Lineare Ausgleichsrechnung (Methode der kleinsten Quadrate)

Gegeben ist ein überbestimmtes Gleichungssystem.
$A \cdot \vec{k} = \vec{b} - \vec{r}$

Wozu braucht man so was? Grundsätzlich, um eine Näherungsfunktion zu einer gegebenen Punktemenge zu finden, die möglichst gut passt. Dazu stelle man sich beispielsweise folgendes Szenario vor: Ein Physiker möchte herausfinden, wie sich der freie Fall mathematisch darstellen lässt. Durch seine Erfahrung vermutet er, dass es sich um eine quadratische Funktion handeln muss. Vor allem aber interessieren ihn die Koeffizienten des Polynoms. Dazu geht er folgendermaßen vor: Er macht einige Versuche, allerdings wesentlich mehr als die mindestens erforderlichen 3. Die Funktionswerte, also die Falltiefen kommen in einen Vektor b. Die Matrix A ist eine Vandermond'sche Matrix, da er von einem Polynom 2ten Grades ausgeht. Die zur Falltiefe korrespondierende Zeit wird jeweils ausgerechnet. Der Vektor k entspricht den gesuchten 3 Koeffizienten. Also z.B.

$$Vanderm = \begin{pmatrix} u^2 & u & 1 \\ v^2 & v & 1 \\ w^2 & w & 1 \\ x^2 & x & 1 \\ y^2 & y & 1 \\ z^2 & z & 1 \end{pmatrix} \quad \text{z.B.} \quad A = \begin{pmatrix} 1^2 & 1 & 1 \\ 2^2 & 2 & 1 \\ 3^2 & 3 & 1 \\ 4^2 & 4 & 1 \\ 5^2 & 5 & 1 \\ 6^2 & 6 & 1 \end{pmatrix} \quad \vec{b} = \begin{pmatrix} -10 \\ -39,4 \\ -81,2 \\ -154 \\ -249,5 \\ -342 \end{pmatrix} \quad \vec{k} = \begin{pmatrix} k_1 \\ k_2 \\ k_3 \end{pmatrix}$$

Die Vandermond'sche Matrix verwendet er deshalb, weil es sich wohl um ein Polynom vom Grad 2 handeln muss (er approximiert also $k_1x^2 + k_2x^1 + k_3x^0$). Statt Potenzen von x könnte er auch jede andere Funktion von x verwenden, also z.B. e^x oder tan(x), und nach dieser approximieren.

Daraus ergibt sich nun folgendes LGS, wobei r der Residuenvektor ist, der als ausgleichende Kraft wirkt. Ziel ist es nun einen Vektor k zu finden, so, dass $\vec{r}^T \cdot \vec{r}$ minimal wird. Also, dass die gefundene Funktion „möglichst gut" passt.

$\vec{r}^T \cdot \vec{r}$ bezeichnet die Summe der Fehlerquadrate. Denn r (der Fehlervektor) enthält die Längen der fehlenden Stücke. Der Vektor r ist nötig, weil wir eine Funktion approximieren, deren Grad kleiner ist als die Zahl der Gleichungen. Wären b und k vom gleichen Typ, so handelte es sich um eine Interpolation, und es ließe sich eine Funktion finden, so dass r wegfällt.

$A \cdot \vec{k} = \vec{b} - \vec{r}$ mit der Forderung $\vec{r}^T \cdot \vec{r} = \min.$

Das lässt sich folgendermaßen ausdrücken:
Q sei eine Funktion von k, deren Minimum gesucht ist.

$$Q(k1, k2, k3, ...) = \vec{r}^T \cdot \vec{r}$$
$$Q(\vec{k}) = \vec{r}^T \cdot \vec{r}$$
$$Grad(Q) = Grad(\vec{r}^T \cdot \vec{r}) = \vec{0}$$

Durch Bestimmung des Gradienten, also den ersten Ableitungen von Q nach allen k_i, lassen sich die Extremwerte finden.

Nun stellt sich berechtigterweise die Frage, warum wir immer das Minimum, und nicht etwa das Maximum finden. Das liegt an der positiven Definitheit von $C=A^TA$. Nimmt man nämlich Q, bildet davon alle zweiten Ableitungen und arrangiert diese in einer Matrix, so erhält man C. $\left(\frac{\partial Q^2}{\partial k_i \partial k_j}\right) = C$

Ein Minimum liegt dann vor, wenn alle zweiten Ableitungen positiv sind.
Behauptung C ist positiv definit.

z.Z: $\vec{d}^T \cdot C \cdot \vec{d} > 0; \quad \vec{d} \neq \vec{0}$

$$\vec{d}^T \cdot C \cdot \vec{d} = \underbrace{\vec{d}^T \cdot A^T}_{\vec{v}^T} \cdot \underbrace{A \cdot \vec{d}}_{\vec{v}}$$

$$\vec{v}^T \cdot \vec{v} > 0$$

Summe aus Quadraten ist größer als 0.

Durch Umstellung und Einsetzung in erhält man:

$$A \cdot \vec{k} = \vec{b} - \vec{r} \qquad Q(\vec{k}) = (\vec{b} - A \cdot \vec{k})^T \cdot (\vec{b} - A \cdot \vec{k})$$

$$\vec{b} - A \cdot \vec{k} = \vec{r} \quad => \quad Grad((\vec{b} - A \cdot \vec{k})^T \cdot (\vec{b} - A \cdot \vec{k})) = \vec{0}$$

Hat man eine quadratische Matrix C, so lässt sich folgende Gleichung lösen.

$$2C \cdot \vec{k} - 2C^T \cdot \vec{d} = \vec{0}$$

$$C = A^T A$$

C erhält man auf diese Weise : $2A^T \cdot A \cdot \vec{k} - 2A^T \cdot \vec{b} = \vec{0}$

Nun hat man die Normalgleichungen:

$$A^T \cdot A \cdot \vec{k} = A^T \cdot \vec{b}$$

$$\left(A^T \cdot A\right)^{-1} \cdot A^T \cdot A \cdot \vec{k} = \left(A^T \cdot A\right)^{-1} \cdot A^T \cdot \vec{b}$$

Multipliziert man nun von links $(A^TA)^{-1}$ ran, erhält man eine Vektorgleichung, mit der sich k direkt ausrechnen lässt.

$$\vec{k} = \left(A^T \cdot A\right)^{-1} \cdot A^T \cdot \vec{b}$$

Die einfachste Möglichkeit hat aber (wie fast immer) einen Haken:
In dieser Rechnung tauchen Inverse von A auf und das bedeutet eine Verschlimmerung des Fehlers. Daher haben sich viele kluge Köpfe Gedanken gemacht, wie man dieses Problem ohne eine Invertierung hinbekommen kann. Rausgekommen sind dabei Verfahren, die verschiedene Zerlegungen der Matrix A in Beziehung stellen.

Beispiel für dierektes Ausrechnen.

$$\vec{k} = \left(A^T \cdot A\right)^{-1} \cdot A^T \cdot \vec{b}$$

$$\vec{k} = \left(\begin{pmatrix} 1 & 4 & 9 & 16 & 25 & 36 \\ 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 4 & 2 & 1 \\ 9 & 3 & 1 \\ 16 & 4 & 1 \\ 25 & 5 & 1 \\ 36 & 6 & 1 \end{pmatrix}\right)^{-1} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 4 & 9 & 16 & 25 & 36 \\ 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} -10 \\ -39{,}4 \\ -81{,}2 \\ -154 \\ -249{,}5 \\ -342 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -9{,}462 \\ -1{,}23 \\ 1{,}91 \end{pmatrix}$$

Lösung durch QR-Zerlegung:

Bei der QR-Zerlegung wird die Matrix A in eine orthogonale Matrix Q, und in eine rechte obere Dreiecksmatrix R zerlegt. Damit lässt sich schließlich ein LGS in Zeilenstaffelform aufstellen, das sicher gelöst werden kann. Hauptgedanke, und Vorteil, dieser Methode ist es das Invertieren zu vermeiden. Erreicht wird das durch die Tatsache, dass $Q^{-1}=Q^T$, wenn Q orthogonal:

1.
$$Q = \begin{pmatrix} q_1 & q_2 & \cdots q_n \end{pmatrix}$$
$$A = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & \cdots a_n \end{pmatrix}$$
$$R = \begin{pmatrix} r_{i,j} \end{pmatrix}$$

Zerlege Q und A in Spaltenvektoren und R in Einzelelemente.

2.
$$\vec{r}_{1,1} = \|\vec{a}_1\|$$
$$\vec{q}_1 = \vec{a}_1 / \vec{r}_{1,1}$$

Erster Iterationsschritt.

3.
$$r_{i,k} = \vec{q}_i^{\,T} \cdot \vec{a}_k \quad i = 1 \ldots k-1$$
$$\vec{q}_k = \vec{a}_k - r_{1,k} \cdot \vec{q}_1 - \cdots - r_{k-1,k} \cdot \vec{q}_{k-1}$$
$$r_{k,k} = \|\vec{q}_k\|$$

k-ter Iterationsschritt.

Nun gilt folgendes:
A=QR $\qquad$ $Q^TQ=E$ $\qquad$ $Q^T=Q^{-1}$
$$R \cdot \vec{k} = Q^T \cdot \vec{b}$$
Damit lässt sich k eindeutig bestimmen.

Dieses Verfahren ist allerdings nicht immer numerisch stabil. Je linearer nämlich die Vektoren der Matrix A sind ($\vec{a}_n \cdot \vec{a}_k ; n \neq k$ ist sehr klein), desto stärker wirken sich insbesondere Rundungsfehler des Rechners aus. Folge ist, dass die Matrix Q nicht so orthogonal ist, wie man erwarten würde. Sie ist fast orthogonal. Daher hilft man sich in der Praxis mit einem Trick. Man nimmt einfach die Matrix Q, und orthogonalisiert sie einfach ein zweites mal. Da Q ja schon ziemlich orthogonal ist, entstehen dieses Mal auch nur ganz geringe Rundungsfehler. Der Rechenaufwand verdoppelt sich dabei natürlich - macht aber nix, dafür gibt's ja schnelle Computer.

Gleiches Beispiel aber QR-Zerlegt.
Auf Nachorthogonalisierung wird verzichtet.

- Matrix A wird in ihre Spaltenvektoren zerlegt.

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 4 & 2 & 1 \\ 9 & 3 & 1 \\ 16 & 4 & 1 \\ 25 & 5 & 1 \\ 36 & 6 & 1 \end{pmatrix}$$

- Durch Anwendung des Orthogonalisierungsverfahrens ergibt sich:

$$Q = \begin{pmatrix} 0{,}02 & 0{,}34 & 0{,}84 \\ 0{,}08 & 0{,}52 & 0{,}17 \\ 0{,}18 & 0{,}53 & -0{,}22 \\ 0{,}33 & 0{,}38 & -0{,}34 \\ 0{,}52 & 0{,}07 & -0{,}16 \\ 0{,}75 & -0{,}41 & 0{,}28 \end{pmatrix} R = \begin{pmatrix} 47{,}6969 & 9{,}2458 & 1{,}9078 \\ 0{,}0 & 2{,}3481 & 1{,}4309 \\ 0{,}0 & 0{,}0 & 0{,}5590 \end{pmatrix}$$

Somit Gilt:
$Q^TQ=E$
$A=QR$
und
$k=R^{-1}Qb$ bzw. Rückwärtseisetzen um Inverse zu Vermeiden.

$$k = \begin{pmatrix} -9{,}469 \\ -1{,}229 \\ 1{,}91 \end{pmatrix}$$

Probe:

$$\vec{b} \approx A \cdot \vec{k} = \begin{pmatrix} -8{,}78 \\ -38{,}42 \\ -87{,}01 \\ -154{,}52 \\ -240{,}98 \\ -346{,}38 \end{pmatrix}$$

Fehlerabschätzung:

Als Indikator für die Güte der Verfahren eignet sich die Summe Der Fehlerquadrate. Je kleiner sie ist, desto besser approximiert das Verfahren:

Dierektes Ausrechnen	QR-Zerlegung:
128,138	128,134

Robert Köpferl ano 2000