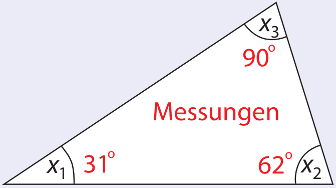
Ausgleichsrechnung: Methode der kleinsten Quadrate

Historische Bemerkung

In der Neujahrsnacht 1801 entdeckte **Giuseppe Piazzi** den Zwergplaneten **Ceres** in der Lücke zwischen Mars und Jupiter. Allerdings verlor man Ceres danach wieder aus den Augen. **Carl Friedrich Gauss** errechnete mit seiner **Methode der kleinsten Quadrate** aufgrund der wenigen vorliegenden Bahndaten die Position von Ceres, der an der vorhergesagten Stelle am 7. Dezember 1801 durch **Franz Xaver von Zach** wiedergefunden wurde.

Beispiel

Man bestimme die Winkel x_1 und x_2 durch (fehlerbehaftete) Messungen von x_1, x_2 und x_3 möglichst genau. Wir beschränken uns dabei auf *eine* Messreihe:



$$\left.\begin{array}{rcr} x_1 \phantom{{}+x_2} & = & 31 \\ x_2 & = & 62 \\ x_1 + x_2 & = & 180 - 90 \end{array}\right\}$$

3 Gleichungen für 2 Unbekannte: überbestimmtes LGS, keine Lösung

Idee

Betrachte

$$\left.\begin{array}{rcl} x_1 \qquad\quad - 31 &=& r_1 \\ x_2 - 62 &=& r_2 \\ x_1 + x_2 - 90 &=& r_3 \end{array}\right\} \quad (*)$$

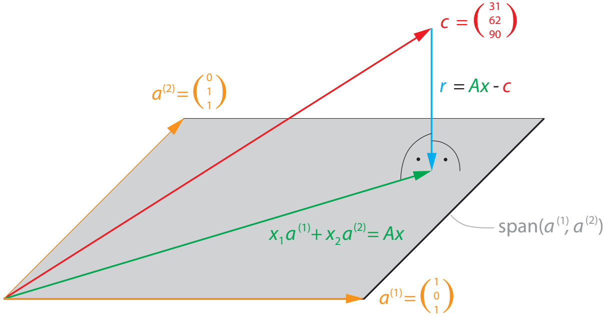
und finde $\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$ so, dass der **Residuenvektor** $r = \begin{pmatrix} r_1 \\ r_2 \\ r_3 \end{pmatrix}$ minimale Norm $\|r\|_2$ hat.

Die Gleichungen $(*)$ heissen **Fehlergleichungen**, und man interpretiert die r_i als **Messfehler**.

Methode der kleinsten Quadrate

Löse $Ax - c = r$, $A \in \mathbb{R}^{m \times n}, c, r \in \mathbb{R}^m$ möglichst gut, d.h. finde $x \in \mathbb{R}^n$ so, dass $\|r\|_2 = \|Ax - c\|_2$ minimal wird, d.h. $r_1^2 + \ldots + r_m^2$ soll minimal sein.

Geometrisch: $\|r\|_2$ minimal $\iff$ $r \perp \operatorname{span}(a^{(1)}, \ldots, a^{(n)})$:



Satz

- Sei $A \in \mathbb{R}^{m \times n}, c \in \mathbb{R}^m$. Die Lösungen des Minimierungsproblems $\|Ax - c\| \stackrel{!}{=} \min$ stimmen überein mit den Lösungen der **Normalgleichungen**
$$A^\top Ax = A^\top c$$
- $\operatorname{Rang}(A) = n \iff$ die Lösung ist eindeutig.

Beispiel (Fortsetzung vom Anfang)

Für $A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$, $c = \begin{pmatrix} 31 \\ 62 \\ 90 \end{pmatrix}$ erhält man

$$A^\top A = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}, \quad A^\top c = \begin{pmatrix} 121 \\ 152 \end{pmatrix}$$

Die Lösung der Normalgleichungen

$$\begin{array}{ccccc} 2x_1 & + & x_2 & = & 121 \\ x_1 & + & 2x_2 & = & 152 \end{array}$$

lautet $x_1 = 30$, $x_2 = 61$. Diese Zahlen lösen also das ursprüngliche überbestimmte LGS am besten (im Sinne der kleinsten Quadrate).

QR-Zerlegung

Beobachtung: Die Normalgleichungen sind schlecht konditioniert und führen zu numerisch ungenauen Lösungen. Daher formen wir die Fehlergleichungen $Ax - c = r$ zunächst mit Hilfe des folgenden Satzes um:

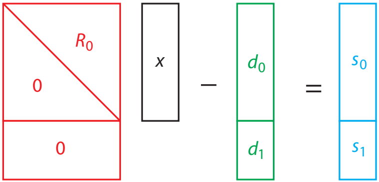
Satz: QR-Zerlegung

- Sei $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $m \geq n$, dann existiert $Q \in \mathbb{R}^{m \times m}$ orthogonal so, dass $A = QR$ mit $R = \begin{pmatrix} R_0 \\ 0 \end{pmatrix}$, wobei $R_0 \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine obere Dreiecksmatrix ist.
- $\text{Rang}(A) = n \iff R_0$ regulär.

Anwendung der QR-Zerlegung

Lösung des Minimierungsproblems. Herleitung:

1. Fehlergleichungen: $Ax - c = r$
2. Minimierungsproblem $\|r\|_2 = \|Ax - c\| \overset{!}{=} \min.$
3. Sei $A = QR$ die QR-Zerlegung von A und $Q^\top c =: d$.
4. Dann gilt $\|r\|_2 = \|Q^\top r\|_2 = \|\underbrace{\overbrace{Q^\top A}^{=R} x - \overbrace{Q^\top c}^{=d}}_{=:s}\|_2$.
5. Somit $\|r\|_2$ minimal $\iff$ $\|s\|_2$ minimal.
6. $Rx - d = s$ lautet ausgeschrieben



Hier sind R_0, d_0, s_0 die obersten n Zeilen von R, d, s, und d_1, s_1 die untersten $m - n$ Zeilen von d, s. Also

$$\begin{aligned} R_0 x - d_0 &= s_0 \\ -d_1 &= s_1 \end{aligned}$$

Offenbar hängt s_1 nicht von x ab, und somit folgt

$$\|s\|_2^2 = \|s_0\|_2^2 + \|s_1\|_2^2 = \|R_0 x - d_0\|_2^2 + \|d_1\|_2^2 \overset{!}{=} \min$$

$$\Updownarrow$$

$$R_0 x = d_0$$

Und der Wert des Minumums ist $\|r\|_2 = \|s\|_2 = \|d_1\|_2$.

Satz

Die Lösung x von $\|Ax - c\|_2 = \|r\|_2 \overset{!}{=} \min$ kann wie folgt gefunden werden:

- $R = Q^\top A$ (QR-Zerlegung von A)
- $d := Q^\top c$
- Seien R_0 resp. d_0 die oberen n Zeilen von R resp. d.
- $R_0 x = d_0$ (Lösung durch Rückwärtseinsetzen)
- Wert des Minumums $\|r\|_2 = \|d_1\|_2$, wobei d_1 die unteren $m - n$ Zeilen von d sind.

Eine numerisch stabile Methode zur Bestimmung der QR-Zerlegung verwendet die Givens-Rotationen.

Beispiel (nochmals das vom Anfang)

- **1. Schritt.** Bestimme ϕ so, dass der Eintrag a_{31} von A verschwindet:

$$\begin{array}{rl} & \begin{array}{ccc}\text{Spalte 1} & \quad & \text{Spalte 3}\\ \downarrow & & \downarrow\end{array} \\ \begin{array}{r}\text{Zeile 1}\rightarrow\\ \\ \text{Zeile 3}\rightarrow\end{array} & \underbrace{\begin{pmatrix}\cos\phi & 0 & \sin\phi\\ 0 & 1 & 0\\ -\sin\phi & 0 & \cos\phi\end{pmatrix}}_{=:U_{31}^{\top}}\underbrace{\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\\ 1 & 1\end{pmatrix}}_{=A} = \begin{pmatrix} * & *\\ 0 & *\\ -\sin\phi+\cos\phi & *\end{pmatrix}\end{array}$$

Offenbar wird $-\sin\phi+\cos\phi=0$ für $\sin\phi=\cos\phi=\frac{1}{\sqrt{2}}$ und man erhält

$$U_{31}^{\top}A=\begin{pmatrix}\sqrt{2} & 1/\sqrt{2}\\ 0 & 1\\ 0 & 1/\sqrt{2}\end{pmatrix}=:A_1$$

Beispiel (Fortsetzung)

- **2. Schritt.** Bestimme ψ so, dass der Eintrag a_{32} von A_1 verschwindet:

$$\begin{array}{rl} & \begin{array}{ccc} & \text{Spalte 2} & \text{Spalte 3} \\ & \downarrow & \downarrow \end{array} \\ \begin{array}{r} \\ \text{Zeile 2} \rightarrow \\ \text{Zeile 3} \rightarrow \end{array} & \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\psi & \sin\psi \\ 0 & -\sin\psi & \cos\psi \end{pmatrix}}_{=:U_{32}^{\top}} \underbrace{\begin{pmatrix} \sqrt{2} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & 1 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}}_{A_1} = \begin{pmatrix} * & * \\ 0 & * \\ 0 & -\sin\psi + \frac{\cos\psi}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \end{array}$$

Offenbar wird $-\sin\psi + \frac{\cos\psi}{\sqrt{2}} = 0$ für

$$\sin^2\psi = \frac{\cos^2\psi}{2} = \frac{1-\sin^2\psi}{2}$$

also $\sin^2\psi = \frac{1}{3}$, $\cos^2\psi = \frac{2}{3}$ resp. $\sin\psi = \frac{1}{\sqrt{3}}$, $\cos\psi = \sqrt{\frac{2}{3}}$.

Beispiel (Fortsetzung)

Wir erhalten

$$U_{32}^\top A_1 = \begin{pmatrix} \sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ 0 & \sqrt{\frac{3}{2}} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} =: R$$

Zusammen mit dem 1. Schritt haben wir erreicht, dass

$$\underbrace{U_{32}^\top U_{31}^\top}_{=:Q^\top} A = R \text{ d.h. } A = QR$$

Regression

Lineare Regression

Es liegen n Messungen (x_i, y_i) vor, z.B. $x_i =$ Schuhgrösse einer Person i, $y_i =$ Körpergrösse der Person i. Man finde eine Grade $y = ax + b$, welche die Daten möglichst gut beschreibt, d.h.

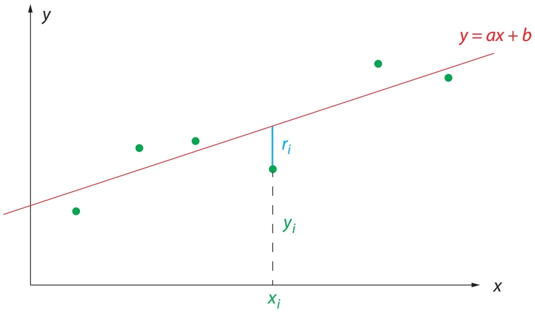
$$ax_i + b - y_i = r_i$$

und $\|r\|_2$ soll minimal werden. Dies ist ein überbestimmtes LGS für a und b. Die Lösung der Normalgleichungen liefert

$$a = \frac{\langle x - \bar{x}e, y - \bar{y}e \rangle}{\|x - \bar{x}e\|^2}, \quad b = \bar{y} - a\bar{x}$$

wobei $e = (1, \dots, 1)^\top \in \mathbb{R}^n$, und $\bar{x} = \frac{1}{n}\langle x, e \rangle$, $\bar{y} = \frac{1}{n}\langle y, e \rangle$ sind die Mittelwerte der Daten x_i respektive y_i.

Die gefundene Grade heisst **Regressionsgerade**.



Bemerkung: Je nach Situation wird statt einer Geraden eine geeignete andere Funktion gewählt, welche die Daten beschreiben soll, z.B. eine Parabel $y = ax^2 + bx + c$ (quadratische Regression), $y = a + b\arctan(x)$ etc.