Daniel Scholz · www.taramath.de · daniel@taramath.de · 18. Mai 2016

Lineare Regression

In diesem Anwendungsbeispiel definieren wir lineare Ausgleichsprobleme und zeigen, wie diese unter Verwendung einer QR-Zerlegung gelöst werden können. Als explizites Beispiel präsentieren wir das Ausgleichsproblem zur linearen Regression, welches auch zur Regression beliebiger Polynome verallgemeinert werden kann.

1 Lineare Ausgleichsprobleme

Gegeben sei eine Matrix $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ sowie ein Vektor $b \in \mathbb{R}^m$. Dabei gelte $m > n$ und der Rang von A sei gleich n. Unter diesen Annahmen besitzt das lineare Gleichungssystem

$$A \cdot x \ = \ b$$

keine Lösung. Mit der Euklidische Norm $\|\cdot\|_2$ ist man daher häufig daran interessiert, eine Lösung der Optimierungsaufgabe

$$\min \ \|A \cdot x - b\|_2^2, \qquad \text{sodass} \qquad x \ \in \ \mathbb{R}^n \tag{1}$$

zu bestimmen. Eine derartige Optimierungsaufgabe wird als ***lineares Ausgleichsproblem*** bezeichnet. Nun sei

$$A \ = \ Q \cdot R.$$

eine QR-Zerlegung von A. Somit ist Q orthogonal und es folgt $\|Q\|_2 = \|Q^\top\|_2 = 1$. Weiterhin sei

$$c \ = \ (c_1, \ldots, c_m) \ = \ Q^\top \cdot b \ \in \ \mathbb{R}^m$$

und damit definieren wir die Teilvektoren

$$c_u \ = \ (c_1, \ldots, c_n) \ \in \ \mathbb{R}^n \qquad \text{sowie} \qquad c_s \ = \ (c_{n+1}, \ldots, c_m) \ \in \ \mathbb{R}^{m-n}.$$

Analog sei $R_u \in \mathbb{R}^{n\times n}$ die $(n \times n)$-Matrix, welche aus den ersten n Zeilen von R besteht. Es sei bemerkt, dass alle anderen Zeilen von R aufgrund der Definition der

QR-Zerlegung ohnehin identisch Null sind und darüber hinaus ist R_u eine obere rechte Dreiecksmatrix.

Unter Verwendung dieser Ergebnisse und Notationen folgt

$$\begin{aligned} \|A \cdot x - b\|_2^2 &= \|Q \cdot R \cdot x - b\|_2^2 \;=\; \|Q^\top\|_2^2 \cdot \|Q \cdot R \cdot x - b\|_2^2 \\ &= \|Q^\top \cdot (Q \cdot R \cdot x - b)\|_2^2 \;=\; \|R \cdot x - Q^\top \cdot b\|_2^2 \\ &= \|R_u \cdot x - c_u\|_2^2 + \|c_s\|_2^2. \end{aligned}$$

Diese Rechnung zeigt, dass das lineare Ausgleichsproblem (1) gelöst werden kann, indem das lineare Gleichungssystem

$$R_u \cdot x \;=\; c_u$$

gelöst wird. Dabei ist R_u eine obere rechte Dreiecksmatrix, dessen Diagnoaleinträge alle ungleich Null sind, sodass das Gleichungssystem eine eindeutige Lösung besitzt.

2 Beispiel lineare Regression

Als explizites Anwendungsbeispiel untersuchen wir die ***lineare Regression***. Gegeben seien m Messpunkte

$$m_i \;=\; (u_i,\, z_i) \qquad \text{für } i = 1, \ldots, m.$$

Dabei sei bekannt, dass die Messpunkte (theoretisch) alle auf einer Geraden

$$f(x) \;=\; w \cdot x + e$$

liegen. Aufgrund von Messfehlern ist dies allerdings nur theoretisch der Fall, praktisch sind alle Messpunkte fehlerbehaftet. Man möchte daher die Steigung w und den Achsenabschnitt e derart bestimmen, sodass

$$\sum_{i=1}^{m} \Big(f(u_i) - z_i \Big)^2 \;=\; \sum_{i=1}^{m} \Big(w \cdot u_i + e - z_i \Big)^2$$

minimiert wird. Unter Verwendung des Vektors $b = (z_1, \ldots, z_m) \in \mathbb{R}^m$ sowie der Matrix

$$A \;=\; \begin{pmatrix} u_1 & 1 \\ \vdots & \vdots \\ u_m & 1 \end{pmatrix} \;\in\; \mathbb{R}^{m \times 2}$$

erhalten wir schließlich das lineare Ausgleichsproblem

$$\min\; \|A \cdot x - b\|_2^2, \qquad \text{sodass} \qquad x \;=\; (w, e) \;\in\; \mathbb{R}^2,$$

welches wir wie zuvor beschrieben unter Verwendung einer QR-Zerlegung lösen können. Da wir die Summe über den Quadraten der Fehler minimieren, wird dieses

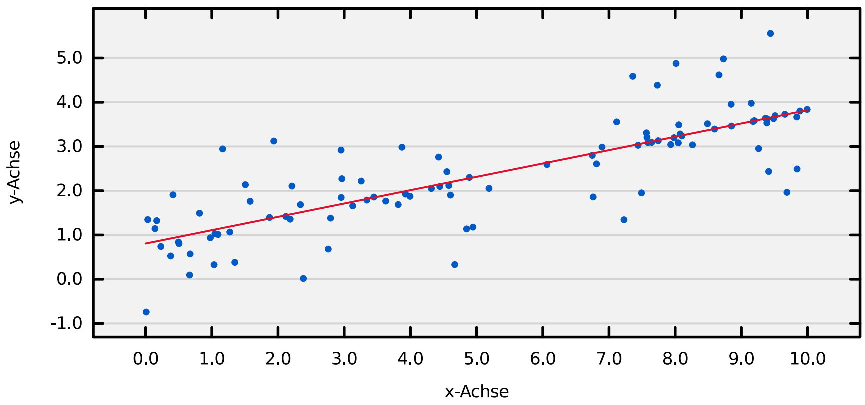

Abb. 1 Beispiel zur linearen Regression mit $m = 100$ Messpunkten (blau), wobei zufällige Messfehler generiert wurden. Die Lösung (rot) wurde unter Verwendung des zugehörigen linearen Ausgleichsproblems berechnet

Verfahren zur linearen Regression auch als ***Methode der kleinsten Quadrate*** bezeichnet.

Abb. 1 zeigt ein Beispiel mit $m = 100$ Messpunkten, wobei zufällige Messfehler generiert wurden. Die Lösung des zugehörigen Ausgleichsproblems liefert schließlich die Lösung der linearen Regression.

Aufgabe 2.1 Übertrage die Methode der kleinsten Quadrate auf die Regression einer quadratischen Funktion

$$f(x) \;=\; z \cdot x^2 + w \cdot x + e.$$

Formuliere auch diesen Fall als lineares Ausgleichsproblem.