doi:10.20312/dim.2015.10

Die exakte Lösung der ausgleichenden Geraden im Rahmen der Total Least Squares Methode

Josef Zavoti
NYME KTK, MTA CSFK GGI
zavoti@ggki.hu

ÖSSZEFOGLALÓ. Ebben a cikkben adott megfigyelési értékek alapján a legkisebb négyzetek módszerével úgy becsüljük meg egy kiegyenlítő egyenes paramétereit, hogy az egyenes és az adott értékek eltéréseinek négyzetösszege minimális legyen. Két lehetőség létezik: vagy csak az egyik (*x* vagy *y*) vagy mindkét változót (*x* és *y*) véletlen hibával terhelt mérési eredménynek tekintjük.

ABSTRACT. In this work we apply the least squares method to a set of given observation values to obtain the parameters of an adjusted straight line so that the sum of the squares of the differences of the given values from the straight line is minimal. There are two possibilities: either only one of the variables x and y or both of them are considered as results of measurements containing random errors.

ZUSAMMENFASSUNG. In diesem Beitrag wird mit der Methode der kleinsten Quadratsumme die Parameter der ausgleichenden Geraden aus einer Reihe empirischer Beobachtungswerte so bestimmt werden, dass die Summe der Quadrate der Abweichungen der Funktionswerte von den empirischen Werten ein Minimum wird. Es gibt zwei Möglichkeiten: entweder eine (*x* oder *y*) oder beide (*x* und *y*) Koordinatenkomponenten mit zufälligen Fehlern behaftete Messgrößen sind.

1. Einführung

In den angewandten Wissenschaften besonders in der Engineering Practice ist eine allgemeine Aufgabe zu gegebenen Punkten eine Funktion anpassen. Mit diesem Problem sind viele Forscher schon beschäftigt. Einige der ersten Versuchen der Total Least Squares (TLS) kann man in York (1966), in Golub und Van Loan (1980) und in Reed (1989) finden. Huffel und Vandewalle (1991) und Reed (1992) hatten das Verfahren weiterentwickelt. Weitere Verfeinerungen hat Nievergelt (1994) und Schaffrin (2006) empfohlen. Die Anwendungen der TLS sollte man unter anderem Lenzmann und Lenzmann (2001), Guo (2007) und Reinking (2008) erwähnen. In Ungarn verhandelte Hazay (1980) das Thema.

2. Mathematische Modellen der Anpassung der ausgleichenden Geraden

Gegeben seien n Punkte (x_i, y_i), $i = 1,2,...,n$, $n \geq 2$ in einem kartesischen Koordinatensystem. Ziel ist die Bestimmung einer ausgleichenden Gerade mit der Gleichung $y = ax + b$ wobei geometrisch gesehen die Unbekannten a die Steigung und b der Achsabschnitt sind.

I. Das herkömmliche, allbekannte Modell. Bei diesem Fall ist es so betrachtet, dass es sich bei den Werten y_i um mit zufälligen Fehlern behaftete Beobachtungen und bei den Werten x_i um fehlerfreie Größen handelt. Wenn man die Verbesserungen v_{y_i} einführt, erhält man die linearen Beobachtungsgleichungen

$$y_i + v_{y_i} = \quad ax_i + b \qquad\qquad i = 1,2,...,n\,. \tag{1}$$

Die Lösung dieser Ausgleichung nach der Methoden der kleinsten Quadraten ist wohlbekannt und nimmt folgende Gestalt an:

$$a = \frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2}, \qquad b = \bar{y} - a\bar{x}\,. \tag{2}$$

II. Wenn die Variable x mit zufälligen Fehlern behaftet ist, dann die Beobachtungen x_i sind mit Verbesserungen v_{x_i} versehen:

$$y_i = \quad a(x_i + v_{x_i}) + b \qquad\qquad i = 1,2,...,n\,. \tag{3}$$

Für die transformierten linearen Beobachtungen bekommt man

$$x_i + v_{x_i} = \quad \frac{y_i}{a} - \frac{b}{a} \qquad\qquad i = 1,2,...,n\,. \tag{4}$$

Nach elementaren mathematischen Schritten ergibt sich die LS-Lösung, die mit der Parameterschätzung im linearen GM-Modell identisch ist

$$a = \frac{\sum_{i=1}^{n}(y_i - \bar{y})^2}{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}\quad, \qquad b = \bar{y} - a\bar{x}. \tag{5}$$

III. Wenn es sich sowohl bei den Werten x_i als auch bei den Werten y_i um mit zufälligen Fehlern behaftete Beobachtungen handelt, man einführt die Verbesserungen v_{x_i} und v_{y_i} für beide Variable

$$y_i + v_{y_i} = \quad a(x_i + v_{x_i}) + b \qquad\qquad i = 1,2,...,n\,. \tag{6}$$

Von jedem gegebenen Punkt ist eine lotrechte Gerade zur gesuchten Gerade zu ziehen. In diesem Fall soll man die Bedingungen formulieren und ist das nachstehende Gleichungssystem für die Unbekannten (x_0, y_0) zu lösen

$$\begin{aligned} y_0 &= ax_0 + b \\ y_0 - y_i &= -\frac{x_0 - x_i}{a}. \end{aligned} \tag{7}$$

Die Lösungen sind die Folgenden

$$x_0 = \frac{ay_i + x_i - ab}{a^2 + 1}, \qquad y_0 = \frac{a^2 y_i + ax_i + b}{a^2 + 1}\,. \tag{8}$$

Die Minimierung das Quadrat der lotrechten Distanz zur ausgleichende Gerade ist gleichbedeutend mit der Minimierung vom $\sum_{i=1}^{n} v_{x_i}^2 + v_{y_i}^2$, wobei v_{x_i} und v_{y_i} die an den Punktkoordinaten (x_i, y_i) anzubringenden Verbesserungen sind. Damit können wir das Quadrat der lotrechten Distanz aufschreiben

$$d_i^2 = v_{x_i}^2 + v_{y_i}^2 = \left(x_i - \frac{ay_i + x_i - ab}{a^2+1}\right)^2 + \left(y_i - \frac{a^2 y_i + ax_i + b}{a^2+1}\right)^2 \qquad i = 1,2,...,n. \tag{9}$$

Nach einiger mathematischen Wandlung vereinfacht sich die vorige Formel

$$d_i^2 = \frac{(y_i - ax_i - b)^2}{a^2+1} \qquad i = 1,2,...,n. \tag{10}$$

Also zur Lösung der Aufgabe soll man die Extremwerte einer zweivariablen Funktion $F(a,b)$ aufsuchen

$$F(a,b) = \frac{1}{a^2+1}\sum_{i=1}^{n}(y_i - ax_i - b)^2 \qquad \to \quad \min \tag{11}$$

Zur Existenz der Extremwerte eine notwendige Bedingung ist, um die partiellen Ableitungen verschwinden. Nehmen wir zuerst die partielle Abteilung nach der Variable b

$$\frac{\partial F(a,b)}{\partial b} = \frac{-2}{a^2+1}\sum_{i=1}^{n}(y_i - ax_i - b) = 0\,. \tag{12}$$

Aus dieser Bedingung kommt man zu der Formel

$$b = \bar{y} - a\bar{x}\,. \tag{13}$$

Man kann zur Schwerpunktkoordinaten übergehen

$$\begin{aligned} X_i &= x_i - \bar{x} \\ Y_i &= y_i - \bar{y} \end{aligned} \qquad i = 1,2,...,n. \tag{14}$$

Der gewählten Verfahren ermöglicht es, von der Zielfunktion mit zwei Variablen zu einer Zielfunktion mit einer Variablen überzugehen. Man erhält auf diese Schreibweise der Punktkoordinaten und mit der Bedingung $b = \bar{y} - a\bar{x}$ ein Modell nur mit einer Variablen und die Zielfunktion $G(a)$

$$G(a) = \frac{1}{a^2+1}\sum_{i=1}^{n}(Y_i - aX_i)^2 \qquad \to \quad \min\,. \tag{15}$$

Durch Bildung der Ableitung nach des Variable a gelangt man zu dem Zusammenhang

$$\frac{\partial G(a)}{\partial a} = \frac{-2a}{(a^2+1)^2}\sum_{i=1}^{n}(Y_i - aX_i)^2 - \frac{2}{(a^2+1)}\sum_{i=1}^{n}X_i(Y_i - aX_i) = 0\,. \tag{16}$$

Aus dem vorherige Formel ergibt sich zunächst

$$(a^2+1)\sum_{i=1}^{n}(X_iY_i - aX_i^2) + a\sum_{i=1}^{n}(Y_i - aX_i)^2 = 0\,, \tag{17}$$

lautet dann die Gleichung mit zweiten Grad als Endresultat

$$a^2 \sum_{i=1}^{n} X_i Y_i + a \sum_{i=1}^{n} (X_i^2 - Y_i^2) - \sum_{i=1}^{n} X_i Y_i = 0 . \quad (18)$$

Für die Lösungen einer quadratischen Gleichung ergibt sich nach der sogenannten kleinen Lösungsformel für den Parameter a der folgende Ausdruck

$$a_{1,2} = \frac{-\sum_{i=1}^{n} (X_i^2 - Y_i^2) \pm \sqrt{\left(\sum_{i=1}^{n} (X_i^2 - Y_i^2) \right)^2 + 4 \left(\sum_{i=1}^{n} X_i Y_i \right)^2}}{2 \sum_{i=1}^{n} X_i Y_i} . \quad (19)$$

Da unter dem Wurzelzeichen eine positive Zahl auftritt, gibt es zwei reelle Lösungen, kann man es anzeigen, dass die Funktion $F(a,b)$ mit dem positiven Zeichen ihr minimaler Wert, mit dem negativen Zeichen ihr maximaler Wert aufnimmt.

3. Numerisches Beispiel

In Neitzel und Petrovic (2008) ist eine numerische Beispiel von der Arbeit Kupferers (2005, S91., Tab. 1) genommen.

i	x_i	y_i
1	0	0
2	1	1
3	2	4
4	3	6

Tab. 1: Numerisches Beispiel

Die Aufgabenstellung besteht darin, eine ausgleichende Gerade durch die Punkte 1 bis 4 zu berechnen, wobei die Koordinaten x_i, y_i als gleichgewichtige und unkorrelierte Beobachtungen angesehen werden.

In diesem Beispiel versucht Kupferer zu zeigen, dass die TLS-Lösung einer ausgleichenden Geraden und die GH-Lösung voneinander abweichen und Neitzel und Petrovic (2008) hat die selbe Aufgabe durch eine strenge Auswertung des nichtlinearen GH-Modells gelöst. Wir geben die exakte Lösung an (Tab. 2).

Ergebnisse	GH-I	GH-II	Kupferer	GH, streng	Exakt-III
Steigung $\hat{a}$	3.000	3.2667	3.241	3.241804	3.241804
Achsabschnitt $\hat{b}$	-1	-1.4000	-1.362	-1.362705	-1.362705
Verbesserungs-quadratsumme $v^T v$	4.000	0.4082	0.372	0.372946	0.372946

Tab. 2: Lösung des numerischen Beispiels

4. Schlussbemerkung

In diesem Beitrag als Hauptergebnis wurde die exakte Lösung der ausgleichenden Graden in Rahmen der TLS Methode abgeleitet indessen die Möglichkeiten der Methode der kleinsten Quadrate völlig einhielt waren, das heißt wurde jeweils die zulässige Lösungsverfahren des nichtlinearen GH-Modells eingesetzt. Dieser Teil der Arbeit ist als heuristische Lösungsverfahren des TLS-Modells zu nennen.

Außerdem anhand eines speziellen Beispiels, in dem die exakte Lösung der ausgleichenden Geraden angewendet war, wurde gezeigt, dass die strenge Auswertung des nichtlinearen GH-Modells und die Anwendung des TLS Methode die gleichen Ergebnisse liefern.

Literatur

[1] **Golub, G. H., van Loan, C.,** An Analysis of the Total Least Squares Problem. SIAM J. on Numerical Analysis, Vol. 17, Issue 6 (1980) 883-893.

[2] **Guo, R.,** Systematical analysis of the transformation procedures in Baden-Württemberg with Least Squares and Total Least Squares methods. Stuttgart (2007) 1-49.

[3] **Hazay, I.,** Die Variante der ausgleichenden Gerade. Geodäsie und Kartografie, Budapest, S. (1980) 88-96.

[4] **Huffel, van S., Vandewalle, J.,** The Total Least Squares Problem. Computational Aspects and Analysis. SIAM, Philadelphia (1991).

[5] **Kupferer, S.,** Anwendung der Total Least Squares Technik bei geodätischen Problemstellungen. Universität Karlsruhe (TH), Schriftenreihe des Studiengangs Geodäsie und Geoinformatik, 1, Universitätsverlag Karlsruhe (2005).

[6] **Lenzmann, E., Lenzmann, L.,** Zur Bestimmung eindeutiger Transformationsparameter. ZfV 126, S. (2001) 138-142.

[7] **Neitzel, F., Petrovic, S.,** Total Least Squares (TLS) im Kontext der Ausgleichung nach kleinsten Quadraten am Beispiel der ausgleichenden Geraden. ZfV 133, S. (2008) 141-148.

[8] **Nievergelt, Y.,** Total Least Squares: state of the art regression in numerical analysis. SIAM, Vol. 36, No. 2 (1994) 258-264.

[9] **Reed, B. C.,** Linear least-squares fit with errors in both coordinates. Am. J. Physics, Vol. 57 (1989) 642-646. (doi: http://dx.doi.org/10.1119/1.15963)

[10] **Reed, B. C.,** Linear least-squares fit with errors in both coordinates. II: Comments on parameter variances. Am. J. Physics, Vol. 60, No. 1 (1992) 59-62. (doi: http://dx.doi.org/10.1119/1.17044)

[11] **Reinking, J.,** Total Least Squares? ZfV 133, S. (2008) 384-389.

[12] **Schraffrin, B., Lee, I., Felus, Y., Choi, Y.,** Total Least-Squares (TLS) for geodetic straight-line and plane adjusment. Bollettino di Geodesia e Scienze Affini, No. 3 (2006) 141-165.

[13] **York, D.,** Least Squares fitting of a straight line. Can. J. Physics, 44 (1966) 1079-1086. (doi: http://dx.doi.org/10.1139/p66-090)