Lineare Ausgleichsrechnung

1. Ausgleichsgerade

(1.1) Problemstellung

Finde zu $(t_j, b_j) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}$ $\quad j = 1..N$

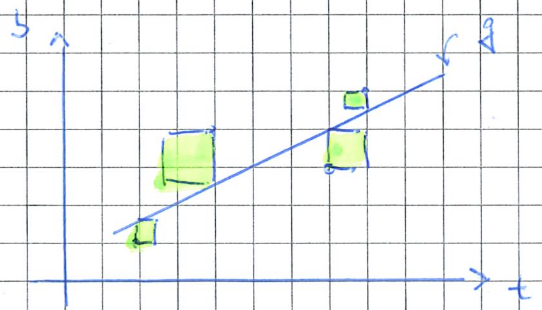
eine Gerade $g: t \mapsto m \cdot t + c$ so, dass

$$g(t_j) \approx b_j \quad \text{für } j = 1..N$$

Genauer: Finde m und c so, dass

$$\sum_{j=1}^{N} |g(t_j) - b_j|^2 \quad \text{minimal wird}$$

(1.2) Geometrische Interpretation



Minimiere die Summe der Flächen

„Methode der kleinsten Fehlerquadrate" Gauß 1803

(1.3) Matrix-Vektor-Formulierung

Finde $x = \begin{pmatrix} m \\ c \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^2$ so, dass

für $A = \begin{bmatrix} t_1 & 1 \\ \vdots & \vdots \\ t_N & 1 \end{bmatrix}$ und $b = \begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_N \end{bmatrix}$

$$\| Ax - b \|_2^2 \quad \text{minimal wird.}$$

$$\begin{bmatrix} t_1 & 1 \\ \vdots & \vdots \\ t_N & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} m \\ c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} m t_1 + c \\ \vdots \\ m t_N + c \end{bmatrix}$$

2. Multiple lineare Regression

(2.1) Problemstellung

Finde zu Daten $(z_{j1}, \dots, z_{jn}, y_j) \in \mathbb{R}^{n+1}$

$j = 1..N$ und Funktionen $\varphi_i : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$

$i = 1..n$ Parameter $x_1 \dots x_n$ so dass

$$\sum_{i=1}^{n} x_i \varphi_i(z_{ji}) \approx y_j \qquad \text{für } j = 1..N$$

(Hierbei nimmt man an dass sich die Beobachtung y_j durch die Funktion

$$(z_1 \dots z_n) \mapsto \sum_{i=1}^{n} x_i \varphi_i(z_i)$$

aus den Messungen $z_{1j} \dots z_{nj}$ erklären lassen)

(2.2) Matrix-Vektor-Formulierung

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \| Ax - y \|_2^2$$

für
$$A = \underbrace{\begin{bmatrix} \varphi_1(z_{11}) & \cdots & \varphi_n(z_{1n}) \\ \vdots & & \vdots \\ \varphi_1(z_{N1}) & \cdots & \varphi_n(z_{Nn}) \end{bmatrix}}_{n} \Big\} N \in \mathbb{R}^{N \times n}$$

$$y = \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_N \end{bmatrix}$$

Koeffizienten

$$p(t) = \sum_{i=0}^{n} x_i t^i$$

(2.3) Beispiel

Finde Polynom vom Grad $\leq n-1$ so, dass zu Daten (t_j, y_j) $j = 1..N$ gilt

$$\sum_{i=0}^{n-1} x_i t_j^i \approx y_j \quad \text{für } j = 1..N$$

d.h. $Z_{ji} = t_j^i$ für $i = 0 .. n-1$, $j = 1 .. N$

$$\varphi_i(Z) = Z^i$$

$$\rightsquigarrow \quad A = \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & t_1 & \cdots & t_1^{n-1} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & t_N & \cdots & t_N^{n-1} \end{bmatrix}}_{n} \Bigg\} N \qquad b = \begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_N \end{bmatrix}$$

(2.4) Satz / Definition

Sei $A \in \mathbb{R}^{N \times n}$, $N \geq n$, $\operatorname{rang}(A) = n$, $b \in \mathbb{R}^N$. Das lineare Ausgleichsproblem

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \| Ax - b \|_2^2 \quad \text{hat eine Lösung}$$

Diese ist als Lösung des LGS

$$A^T A x = A^T b \qquad \text{„Normalengleichungen"}$$

gegeben.

Beweis: Numerik 1

3 Lösung des linearen Ausgleichproblems mit der QR-Zerlegung

$A \in \mathbb{R}^{N \times n}$ $\quad N \geq n \quad$ rang $(A) = n \quad b \in \mathbb{R}^N$

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \| Ax - b \|_2^2$$

Sei $A = QR$ QR-Zerlegung von A

dann ist

$$\| Ax - b \|_2^2 = \| QRx - b \|_2^2 = \| Q(Rx - Q^T b) \|_2^2$$

$$= \| Rx - Q^T b \|_2^2$$

$$= \left\| \begin{bmatrix} \tilde{R} \\ 0 \end{bmatrix} x - \begin{bmatrix} \tilde{c} \\ \tilde{d} \end{bmatrix} \right\|_2^2 = \| \tilde{R} x - \tilde{c} \|_2^2 + \| \tilde{d} \|_2^2$$

für $\tilde{R} = (r_{ij})_{i,j=1}^{n}$ rechte obere Dreiecksmatrix

$\tilde{c}$ ersten n Einträge von $Q^T b$

$\tilde{d}$ Rest von $Q^T b$

$\rightsquigarrow$ $\| Ax - b \|_2^2$ wird minimal falls $x = \tilde{R}^{-1} \tilde{c}$

3.1 Algorithmus

Gegeben A, b

Berechne QR-Zerlegung von A

Löse $\tilde{R} x = \tilde{c}$ $\quad$ ($\tilde{R} = R[0:n, 0:n]$

$\tilde{c} = (Q^T b)[0:n]$)

x ist die gesuchte Lösung

In numpy und scipy gibt es Löser für "linear least square" Probleme

scipy.linalg.lstsq $\quad$ numpy.linalg.lstsq