) = 0$$

Efter lite omordning får vi då

$$X^\top \Sigma^{-1} \vec{y} = X^\top \Sigma^{-1} X \vec{a}$$

$$\vec{a} = \left(X^\top \Sigma^{-1} X \right)^{-1} X^\top \Sigma^{-1} \vec{y}$$

vilket direkt ger parametrarna $\vec{a}$!

[1] https://en.wikipedia.org/wiki/Matrix_calculus

[2] https://www.math.uwaterloo.ca/~hwolkowi/matrixcookbook.pdf

Även mätosäkerheterna i $\vec{a}$ kan skrivas på matrisform. Notera att vi har

$$\vec{a} = \left(X^\top \Sigma^{-1} X\right)^{-1} X^\top \Sigma^{-1} \vec{y}$$

Vi kan då ta derivatan av $\vec{a}$ med avseende på $\vec{y}$[3,4]

$$\mathcal{J} \equiv \frac{\partial \vec{a}}{\partial \vec{y}} = \left(X^\top \Sigma^{-1} X\right)^{-1} X^\top \Sigma^{-1}$$

Matrisen $\mathcal{J}$ kallas för Jacobianen för $\vec{a}$ med avseende på $\vec{y}$ och är analog med derivatan för vanliga funktioner. Mätosäkerheterna fås då med felpropagering som på matrisform är

$$\Sigma_a = \mathcal{J} \Sigma \mathcal{J}^\top = [\text{algebra}] = \left(X^\top \Sigma^{-1} X\right)^{-1}$$

där Σ_a är kovariansmatrisen för $\vec{a}$. Mätosäkerheterna fås då som roten ur diagonalelementen

$$\vec{u}_a = \sqrt{\operatorname{diag}\left(\Sigma_a\right)}$$

och vi är klara!

[3] https://en.wikipedia.org/wiki/Matrix_calculus
[4] https://www.math.uwaterloo.ca/~hwolkowi/matrixcookbook.pdf

I Matlab tar allt ovanstående den relativt kompakta formen:

```
% mätdata {x_i, y_i ± u_i} som kolonnvektorer
x = [...]'; y = [...]'; u = [...]';
X = [x.^0, x.^1, ...]; % designmatrisen X

% kovariansmatrisen Σ, samt inversen Σ^-1
V = diag(u.^2); iV = inv(V);
J = inv(X'*iV*X)*X'*iV; % Jacobianen 𝒥
a = J*y; % de anpassade parametrarna a
Va = J*V*J' % kovariansmatrisen Σ_a
ua = sqrt(diag(Va)); % mätosäkerheter u_a
```