# Lineare Ausgleichsrechnung

## 1. Ausgleichsgeraden

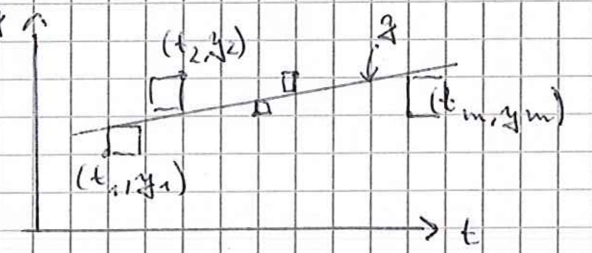
(1.1) Problemstellung

Finde zu gegebenen Daten $(t_j, y_j)$ $j = 1..m$ eine Gerade $g(t) = mt + c$ so, dass $g(t_j) \approx y_j$ $j = 1..m$

Genauer: Finde $m$ und $c$ so dass

$\| g(t) - Y \|_2^2$ minimal wird $\quad g(t) = \begin{bmatrix} g(t_1) \\ \vdots \\ g(t_m) \end{bmatrix} \quad Y = \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_m \end{bmatrix}$

(1.2) Geometrische Interpretation




Minimiere die Summe der Fehlerquadrate

"Methode der kleinsten Fehlerquadrate" (Gauß 1801)

(1.3) Matrix-Vektor formulierung

Finde einen Vektor $\begin{pmatrix} m \\ c \end{pmatrix}$ so, dass $\| A \begin{pmatrix} m \\ c \end{pmatrix} - Y \|_2^2$ minimal wird. Die Matrix $A$ ist durch

$A = \begin{bmatrix} t_1 & 1 \\ t_2 & 1 \\ t_m & 1 \end{bmatrix}$, der Vektor $Y = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_m \end{bmatrix}$ gegeben

## 2. Multiple Lineare Regression

(2.1) Problemstellung

Finde zu Daten $(X_{j1}, X_{j2}, \ , X_{jn}, Y_j)$ $j = 1..m$

$(m >> n)$ Parameter $p_1 .. p_m$ so dass

$Y_j \approx \sum_{i=1}^{n} p_i X_{ji}$ für alle $j = 1..m$

genauer $\quad \sum_{j=1}^{m} \left( Y_j - \sum_{i=1}^{n} p_i X_{ji} \right)^2$ minimal wird

(2.2) Matrix Vektor-Formulierung

Finde $\beta \in \mathbb{R}^n$ so, dass $\| X\beta - Y \|_2^2 = \min!$

für $X = (X_{ji})_{j=1\ i=1}^{m\ \ n} = \begin{bmatrix} X_{11} & X_{1n} \\ X_{m1} & X_{mn} \end{bmatrix}$ $\quad Y = \begin{bmatrix} Y_1 \\ \vdots \\ Y_m \end{bmatrix}$

## 3 Lösung des linearen Ausgleichsproblems

**Ziel** Suche $x \in \mathbb{R}^n$ so, dass für $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ $b \in \mathbb{R}^m$

$$\| Ax - b \|_2^2 = \min \left\{ \| Az - b \|_2^2 : z \in \mathbb{R}^n \right\} \quad (\#)$$

$m \gg n$ ~~sonst kann die ...~~

(3.1) **Satz**

Sei $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ $m \ll n$, $\operatorname{rang}(A) = m$. Die ist $x$ Lösung von (#) genau dann wenn

$$A^T A x = A^T b \qquad \text{"Gauß Normalengleichung"}$$

**Beweis** $A = (a_{ij})_{i=1\ j=1}^{m\ \ n}$ $\quad b = (b_i)_{i=1}^n$

$$\varphi(z) = \| Az - b \|_2^2 = \sum_{i=1}^n \left( \sum_{j=1}^m a_{ij} z_j - b_i \right)^2$$

$\varphi : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ $\quad \nabla\varphi(z) = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^n 2\left(\sum_{j=1}^m a_{ij} z_j - b_i\right) a_{i1} \\ \sum_{i=1}^m 2\left(\sum_{j=1}^m a_{ij} z_j - b_i\right) a_{im} \end{pmatrix}$

$x$ ist Minimum von $\varphi$ $\Leftrightarrow$ $\nabla\varphi(x) = 0$ und $H\varphi(x)$ positiv definit

$A = (a_{ij})_{i=1\ j=1}^{m\ \ n}$ $\quad b = (b_i)_{i=1}^m$ $\quad \varphi(z) : \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}$

$$\varphi(z) = \| Az - b \|_2^2 = \sum_{i=1}^n \left( \sum_{j=1}^m a_{ij} z_j - b_i \right)^2$$
$$= \sum_{i=1}^n \left( \sum_{j=1}^m a_{ij} z_j \right)^2 - \sum_{i=1}^n 2 b_i \sum_{j=1}^m a_{ij} z_j + \sum_{i=1}^n b_i^2$$

$\nabla\varphi(z) = 2A^TAz - 2A^Tb$ $\qquad H\varphi(x) = 2A^TA$

$\left( 2 \sum_{i=1}^n a_{ik} \sum_{j=1}^m a_{ij} z_j \right)_{k=1}^n$

$A$ hat vollen Rang $\Rightarrow$ $A^TA$ ist positiv definit

Ist zusätzlich $\nabla\varphi(x) = 0$ so ist $x$ Minimum $\quad$ [Ana II]

Ist umgekehrt $x$ Minimum

So gilt für $z = x + y$ $\quad y \in \mathbb{R}^n$ beliebig

$$\| Az - b \|_2^2 \geq \| Ax - b \|_2^2$$

$$\Leftrightarrow \quad \langle A(x+y) - b, A(x+y) - b \rangle \geq \langle Ax - b, Ax - b \rangle$$

$$\Leftrightarrow \quad \langle Ax - b, Ax - b \rangle + \langle Ay, Ax \rangle + \langle Ax, Ay \rangle - \langle Ay, b \rangle - \langle b, Ay \rangle \geq \langle Ax - b, Ax - b \rangle$$

$$\Leftrightarrow \quad 2 \langle y, A^T A x \rangle - 2 \langle y, A^T b \rangle \geq 0$$

Wählt man für $y$ jeden kanonische Basisvektor so folgt

$$A^T A x - A^T b = 0$$

## (3.2) Lösung mit QR-Zerlegung

Die Gaußnormalengleichungen zu lösen kann instabil sein.
Stabiler ist eine QR Zerlegung von $A$ zu berechnen

$$A = QR$$

Dann ist

$$\| Az - b \|_2^2 = \| QRz - b \|_2^2 = \| Q(Rz - Q^T b) \|_2^2$$

$$\underset{\uparrow}{=} \| Rz - Q^T b \|_2^2 = \left\| \begin{bmatrix} \tilde{R} \\ 0 \end{bmatrix} z - \begin{bmatrix} \tilde{b} \\ \tilde{c} \end{bmatrix} \right\|_2^2$$

$Q$ orthogonal

für $Q^T b = \begin{bmatrix} \tilde{b} \\ \tilde{c} \end{bmatrix}$ $\quad \tilde{b} \in \mathbb{R}^n$

$$= \| \tilde{R} z - \tilde{b} \|_2^2 + \| \tilde{c} \|_2^2$$

minimal, falls $\tilde{R} z = \tilde{b}$

$$\Rightarrow \quad x = \tilde{R}^{-1} \tilde{b}$$