

# Ausgleich mit Parabeln bei Nebenbedingungen für die Koeffizienten

Helmuth Späth

## 1 Problemstellung

Gegeben seien Punkte  $(x_k, y_k), k = 1, \dots, n$ . Sucht man die Koeffizienten einer ausgleichenden Parabel

$$y = a + bx + cx^2 \quad (1)$$

derart, dass die Fehlerquadratsumme

$$S(a, b, c) = \sum_{k=1}^n (a + bx_k + cx_k^2 - y_k)^2 \quad (2)$$

minimal wird, so ist dies die klassische Methode die der kleinsten Quadrate, die leicht auf höhergradige Polynome verallgemeinert werden kann. Eine numerisch stabile Lösungsmethode – im Prinzip implizite Diagonalisierung der Matrix der Normalgleichungen – liegt vor, z.B. ist sie in [2] samt FORTRAN-Subroutinen beschrieben.

Angeregt durch einen Hinweis in [1, S. 659] wollen wir bei einem modifizierten Modell 1 von (1), nämlich mit einer nichtlinearen Nebenbedingung

$$c = ab, \quad (3)$$

und bei einem Modell 2, nämlich

$$y = (a + bx)(c + dx) \quad (4)$$

vorschlagen, wie die Fehlerquadratsummenminimierung numerisch gelöst werden kann.

## 2 Modell 1

Natürlich könnte man die LAGRANGE-Funktion für die Minimierung von (2) unter der Nebenbedingung (3) aufstellen und dann die notwendigen Bedingungen für ein Minimum aufschreiben. Direkter ist es aber, (3) in (2) einzusetzen und also

$$S(a, b) = \sum_{k=1}^n (a + bx_k + abx_k^2 - y_k)^2 \quad (5)$$

versuchen zu minimieren. Die notwendigen Bedingungen für ein Minimum (und auch ein Maximum!) sind

$$\frac{\partial S}{\partial a} = \frac{\partial S}{\partial b} = 0, \quad (6)$$

was auf

$$\sum_{k=1}^n (1 + bx_k^2)(a + bx_k + abx_k^2 - y_k) = 0, \quad (7)$$

$$\sum_{k=1}^n (x_k + ax_k^2)(a + bx_k + abx_k^2 - y_k) = 0 \quad (8)$$

hinausläuft. Dies ist offenbar ein nichtlineares Gleichungssystem für die beiden unbekannten Parameter  $a$  und  $b$ . Es kann (und wird empirisch) mehrere Lösungen geben, von denen, wenn man sie alle findet, durch Einsetzen in (5) entschieden werden kann, welche die mit dem global kleinsten Wert für  $S(a, b)$  ist. Um numerisch Lösungen zu bestimmen, kann man ausnutzen dass (7) in der Form

$$a = f(b) = \frac{\sum_{k=1}^n (1 + bx_k^2)(y_k - bx_k)}{\sum_{k=1}^n (1 + bx_k^2)^2} \quad (9)$$

und (8) als

$$b = g(a) = \frac{\sum_{k=1}^n (x_k + ax_k^2)(y_k - a_k)}{\sum_{k=1}^n (x_k + ax_k^2)^2} \quad (10)$$

geschrieben werden kann. Nahe liegt dann folgendes Iterationsverfahren:

### Algorithmus A

1.  $i = 0$ , gebe  $b^{(0)}$  vor, z.B.  $b^{(0)} = 0$  was  $a^{(1)} = \bar{y}$  bedeutet oder eben der Reihe nach zahlreiche Werte von  $b^{(0)}$ .
2.  $a^{(i+1)} = f(b^{(i)})$ .
3.  $b^{(i+1)} = g(a^{(i+1)}) = g(f(b^{(i)}))$ .
4. Bei Konvergenz breche man ab, andernfalls setze man  $i = i + 1$  und gehe nach 2., falls  $i$  eine vorzugebende Grenze nicht überschreitet.

Wir betrachten als Beispiel 1 mit  $n = 12$  die gegebenen Daten

|       |    |    |    |    |    |    |    |   |    |   |   |   |
|-------|----|----|----|----|----|----|----|---|----|---|---|---|
| $x_k$ | -6 | -5 | -4 | -3 | -2 | -1 | 0  | 1 | 2  | 3 | 4 | 5 |
| $y_k$ | 8  | 4  | 4  | 1  | 0  | -1 | -1 | 0 | -1 | 0 | 2 | 3 |

Als Startwerte  $b^{(0)}$  werden der Reihe nach  $0.1 \cdot j$  mit  $j = -5(1)5$  benutzt. Dabei ergaben sich zwei Nullstellen, die mit dem kleineren Zielfunktionswert  $S(a, b) = 4.20103$  entspricht

$$a = -1.064295, \quad b = -.194788, \quad c = .207311$$

und wurde für  $j = -5(1) - 1$  erreicht, für  $j = 0(1)5$  wurde allerdings eine Nullstelle mit dem größten Zielfunktionswert  $S(a, b) = 43.30402$  berechnet. For. 1 zeigt die gegebenen Daten und die sich ergebende Ausgleichsparabel für obige Werte von  $a$  und  $b$ . Bei anderen Beispielen wurden maximal drei Nullstellen gefunden.

### 3. Modell 2

Hier ist

$$S(a, b, c, d) = \sum_{k=1}^n ((a + bx_k)(c + dx_k) - y_k)^2 \quad (11)$$

zu minimieren. Die notwendigen Bedingungen für ein Extremum sind

$$\frac{\partial S}{\partial a} = \frac{\partial S}{\partial b} = \frac{\partial S}{\partial c} = \frac{\partial S}{\partial d} = 0. \quad (12)$$

Dies ergibt der Reihe nach

$$\sum_{k=1}^n (c + dx_k)^2 (a + bx_k) = \sum_{k=1}^n y_k (c + dx_k), \quad (13)$$

$$\sum_{k=1}^n x_k (c + dx_k)^2 (a + bx_k) = \sum_{k=1}^n x_k y_k (c + dx_k), \quad (14)$$

$$\sum_{k=1}^n (a + bx_k)^2 (c + dx_k) = \sum_{k=1}^n y_k (a + bx_k), \quad (15)$$

$$\sum_{k=1}^n x_k (a + bx_k)^2 (c + dx_k) = \sum_{k=1}^n x_k y_k (a + bx_k). \quad (16)$$

Man sieht, dass (13) und (14) linear in  $a$  und  $b$  und (15) und (16) linear in  $c$  und  $d$  sind. Damit liegt folgendes Iterationsverfahren nahe:

#### Algorithmus B

1.  $i = 0$ , gebe Startwerte  $c^{(0)}$  und  $d^{(0)}$  vor.
2. Löse das lineare Gleichungssystem (13), (14) mit  $c = c^{(i)}$ ,  $d = d^{(i)}$  nach  $a^{(i)} = a$ ,  $b^{(i)} = b$  auf.
3. Setze  $a = a^{(i)}$ ,  $b = b^{(i)}$  in (15) und (16) ein und löse nach  $c^{(i+1)} = c$ ,  $d^{(i+1)} = d$  auf.
4. Wie bei Algorithmus A.

Wir betrachten als Beispiel 2 wieder mit  $n = 12$  die gegebenen Daten

|       |     |    |    |    |    |    |    |    |    |    |     |     |
|-------|-----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|-----|-----|
| $x_k$ | -10 | -9 | -8 | -7 | -5 | -4 | -3 | -1 | 1  | 3  | 4   | 5   |
| $y_k$ | -10 | -8 | -3 | -1 | 0  | 2  | 1  | 1  | -2 | -6 | -11 | -13 |

Numerische Experimente zeigen, dass für verschiedene Startwerte sehr unterschiedliche Endergebnisse für  $a$ ,  $b$ ,  $c$  und  $d$  herauskommen, die aber den gleichen Zielfunktionswert produzieren. Dies liegt daran, dass für  $\alpha \neq 0$

$$(a + bx)(c + dx) = (\alpha a + \alpha bx) \left( \frac{c}{\alpha} + \frac{d}{\alpha} x \right) \quad (17)$$

gilt. Somit sind  $a$ ,  $b$ ,  $c$ ,  $d$  und  $\alpha a$ ,  $\alpha b$ ,  $\frac{c}{\alpha}$ ,  $\frac{d}{\alpha}$  gleichberechtigte Lösungen: es gibt unendlich viele Minima, was unbefriedigend ist. Daher ist es sinnvoll, z.B.  $a$  oder  $c$  auf Eins zu setzen, sofern nicht beide gleich Null sind. Setzen wir  $c = 1$  (auch in (11)), so bleiben die Bedingungen (13) und (14) erhalten, wenn darin ebenfalls  $c = 1$  gesetzt wird. Aus der Forderung  $\frac{\partial S}{\partial d} = 0$  ergibt sich

$$d = h(a, b) = \frac{\sum_{k=1}^n x_k y_k (a + bx_k) - \sum_{k=1}^n x_k (a + bx_k)^2}{\sum_{k=1}^n x_k^2 (a + bx_k)^2}. \quad (18)$$

Dann liegt nahe der

#### Algorithmus C

1.  $i = 0$ , gebe Startwert  $d^{(0)}$  vor.
2. Setze in (13), (14)  $c = 1$  und  $d = d^{(i)}$  und löse nach  $a = a^{(i)}$  und  $b = b^{(i)}$  auf.
3. Setze  $a^{(i)}$  und  $b^{(i)}$  in (18), was  $d^{(i+1)} = d$  ergibt.
4. Wie früher.

Betrachten wir obiges Beispiel 2 mit den Startwerten  $d^{(0)} = 0.1$ ,  $j = -2(1)4$ , also mit sieben verschiedenen Startwerten, so erhalten wir drei verschiedene Endresultate. Der kleinste auftretende Wert von  $S(a, b, d)$  ist 7.51361 und die zugehörige Lösung ist

$$a = -.338744, \quad b = -1.372373, \quad d = .174071$$

Fig. 2 enthält die Daten aus Beispiel 2 und die der obigen Lösung entsprechende Ausgleichsparabel.

#### Literatur

- [1] SEBER, G. A. F., WILD, C. J.: Nonlinear Regression, John Wiley & Sons 1989
- [2] SPÄTH, H.: Numerik – Eine Einführung für Mathematiker und Informatiker, Vieweg 1994

Anschrift des Verfassers:

Prof. Dr. HELMUTH SPÄTH,  
Fakultät V, Institut für Mathematik,  
Carl von Ossietzky Universität Oldenburg,  
Postfach 25 03, D-26111 Oldenburg,  
Germany,  
e-mail: spaeth@mathematik.uni-oldenburg.de

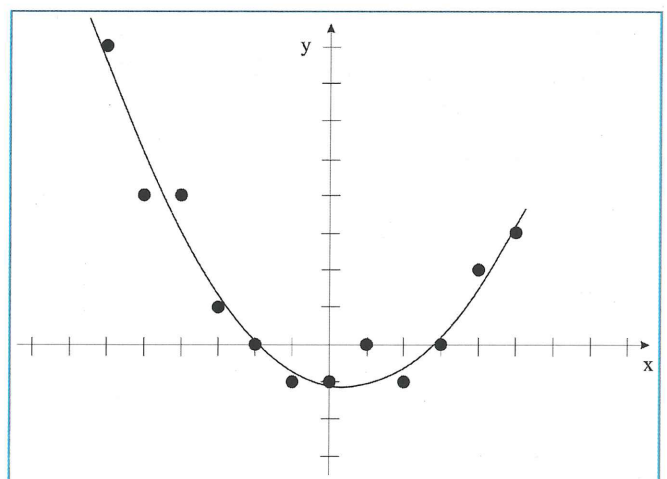


Fig. 1

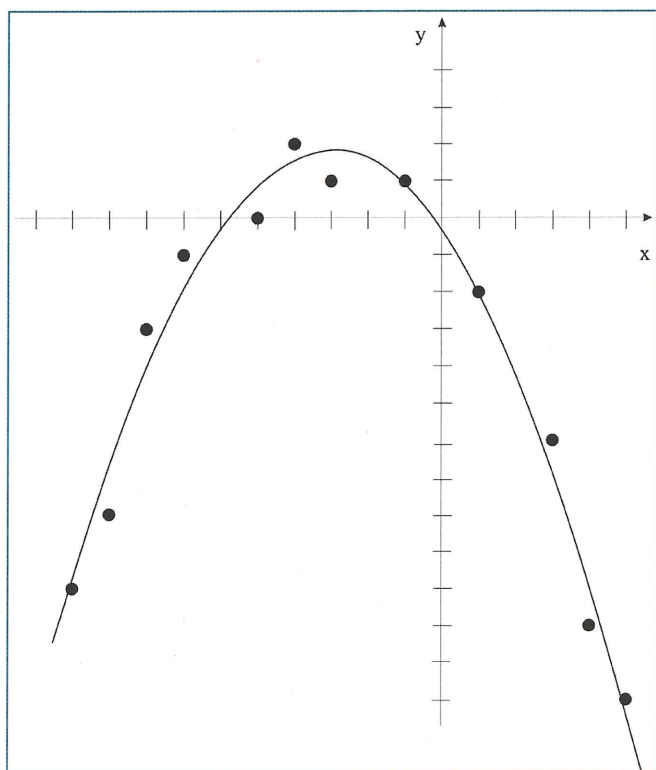


Fig. 2

### Zusammenfassung

Die Problemstellung aus dem Titel dürfte bisher kaum untersucht sein. Ein Problem mit einer Parabel wird in [1] erwähnt. Wir entwickeln numerische Verfahren hierfür und für einen zweiten Absatz. Das Vorgehen kann für höhergradige Polynome erweitert werden.

### Summary

Fitting polynomials with nonlinear constraints for their coefficients may be rarely considered so far. Some problem with a certain parabola is mentioned in [1]. We derive numerical methods for that case and for a second one. For higher degree polynomials this could be generalized.

## Ordnung in Ihrem Regal - AVN-Einbanddecke 2005

### Schon bestellt ?!

Die neue Einbanddecke für den Jahrgang 2005 der Zeitschrift AVN Allgemeine Vermessungs-Nachrichten ist ab Ende Januar 2006 lieferbar.

Nutzen Sie die Möglichkeit, Ihre gesammelten Zeitschriften in einem Band zusammenzufassen. Kein Heft kann mehr verloren gehen.

Alle Beiträge sind stets leicht zu finden und stehen griffbereit in Ihrem Regal zur Verfügung. Durch die klare Rückengestaltung finden Sie jeden Jahrgang der AVN auf den ersten Blick.

Mehr Informationen unter  
**[www.huethig.de](http://www.huethig.de)**

### BESTELLCOUPON Fax 06221 489 623

☐ Expl. AVN-Einbanddecke 2005  
€ 19,50 zzgl. Versandkosten  
ISBN 3-87907-434-8

☐ Expl. AVN-Einbanddecke 2004  
€ 19,50 zzgl. Versandkosten  
ISBN 3-87907-424-0

☐ Expl. AVN-Einbanddecke 2003  
€ 19,50 zzgl. Versandkosten  
ISBN 3-87907-410-0

\_\_\_\_\_  
Name, Vorname

\_\_\_\_\_  
Straße, -Nr.

\_\_\_\_\_  
Firma

\_\_\_\_\_  
PLZ/Ort

\_\_\_\_\_  
Datum/Unterschrift

Herbert Wichmann Verlag  
Hüthig GmbH & Co. KG · Im Weiher 10 · 69121 Heidelberg  
Tel.: 06221 489-0 · [wichmann@huethig.de](mailto:wichmann@huethig.de)

Ja, ich habe das Recht, diese Bestellung innerhalb von 14 Tagen nach Lieferung ohne Angaben von Gründen zu widerrufen. Der Widerruf erfolgt schriftlich oder durch fristgerechte Rücksendung der Ware an die Auslieferung (Hüthig Fachverlage, Im Weiher 10, 69121 Heidelberg). Zur Fristwahrung genügt die rechtzeitige Absendung des Widerrufs oder der Ware (Datum des Poststempels). Bei einem Warenwert unter 40 Euro liegen die Kosten der Rücksendung beim Rücksender. Ihre freiwilligen Angaben werden zusammen mit den für die Vertragsabwicklung erforderlichen Bestellangaben von uns und den Unternehmen der Süddeutschen Verlag Mediengruppe, unseren Dienstleistern sowie anderen ausgewählten Unternehmen verarbeitet und genutzt, um Sie über Produkte und Dienstleistungen zu informieren. Alle Preise inkl. MwSt. zzgl. Versandkosten. Alle Preisangaben vorbehalten. Für Druckfehler übernehmen wir keine Haftung.



**Wichmann**