§5 Ausgleichsrechnung "Least squares": (N/S S.109)

Bsp I: Model-Annahme: lineare Dependenz

$$\mathbb{R} \ni b = \underline{d}^T \underline{t} + c \;;\; \underline{t} \in \mathbb{R}^n$$ (Messpunkte, Werte aus Experimente)

<u>Ziel</u>: finde Parameter $d \in \mathbb{R}^n$, $c \in \mathbb{R}$ sodass für Messpunkte

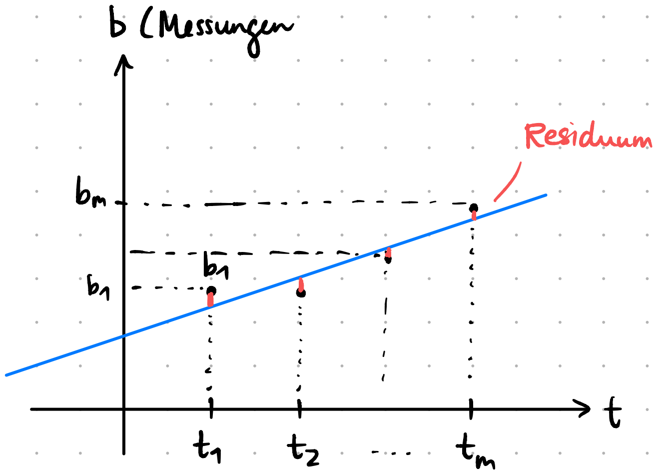
$\underline{t}_1, \underline{t}_2, \dots, \underline{t}_m$

für diese Punkte misst man $b_1, b_2, \dots, b_m$

Bsp: Nehme Dimension $n = 1$:

Model $b = dt + c$

$$\begin{cases} dt_1 + c = b_1 \\ dt_2 + c = b_2 \\ \vdots \\ dt_m + c = b_m \end{cases}$$



Experiment: nie Gerade! (Messfehler) → die Gleichungen <u>können</u> nicht gleichzeitig erfüllt werden.

Wir wollen finden: Was <u>wäre</u> die Gerade?

$$\begin{cases} dt_1 + c - b_1 = r_1 \\ dt_2 + c - b_2 = r_2 \\ \dots \\ dt_m + c - b_m = r_m \end{cases}$$

Residuum-Vektor $\underline{r} = \begin{bmatrix} r_1 \\ r_2 \\ \vdots \\ r_m \end{bmatrix}$

Ansatz: $\|\underline{r}\|_2^2$ minimieren

$$\min_{\substack{\underline{p} \in \mathbb{R}^n \\ \underline{q} \in \mathbb{R}}} \left\{ |r_1|^2 + \dots + |r_m|^2 \right\} = \min_{\substack{\underline{p} \in \mathbb{R}^n \\ \underline{q} \in \mathbb{R}}} \sum_{i=1}^{m} |\underline{p}^T \underline{t}_i + \underset{1\cdot}{\underline{q}} - b_i|^2 =$$

Unbekannten / Variablen sind die gesuchten Parameter

$\underline{p}, q$ $\quad \underline{x} = \begin{bmatrix} q \\ \underline{p} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{1+n}$

$(\underline{d}, c)$

$$\underline{\underline{A}} = \begin{bmatrix} 1 & \underline{t}_1^T \\ 1 & \underline{t}_2^T \\ 1 & \vdots \\ \vdots & \vdots \\ 1 & \underline{t}_m^T \end{bmatrix} , \quad \underline{b} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ b_m \end{bmatrix}$$

entspricht dem q
m Zeilen (Messungen)
$1+n$ Spalten

Messwerte

$$\min_{\underline{x} \in \mathbb{R}^{1+n}} \| \underline{\underline{A}}\, \underline{x} - \underline{b} \|_2^2$$

$\underline{d}, \underline{c} :=$ diejenigen q, c, die das Minimum realisieren.

Bsp: $n=1$, Model $b = dt + c$

Messungen $t_1 = 0$, $b_1 = 6$
$t_2 = 1$, $b_2 = 0$
$t_3 = 2$, $b_3 = 0$
$\Rightarrow \quad \underline{b} = \begin{bmatrix} 6 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$

$$\begin{cases} dt_1 + c = b_1 \\ dt_2 + c = b_2 \\ dt_3 + c = b_3 \end{cases} \quad \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} c \\ d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$\rightarrow$ hat keine Lösung! (Wegen Fehler in den Messungen).

$\Rightarrow$ d.h. Problem verändern zu:

$$\min_{\underline{x} \in \mathbb{R}^2} \| \underline{\underline{A}}\, \underline{x} - \underline{b} \|_2^2$$

Bsp II: $f \in V$ lin. Raum ∞ dimensional, z.B. L^2
$\cup$
V_n lin. Raum endlichdimensional

$\Downarrow$

$f_n \in V_n$, $\dim V_n < \infty$

$\hookrightarrow$ Basis in $V_n = b_1, \dots, b_n$

$$f \approx f_n = \sum_{j=1}^{n} \underbrace{x_j}_{\in \mathbb{R}} b_j$$

z.B. $f(t)$ = Signal, Audiosignal

$$f(t) \approx f_n(t) = \sum_{j=1}^{n} x_j b_j(t)$$

f unbekannt / sehr kompliziert $\Rightarrow$ verwende Messungen $y_i = f(t_i)$

Ziel: t_i, y_i für $i = 1, 2, \dots, m$ gegeben.

finde Koeffizienten $x_1, \dots, x_n$ sodass

$$\sum_{i=1}^{m} |f_n(t_i) - y_i|^2 = \text{minimal}$$

$\Rightarrow$ lineares Problem, weil Koeffizienten linear vorkommen.

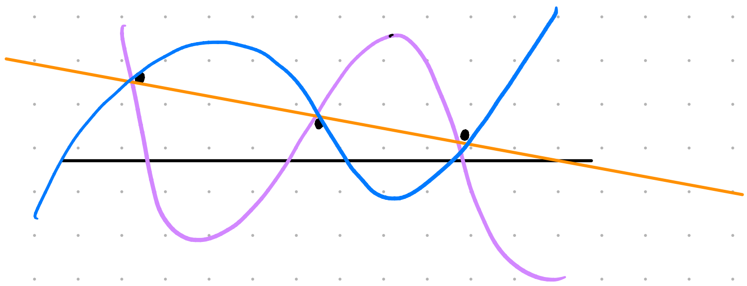
Bsp: $V = L^2(0,1) = \{ f : [0,1] \to \mathbb{R}, \int_0^1 |f(t)|^2 \, dt < \infty \}$

Wahl: $b_i(t) = t^{i-1} \Rightarrow V_n = \mathbb{P}_n$

$\Rightarrow$ Ergebnis: das "beste" Polynom P_n von Grad maximal $n-1$,

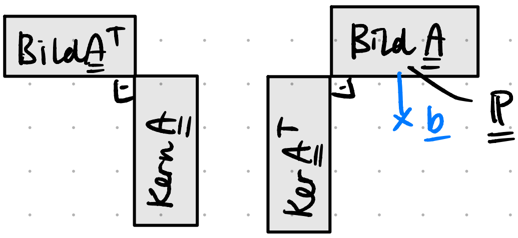
sodass $\sum_{i=1}^{m} |P_n(t_i) - y_i|^2 = \text{minimal}$

Matlab: Polyfit



$$\begin{array}{cc} & n \\ m & \left[\ \underline{\underline{A}}\ \right] \end{array} \left[\ \underline{x}\ \right] = \left[\ \underline{b}\ \right]$$

$\underline{\underline{A}} : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$

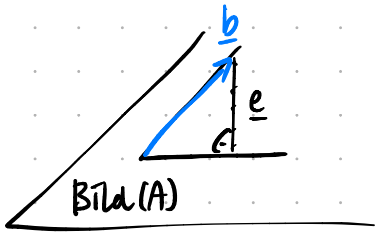


$\underline{b} \in \mathbb{R}^m$ Fundamentalsatz der LA:

$\underline{b} = \underline{p} + \underline{e}$ mit $\underline{p} \in \text{Bild}(\underline{\underline{A}})$, $\underline{e} \in \text{Ker}(\underline{\underline{A}}^T)$

mit $\underline{p} \perp \underline{e}$

↳ $\underline{p}$ ist die "beste" ($\|.\|_2$) Approximation im Bild $(\underline{\underline{A}})$ an $\underline{b}$



$p \in \text{Bild}(A) \Rightarrow$ es gibt eine Lösung $\hat{x}$: $A\hat{x} = p$

Residuum: $b - A\hat{x} = b - p = e \perp \text{Bild}(A)$

Länge vom Residuum: $\|\text{Residuum}\|_2^2 = \|e\|_2^2 = \text{Minimal} \Rightarrow$

$\Rightarrow$ $\hat{x}$ ist die Lösung im Sinne der kleinsten Quadrate

$e \perp \text{Bild}(A)$

Fundamentalsatz der LA $\mathbb{R}^m = \text{Bild}(A) \underset{\perp}{+} \text{Ker}(A^T)$

$e \in \text{Ker}(A^T)$

$A^T b = A^T(p+e) = A^T p + A^T e = A^T p$

Somit $Ax = b \Rightarrow \underbrace{\boxed{A^T A x = A^T b}}_{\text{Normalengleichung}} = A^T p$

$A^T \;|$

Theorem: Falls Rang$(A) = n \Rightarrow A^T A$ invertierbar.

Beweis: $A^T A$ invertierbar $\Leftrightarrow$ $A^T A x = 0$ hat nur die Lösung $x = 0$

$A^T A x = 0 \Rightarrow x^T A^T A x = 0 \Leftrightarrow$

$x^T \;|$ $\quad (Ax)^T (Ax) = 0 \Leftrightarrow \|Ax\|_2^2 = 0$

$\left.\begin{array}{l} \Rightarrow Ax = 0 \\ \text{Rang}(A) = n \end{array}\right\} \Rightarrow x = 0$

Bem: Typischerweise ist Rang$(A) = n \le m$

Besser
- num. Fehler vermeiden
- wenn viele Einträge in A 0 sind

Alternative: $\underline{\underline{A}} = \underline{\underline{Q}} \cdot \underline{\underline{R}} = \underline{\underline{Q}} \begin{bmatrix} \tilde{\underline{\underline{R}}} \\ 0 \end{bmatrix} \begin{matrix} \}n \\ \}m-n \end{matrix}$ mit $\underline{\underline{Q}}$ orthogonal / unitär

$$\underline{\underline{Q}}^H \underline{\underline{Q}} = \underline{\underline{I}}$$

$$\min_{\underline{x} \in \mathbb{R}^n} \| \underline{\underline{A}}\underline{x} - \underline{b} \|_2^2 = \min_{\underline{x} \in \mathbb{R}^n} \| \underline{\underline{Q}}\,\underline{\underline{R}}\,\underline{x} - \underbrace{\underline{\underline{Q}}\,\underline{\underline{Q}}^H}_{\underline{\underline{I}}} \underline{b} \| = \min_{x \in \mathbb{R}^n} \| \underline{\underline{Q}} (\underline{\underline{R}}\,\underline{x} - \underline{\underline{Q}}^H \underline{b}) \|_2^2 =$$

$$= \min_{x \in \mathbb{R}} \| \underline{\underline{R}}\,\underline{x} - \underline{\underline{Q}}^H \underline{b} \|_2^2 = \min_{x \in \mathbb{R}^n} \left\| \begin{bmatrix} \tilde{\underline{\underline{R}}} \\ 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \tilde{b}_1 \\ \vdots \\ \tilde{b}_n \\ \tilde{b}_{n+1} \\ \vdots \\ \tilde{b}_m \end{bmatrix} \right\|_2^2 =$$

$\underline{\underline{Q}}$ orthogonal / unitär = erhält die $\|\cdot\|_2$!!

$$= \min_{\underline{x} \in \mathbb{R}^n} \left\| \begin{bmatrix} \tilde{\underline{\underline{R}}} x \\ 0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \beta \\ \tilde{b}_{n+1} \\ \vdots \\ \tilde{b}_m \end{bmatrix} \right\|_2^2 = \min_{\underline{x} \in \mathbb{R}^n} \left\| \begin{bmatrix} \tilde{\underline{\underline{R}}} x - \underline{\beta} \\ \tilde{b}_{n+1} \\ \vdots \\ \tilde{b}_m \end{bmatrix} \right\|_2^2 =$$

$$= \min_{\underline{x} \in \mathbb{R}^n} \Big(\| \tilde{\underline{\underline{R}}}\,\underline{x} - \underline{\beta} \|_2^2 + \underbrace{|\tilde{b}_{n+1}| + \ldots + |\tilde{b}_n|^2}_{\text{hängt nicht von } \underline{x} \text{ ab.}} \Big)$$

$$\begin{bmatrix} \ddots & * \\ 0 & \ddots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \beta \end{bmatrix} \Rightarrow \underline{x} = \text{Lösung von } \tilde{\underline{\underline{R}}}\,\underline{x} = \underline{\beta}$$

$$= 0 + |\tilde{b}_{n+1}|^2 + \ldots + |\tilde{b}_n|^2$$

Somit ist dieses $\underline{x}$ die Lösung im Sinne der kleinsten Quadrate, und der Fehler ist die Norm von Residuum.

Bsp: (F.S. vom Bsp. vorher)

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}}_{\underline{\underline{A}}} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} 6 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}}_{\underline{b}}$$

Normalengleichung: $\underline{\underline{A}}^T \underline{\underline{A}}\,\underline{x} = \underline{\underline{A}}^T \underline{b}$

$$\begin{bmatrix} 3 & 3 \\ 3 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6 \\ 0 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{cases} x_1 = 5 \\ x_2 = -3 \end{cases}$$

mit QR-Zerlegung: ($\underline{\underline{Q}}$ schon gegeben)

$$\underline{\underline{A}} = \underline{\underline{Q}}\,\underline{\underline{R}} = \begin{bmatrix} -\frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & ? \\ -\frac{1}{\sqrt{3}} & 0 & ? \\ -\frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & ? \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -\frac{3}{\sqrt{3}} & -\frac{3}{\sqrt{3}} \\ 0 & -\frac{2}{\sqrt{2}} \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

wissen nicht, aber völlig egal, wegen

$$\tilde{\underline{\underline{R}}}\,\underline{x} = \underline{\underline{Q}}^T \underline{b}$$

$$\begin{bmatrix} -\frac{3}{\sqrt{3}} & -\frac{3}{\sqrt{3}} \\ 0 & -\frac{3}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{6}{\sqrt{3}} \\ \frac{6}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{cases} x_2 = \\ x_1 = 5 \end{cases}$$

Achtung! Wir haben vorausgesetzt, dass $\text{Rang}(\underline{\underline{A}}) = n$

Aber in der Praxis darf man das nicht annehmen.

$\Rightarrow$ allgemeine Software: Singulärwertzerlegung