

# Ausgleichsrechnung: Methode der kleinsten Quadrate

Repetition

Lineare Algebra

Ausgleichsrechnung:  
Methode der  
kleinsten Quadrate

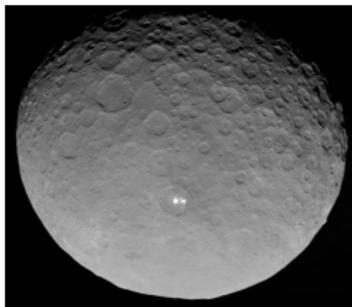
QR-Zerlegung

Regression

## Historische Bemerkung

In der Neujahrsnacht 1801 entdeckte **Giuseppe Piazzi** den Zwergplaneten **Ceres** in der Lücke zwischen Mars und Jupiter. Allerdings verlor man Ceres danach wieder aus den Augen. **Carl Friedrich Gauß** errechnete mit seiner **Methode der kleinsten Quadrate** aufgrund der wenigen vorliegenden Bahndaten die Position von Ceres, der an der vorhergesagten Stelle am 7. Dezember 1801 durch **Franz Xaver von Zach** wiedergefunden wurde.

Ceres



Piazzi



Gauß



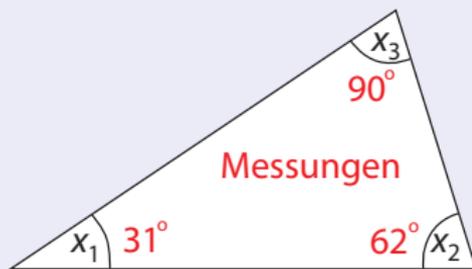
von Zach



## Beispiel

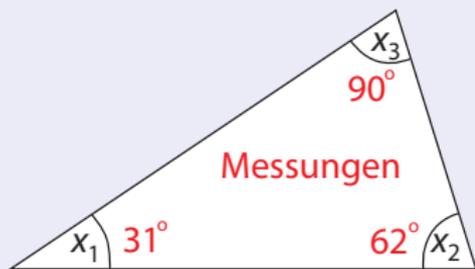
Man bestimme die Winkel  $x_1$  und  $x_2$  durch (fehlerbehaftete) Messungen von  $x_1, x_2$  und  $x_3$  möglichst genau. Wir beschränken uns dabei auf *eine* Messreihe:

$$\left. \begin{array}{l} x_1 = 31 \\ x_2 = 62 \\ x_1 + x_2 = 180 - 90 \end{array} \right\}$$



## Beispiel

Man bestimme die Winkel  $x_1$  und  $x_2$  durch (fehlerbehaftete) Messungen von  $x_1, x_2$  und  $x_3$  möglichst genau. Wir beschränken uns dabei auf *eine* Messreihe:



$$\left. \begin{array}{l} x_1 = 31 \\ x_2 = 62 \\ x_1 + x_2 = 180 - 90 \end{array} \right\} \begin{array}{l} 3 \text{ Gleichungen für 2 Unbekannte:} \\ \text{überbestimmtes LGS, keine Lösung} \end{array}$$

## Idee

Betrachte

$$\left. \begin{aligned} x_1 & - 31 = r_1 \\ & x_2 - 62 = r_2 \\ x_1 + x_2 - 90 = r_3 \end{aligned} \right\} (*)$$

und finde  $\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$  so, dass der **Residuenvektor**  $r = \begin{pmatrix} r_1 \\ r_2 \\ r_3 \end{pmatrix}$   
minimale Norm  $\|r\|_2$  hat.

Die Gleichungen (\*) heissen **Fehlergleichungen**, und man interpretiert die  $r_i$  als **Messfehler**.

## Idee

Betrachte

$$\left. \begin{aligned} x_1 & - 31 = r_1 \\ & x_2 - 62 = r_2 \\ x_1 + x_2 - 90 = r_3 \end{aligned} \right\} (*)$$

und finde  $\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$  so, dass der **Residuenvektor**  $r = \begin{pmatrix} r_1 \\ r_2 \\ r_3 \end{pmatrix}$

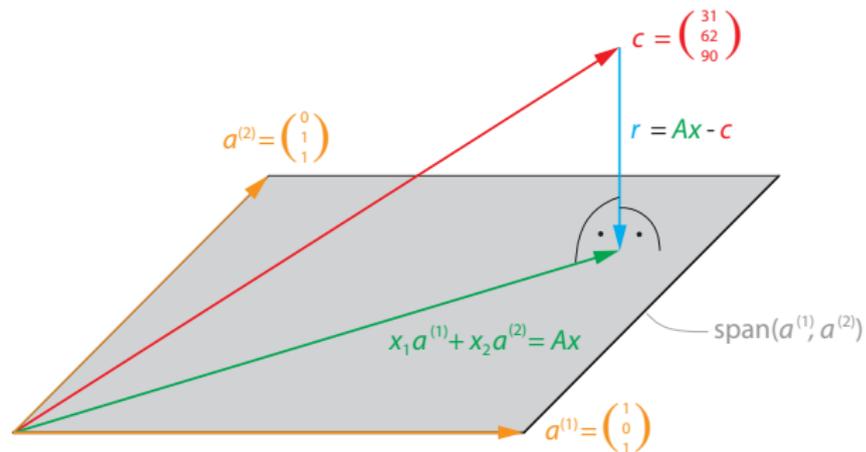
minimale Norm  $\|r\|_2$  hat.

Die Gleichungen (\*) heissen **Fehlergleichungen**, und man interpretiert die  $r_i$  als **Messfehler**.

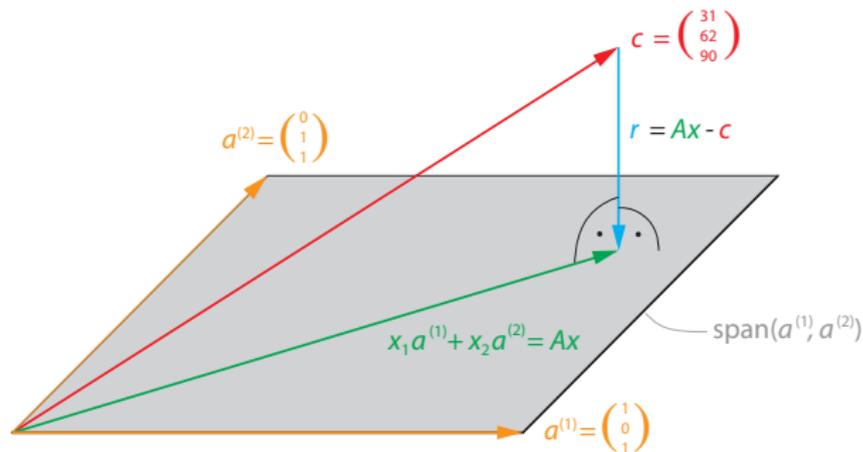
## Methode der kleinsten Quadrate

Löse  $Ax - c = r$ ,  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ,  $c, r \in \mathbb{R}^m$  möglichst gut, d.h. finde  $x \in \mathbb{R}^n$  so, dass  $\|r\|_2 = \|Ax - c\|_2$  minimal wird, d.h.  $r_1^2 + \dots + r_m^2$  soll minimal sein.

**Geometrisch:**  $\|r\|_2$  minimal  $\iff r \perp \text{span}(a^{(1)}, \dots, a^{(n)})$ :



**Geometrisch:**  $\|r\|_2$  minimal  $\iff r \perp \text{span}(a^{(1)}, \dots, a^{(n)})$ :

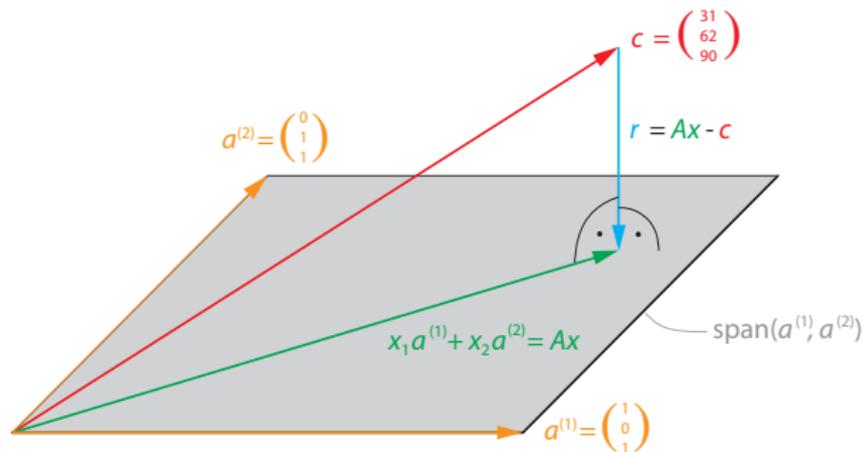


## Satz

- Sei  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ,  $c \in \mathbb{R}^m$ . Die Lösungen des Minimierungsproblems  $\|Ax - c\| \stackrel{!}{=} \min$  stimmen überein mit den Lösungen der **Normalgleichungen**

$$A^T Ax = A^T c$$

**Geometrisch:**  $\|r\|_2$  minimal  $\iff r \perp \text{span}(a^{(1)}, \dots, a^{(n)})$ :



## Satz

- Sei  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ,  $c \in \mathbb{R}^m$ . Die Lösungen des Minimierungsproblems  $\|Ax - c\| \stackrel{!}{=} \min$  stimmen überein mit den Lösungen der **Normalgleichungen**

$$A^T Ax = A^T c$$

- $\text{Rang}(A) = n \iff$  die Lösung ist eindeutig.

## Beispiel (Fortsetzung vom Anfang)

Für  $A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$ ,  $c = \begin{pmatrix} 31 \\ 62 \\ 90 \end{pmatrix}$  erhält man

$$A^T A = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}, \quad A^T c = \begin{pmatrix} 121 \\ 152 \end{pmatrix}$$

## Beispiel (Fortsetzung vom Anfang)

Für  $A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$ ,  $c = \begin{pmatrix} 31 \\ 62 \\ 90 \end{pmatrix}$  erhält man

$$A^T A = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}, \quad A^T c = \begin{pmatrix} 121 \\ 152 \end{pmatrix}$$

Die Lösung der Normalgleichungen

$$\begin{aligned} 2x_1 + x_2 &= 121 \\ x_1 + 2x_2 &= 152 \end{aligned}$$

lautet  $x_1 = 30$ ,  $x_2 = 61$ . Diese Zahlen lösen also das ursprüngliche überbestimmte LGS am besten (im Sinne der kleinsten Quadrate).

# QR-Zerlegung

**Beobachtung:** Die Normalgleichungen sind schlecht konditioniert und führen zu numerisch ungenauen Lösungen. Daher formen wir die Fehlergleichungen  $Ax - c = r$  zunächst mit Hilfe des folgenden Satzes um:

# QR-Zerlegung

**Beobachtung:** Die Normalgleichungen sind schlecht konditioniert und führen zu numerisch ungenauen Lösungen. Daher formen wir die Fehlergleichungen  $Ax - c = r$  zunächst mit Hilfe des folgenden Satzes um:

## Satz: QR-Zerlegung

- ▶ Sei  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ,  $m \geq n$ , dann existiert  $Q \in \mathbb{R}^{m \times m}$  orthogonal so, dass  $A = QR$  mit  $R = \begin{pmatrix} R_0 \\ 0 \end{pmatrix}$ , wobei  $R_0 \in \mathbb{R}^{n \times n}$  eine obere Dreiecksmatrix ist.
- ▶  $\text{Rang}(A) = n \iff R_0$  regulär.

# Anwendung der QR-Zerlegung

**Lösung des Minimierungsproblems. Herleitung:**

Repetition

Lineare Algebra

Ausgleichsrechnung:  
Methode der  
kleinsten Quadrate

QR-Zerlegung

Regression

# Anwendung der QR-Zerlegung

**Lösung des Minimierungsproblems.** Herleitung:

1. Fehlergleichungen:  $Ax - c = r$

# Anwendung der QR-Zerlegung

**Lösung des Minimierungsproblems.** Herleitung:

1. Fehlergleichungen:  $Ax - c = r$
2. Minimierungsproblem  $\|r\|_2 = \|Ax - c\| \stackrel{!}{=} \min.$

# Anwendung der QR-Zerlegung

**Lösung des Minimierungsproblems.** Herleitung:

1. Fehlergleichungen:  $Ax - c = r$
2. Minimierungsproblem  $\|r\|_2 = \|Ax - c\| \stackrel{!}{=} \min.$
3. Sei  $A = QR$  die QR-Zerlegung von  $A$  und  $Q^T c =: d.$

# Anwendung der QR-Zerlegung

**Lösung des Minimierungsproblems.** Herleitung:

1. Fehlergleichungen:  $Ax - c = r$
2. Minimierungsproblem  $\|r\|_2 = \|Ax - c\| \stackrel{!}{=} \min.$
3. Sei  $A = QR$  die QR-Zerlegung von  $A$  und  $Q^T c =: d.$

4. Dann gilt  $\|r\|_2 = \|Q^T r\|_2 = \underbrace{\| \overbrace{Q^T A}^{=R} x - \overbrace{Q^T c}^{=d} \|_2}_{=:s}.$

# Anwendung der QR-Zerlegung

**Lösung des Minimierungsproblems.** Herleitung:

1. Fehlergleichungen:  $Ax - c = r$

2. Minimierungsproblem  $\|r\|_2 = \|Ax - c\| \stackrel{!}{=} \min.$

3. Sei  $A = QR$  die QR-Zerlegung von  $A$  und  $Q^T c =: d.$

4. Dann gilt  $\|r\|_2 = \|Q^T r\|_2 = \underbrace{\| \overbrace{Q^T A}^{=R} x - \overbrace{Q^T c}^{=d} \|_2}_{=:s}.$

5. Somit  $\|r\|_2 \text{ minimal} \iff \|s\|_2 \text{ minimal}.$

# Anwendung der QR-Zerlegung

**Lösung des Minimierungsproblems.** Herleitung:

1. Fehlergleichungen:  $Ax - c = r$
2. Minimierungsproblem  $\|r\|_2 = \|Ax - c\| \stackrel{!}{=} \min.$
3. Sei  $A = QR$  die QR-Zerlegung von  $A$  und  $Q^T c =: d.$
4. Dann gilt  $\|r\|_2 = \|Q^T r\|_2 = \underbrace{\| \overbrace{Q^T A}^{=R} x - \overbrace{Q^T c}^{=d} \|_2}_{=:s}.$
5. Somit  $\|r\|_2 \text{ minimal} \iff \|s\|_2 \text{ minimal}.$
6.  $Rx - d = s$  lautet ausgeschrieben

# Anwendung der QR-Zerlegung

**Lösung des Minimierungsproblems.** Herleitung:

1. Fehlergleichungen:  $Ax - c = r$
2. Minimierungsproblem  $\|r\|_2 = \|Ax - c\| \stackrel{!}{=} \min.$
3. Sei  $A = QR$  die QR-Zerlegung von  $A$  und  $Q^T c =: d.$

4. Dann gilt  $\|r\|_2 = \|Q^T r\|_2 = \underbrace{\| \overbrace{Q^T A}^{=R} x - \overbrace{Q^T c}^{=d} \|_2}_{=:s}.$

5. Somit  $\|r\|_2$  minimal  $\iff \|s\|_2$  minimal.

6.  $Rx - d = s$  lautet ausgeschrieben

$$\begin{array}{|c|} \hline R_0 \\ \hline 0 \\ \hline \end{array} \begin{array}{|c|} \hline x \\ \hline \end{array} - \begin{array}{|c|} \hline d_0 \\ \hline d_1 \\ \hline \end{array} = \begin{array}{|c|} \hline s_0 \\ \hline s_1 \\ \hline \end{array}$$

Hier sind  $R_0$ ,  $d_0$ ,  $s_0$  die obersten  $n$  Zeilen von  $R$ ,  $d$ ,  $s$ , und  $d_1$ ,  $s_1$  die untersten  $m - n$  Zeilen von  $d$ ,  $s$ . Also

$$\begin{aligned} R_0 x - d_0 &= s_0 \\ -d_1 &= s_1 \end{aligned}$$

Hier sind  $R_0$ ,  $d_0$ ,  $s_0$  die obersten  $n$  Zeilen von  $R$ ,  $d$ ,  $s$ , und  $d_1$ ,  $s_1$  die untersten  $m - n$  Zeilen von  $d$ ,  $s$ . Also

$$\begin{aligned} R_0 x - d_0 &= s_0 \\ -d_1 &= s_1 \end{aligned}$$

Offenbar hängt  $s_1$  nicht von  $x$  ab, und somit folgt

$$\|s\|_2^2 = \|s_0\|_2^2 + \|s_1\|_2^2 = \|R_0 x - d_0\|_2^2 + \|d_1\|_2^2 \stackrel{!}{=} \min$$



$$R_0 x = d_0$$

Hier sind  $R_0$ ,  $d_0$ ,  $s_0$  die obersten  $n$  Zeilen von  $R$ ,  $d$ ,  $s$ , und  $d_1$ ,  $s_1$  die untersten  $m - n$  Zeilen von  $d$ ,  $s$ . Also

$$\begin{aligned} R_0 x - d_0 &= s_0 \\ -d_1 &= s_1 \end{aligned}$$

Offenbar hängt  $s_1$  nicht von  $x$  ab, und somit folgt

$$\|s\|_2^2 = \|s_0\|_2^2 + \|s_1\|_2^2 = \|R_0 x - d_0\|_2^2 + \|d_1\|_2^2 \stackrel{!}{=} \min$$



$$R_0 x = d_0$$

Und der Wert des Minimums ist  $\|r\|_2 = \|s\|_2 = \|d_1\|_2$ .

## Satz

Die Lösung  $x$  von  $\|Ax - c\|_2 = \|r\|_2 \stackrel{!}{=} \min$  kann wie folgt gefunden werden:

## Satz

Die Lösung  $x$  von  $\|Ax - c\|_2 = \|r\|_2 \stackrel{!}{=} \min$  kann wie folgt gefunden werden:

- ▶  $R = Q^T A$  (QR-Zerlegung von  $A$ )

## Satz

Die Lösung  $x$  von  $\|Ax - c\|_2 = \|r\|_2 \stackrel{!}{=} \min$  kann wie folgt gefunden werden:

- ▶  $R = Q^T A$  (QR-Zerlegung von  $A$ )
- ▶  $d := Q^T c$

## Satz

Die Lösung  $x$  von  $\|Ax - c\|_2 = \|r\|_2 \stackrel{!}{=} \min$  kann wie folgt gefunden werden:

- ▶  $R = Q^T A$  (QR-Zerlegung von  $A$ )
- ▶  $d := Q^T c$
- ▶ Seien  $R_0$  resp.  $d_0$  die oberen  $n$  Zeilen von  $R$  resp.  $d$ .

## Satz

Die Lösung  $x$  von  $\|Ax - c\|_2 = \|r\|_2 \stackrel{!}{=} \min$  kann wie folgt gefunden werden:

- ▶  $R = Q^T A$  (QR-Zerlegung von  $A$ )
- ▶  $d := Q^T c$
- ▶ Seien  $R_0$  resp.  $d_0$  die oberen  $n$  Zeilen von  $R$  resp.  $d$ .
- ▶  $R_0 x = d_0$  (Lösung durch Rückwärtseinsetzen)

## Satz

Die Lösung  $x$  von  $\|Ax - c\|_2 = \|r\|_2 \stackrel{!}{=} \min$  kann wie folgt gefunden werden:

- ▶  $R = Q^T A$  (QR-Zerlegung von  $A$ )
- ▶  $d := Q^T c$
- ▶ Seien  $R_0$  resp.  $d_0$  die oberen  $n$  Zeilen von  $R$  resp.  $d$ .
- ▶  $R_0 x = d_0$  (Lösung durch Rückwärtseinsetzen)
- ▶ Wert des Minimums  $\|r\|_2 = \|d_1\|_2$ , wobei  $d_1$  die unteren  $m - n$  Zeilen von  $d$  sind.

## Satz

Die Lösung  $x$  von  $\|Ax - c\|_2 = \|r\|_2 \stackrel{!}{=} \min$  kann wie folgt gefunden werden:

- ▶  $R = Q^T A$  (QR-Zerlegung von  $A$ )
- ▶  $d := Q^T c$
- ▶ Seien  $R_0$  resp.  $d_0$  die oberen  $n$  Zeilen von  $R$  resp.  $d$ .
- ▶  $R_0 x = d_0$  (Lösung durch Rückwärtseinsetzen)
- ▶ Wert des Minimums  $\|r\|_2 = \|d_1\|_2$ , wobei  $d_1$  die unteren  $m - n$  Zeilen von  $d$  sind.

Eine numerisch stabile Methode zur Bestimmung der QR-Zerlegung verwendet die Givens-Rotationen.

## Beispiel (nochmals das vom Anfang)

- **1. Schritt.** Bestimme  $\phi$  so, dass der Eintrag  $a_{31}$  von  $A$  verschwindet:

$$\begin{array}{l}
 \text{Spalte 1} \quad \quad \quad \text{Spalte 3} \\
 \downarrow \quad \quad \quad \downarrow \\
 \text{Zeile 1} \rightarrow \left( \begin{array}{ccc} \cos \phi & 0 & \sin \phi \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \phi & 0 & \cos \phi \end{array} \right) \left( \begin{array}{cc} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{array} \right) = \left( \begin{array}{ccc} * & & * \\ 0 & & * \\ -\sin \phi + \cos \phi & & * \end{array} \right) \\
 \text{Zeile 3} \rightarrow \underbrace{\left( \begin{array}{ccc} \cos \phi & 0 & \sin \phi \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \phi & 0 & \cos \phi \end{array} \right)}_{=: U_{31}^T} \underbrace{\left( \begin{array}{cc} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{array} \right)}_{=A}
 \end{array}$$

## Beispiel (nochmals das vom Anfang)

- **1. Schritt.** Bestimme  $\phi$  so, dass der Eintrag  $a_{31}$  von  $A$  verschwindet:

$$\begin{array}{l}
 \text{Spalte 1} \quad \quad \quad \text{Spalte 3} \\
 \downarrow \quad \quad \quad \downarrow \\
 \text{Zeile 1} \rightarrow \left( \begin{array}{ccc} \cos \phi & 0 & \sin \phi \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \phi & 0 & \cos \phi \end{array} \right) \left( \begin{array}{cc} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{array} \right) = \left( \begin{array}{cc} * & * \\ 0 & * \\ -\sin \phi + \cos \phi & * \end{array} \right) \\
 \text{Zeile 3} \rightarrow \underbrace{\left( \begin{array}{ccc} \cos \phi & 0 & \sin \phi \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \phi & 0 & \cos \phi \end{array} \right)}_{=: U_{31}^T} \underbrace{\left( \begin{array}{cc} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{array} \right)}_{=A}
 \end{array}$$

Offenbar wird  $-\sin \phi + \cos \phi = 0$  für  $\sin \phi = \cos \phi = \frac{1}{\sqrt{2}}$  und man erhält

$$U_{31}^T A = \begin{pmatrix} \sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ 0 & 1 \\ 0 & 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} =: A_1$$

## Beispiel (Fortsetzung)

- **2. Schritt.** Bestimme  $\psi$  so, dass der Eintrag  $a_{32}$  von  $A_1$  verschwindet:

$$\begin{array}{l}
 \text{Spalte 2} \quad \downarrow \quad \text{Spalte 3} \\
 \text{Zeile 2} \rightarrow \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \psi & \sin \psi \\ 0 & -\sin \psi & \cos \psi \end{pmatrix}}_{=: U_{32}^T} \underbrace{\begin{pmatrix} \sqrt{2} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & 1 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}}_{A_1} = \begin{pmatrix} * & * \\ 0 & * \\ 0 & -\sin \psi + \frac{\cos \psi}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}
 \end{array}$$

## Beispiel (Fortsetzung)

- **2. Schritt.** Bestimme  $\psi$  so, dass der Eintrag  $a_{32}$  von  $A_1$  verschwindet:

$$\begin{array}{l}
 \text{Spalte 2} \quad \downarrow \quad \text{Spalte 3} \\
 \text{Zeile 2} \rightarrow \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \psi & \sin \psi \\ 0 & -\sin \psi & \cos \psi \end{pmatrix}}_{=: U_{32}^T} \underbrace{\begin{pmatrix} \sqrt{2} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & 1 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}}_{A_1} = \begin{pmatrix} * & * \\ 0 & * \\ 0 & -\sin \psi + \frac{\cos \psi}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}
 \end{array}$$

Offenbar wird  $-\sin \psi + \frac{\cos \psi}{\sqrt{2}} = 0$  für

$$\sin^2 \psi = \frac{\cos^2 \psi}{2} = \frac{1 - \sin^2 \psi}{2}$$

also  $\sin^2 \psi = \frac{1}{3}$ ,  $\cos^2 \psi = \frac{2}{3}$  resp.  $\sin \psi = \frac{1}{\sqrt{3}}$ ,

$$\cos \psi = \sqrt{\frac{2}{3}}.$$

## Beispiel (Fortsetzung)

Wir erhalten

$$U_{32}^T A_1 = \begin{pmatrix} \sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ 0 & \sqrt{\frac{3}{2}} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} =: R$$

Zusammen mit dem 1. Schritt haben wir erreicht, dass

$$\underbrace{U_{32}^T U_{31}^T}_{=: Q^T} A = R \text{ d.h. } A = QR$$

## Lineare Regression

Es liegen  $n$  Messungen  $(x_i, y_i)$  vor, z.B.  $x_i$  = Schuhgrösse einer Person  $i$ ,  $y_i$  = Körpergrösse der Person  $i$ . Man finde eine Gerade  $y = ax + b$ , welche die Daten möglichst gut beschreibt, d.h.

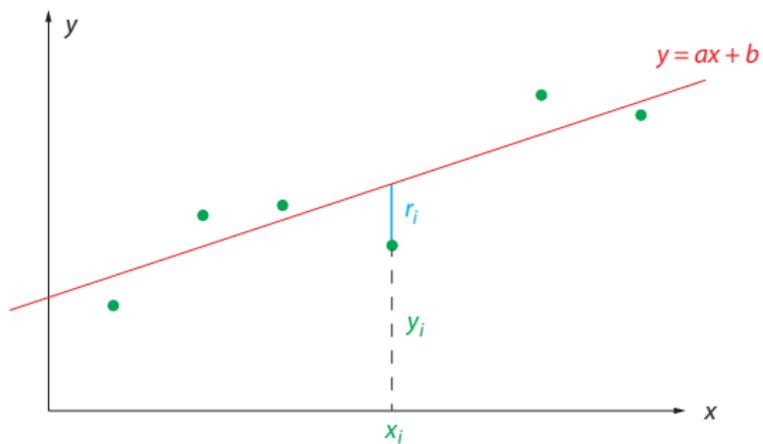
$$ax_i + b - y_i = r_i$$

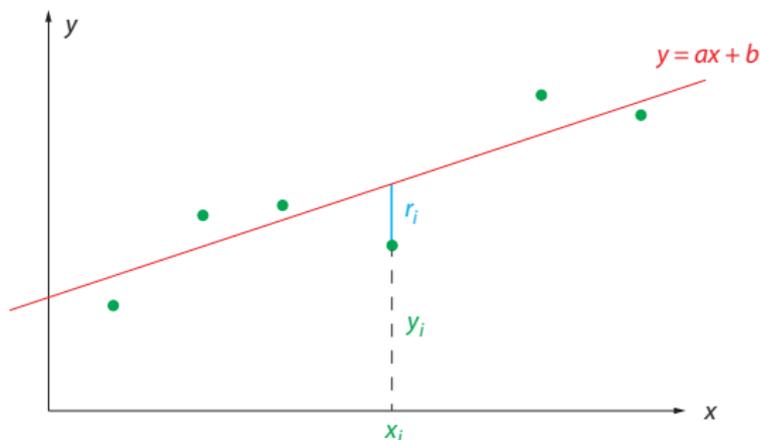
und  $\|r\|_2$  soll minimal werden. Dies ist ein überbestimmtes LGS für  $a$  und  $b$ . Die Lösung der Normalgleichungen liefert

$$a = \frac{\langle x - \bar{x}e, y - \bar{y}e \rangle}{\|x - \bar{x}e\|^2}, \quad b = \bar{y} - a\bar{x}$$

wobei  $e = (1, \dots, 1)^T \in \mathbb{R}^n$ , und  $\bar{x} = \frac{1}{n} \langle x, e \rangle$ ,  $\bar{y} = \frac{1}{n} \langle y, e \rangle$  sind die Mittelwerte der Daten  $x_i$  respektive  $y_i$ .

Die gefundene Gerade heisst **Regressionsgerade**.





**Bemerkung:** Je nach Situation wird statt einer Geraden eine geeignete andere Funktion gewählt, welche die Daten beschreiben soll, z.B. eine Parabel  $y = ax^2 + bx + c$  (quadratische Regression),  $y = a + b \arctan(x)$  etc.