

§72: METHODE DER KLEINSTEN QUADRATE

72.1 Problemstellung

In einem Experiment interessiert man sich für die Beziehung zwischen 2 Variablen x und y . Hierzu hat man viele Wertepaare $(x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$ gemessen. Die Messungen können Fehler in Form von statistischen Fluktuationen enthalten. Man möchte nun die Beziehung zwischen x und y durch ein einfaches Polynom

$$y = f(x) = \sum_{k=1}^m a_k x^k - 1$$

approximieren (z.B. $m = 2$: Gerade, $m = 3$: Parabel) und sucht die „optimalen“ Koeffizienten $a_1, \dots, a_m$.

72.2 Methode der kleinsten Quadrate

Jede der n Messungen (x_i, y_i) beschreibt eine Gleichung für die Unbekannten $a_1, \dots, a_m$:

$$\begin{aligned} a_1 + a_2 x_1 + \dots + a_m x_1^{m-1} &= y_1 \\ &\vdots \\ a_1 + a_2 x_n + \dots + a_m x_n^{m-1} &= y_n \end{aligned}$$

Im Allgemeinen hat man sehr viel mehr Gleichungen als Unbekannte ($n \gg m$), und das lineare Gleichungssystem

$$\underbrace{\begin{pmatrix} 1 & x_1 & \dots & x_1^{m-1} \\ \vdots & & & \vdots \\ 1 & x_n & \dots & x_n^{m-1} \end{pmatrix}}_{M \in \mathbb{R}^{n \times m}} \underbrace{\begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_m \end{pmatrix}}_{a \in \mathbb{R}^m} = \underbrace{\begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}}_{y \in \mathbb{R}^n}$$

ist inkonsistent, d.h. einzelne Gleichungen widersprechen sich.

Beispielsweise kann man nicht erwarten, dass 50 Messwerte exakt auf einer Geraden liegen ($n = 50, m = 2$).

Da $Ma = y$ nicht exakt lösbar ist, sucht man statt dessen eine „Lösung“ a^* , die den quadratischen Fehler

$$|Ma - y|^2 = \left(\sum_{k=1}^m a_k x_1^{k-1} - y_1 \right)^2 + \dots + \left(\sum_{k=1}^m a_k x_n^{k-1} - y_n \right)^2$$

minimiert.

Die Koeffizienten $a_1, \dots, a_m$ bestimmen dann die Ausgleichskurve (Regressionskurve)

$$y = \sum_{k=1}^m a_k x^{k-1}$$

72.3 Minimierung des quadratischen Fehlers

Wir suchen das Minimum der Funktion

$$\begin{aligned}
 f(a_1, \dots, a_m) &= |Ma - y|^2 \\
 &= (Ma - y)^T (Ma - y) \\
 &= (a^T M^T - y^T)(Ma - y) \\
 &= a^T M^T Ma - a^T M^T y - \underbrace{y^T Ma}_{a^T M^T y} + y^T y \\
 &= a^T M^T Ma - 2a^T M^T y + y^T y
 \end{aligned}$$

Notwendige Bedingung:

$$\begin{aligned}
 0 \stackrel{!}{=} \nabla_a f &:= \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial a_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial a_m} \end{pmatrix} = M^T Ma + \underbrace{a^T M^T M}_{M^T Ma \text{ da } M^T M \text{ symmetrisch}} - 2M^T y \\
 &= 2M^T Ma - 2M^T y
 \end{aligned}$$

Die Lösung a^* löst also die so genannte Normalengleichung

$$M^T Ma = M^T y$$

Dies ist ein System aus m Gleichungen mit m Unbekannten $a_1, \dots, a_m$. Ist $M^T M$ invertierbar, gilt:

$$a^* = (M^T M)^{-1} M^T y$$

Man nennt

$$M^+ := (M^T M)^{-1} M^T$$

die Pseudoinverse (Moore-Penrose-Inverse) der (nicht invertierbaren!) $n \times m$ -Matrix M .

72.4 Bemerkungen:

(a) a^* ist tatsächlich ein Minimum:

Die Hesse-Matrix $H_a f = 2M^T M$ ist positiv semidefinit:

$$x^T 2M^T M x = 2(Mx)^T Mx = 2|Mx|^2 \geq 0 \quad \forall x$$

Da $M^T M$ invertierbar sein soll, ist $H_a f$ sogar positiv definit. Nach 57.5 folgt also: a^* ist Minimum.

(b) Man kann zeigen, dass $M^T M$ invertierbar ist, falls $\text{rang}(M) = m$, d.h. es gibt m der n Gleichungen des Systems $Ma = b$, die linear unabhängig sind.

- (c) Wir haben Iso am Beispiel der Ausgleichsrechnung ein allgemeines Verfahren hergeleitet, um ein überbestimmtes (und i.A. inkonsistentes) Gleichungssystem zu „lösen“:

72.5 Satz: (Pseudolösung überbestimmter Gleichungssysteme)

Sei $n > m$, $A \in \mathbb{R}^{n \times m}$, $\text{rang}(A) = m$ und $b \in \mathbb{R}^n$. Falls das überbestimmte lineare Gleichungssystem

$$Ax = b$$

inkonsistent ist, ist es nicht exakt lösbar. Es gibt jedoch eine eindeutig bestimmte Pseudolösung x^* , die den quadratischen Fehler $|Ax - b|^2$ minimiert:

$$x^* = A^+ b$$

mit der Pseudoinversen $A^+ = (A^T A)^{-1} A^T$.

72.6 Bemerkung:

Pseudolösungen spielen auch in der Informatik eine große Rolle. Überbestimmte Gleichungssysteme treten z.B. bei der Suche in Internetdatenbanken auf (Prof. Weikum: Informationssysteme).

72.7 Beispiel:

Bestimme mit der Methode der kleinsten Quadrate die Regressionsgerade durch die 4 Punkte

$$(0, 1), (1, 3), (2, 4), (3, 4)$$

Lösung: Wir suchen die Koeffizienten a_1, a_2 der Geradengleichung

$$y = a_1 + a_2 x$$

Hierzu haben wir 4 Bestimmungsgleichungen

$$a_1 + 0 \cdot a_2 = 1$$

$$a_1 + 1 \cdot a_2 = 3$$

$$a_1 + 2 \cdot a_2 = 4$$

$$a_1 + 3 \cdot a_2 = 4$$

Das überbestimmte Gleichungssystem lautet:

$$Ma = y$$

mit

$$M = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 2 \\ 1 & 3 \end{pmatrix}, \quad a = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}, \quad y = \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \\ 4 \\ 4 \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned}\Rightarrow M^T M &= \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 2 & 3 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 2 \\ 1 & 3 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 4 & 6 \\ 6 & 14 \end{pmatrix}\end{aligned}$$

Nach kurzer Rechnung erhält man:

$$(M^T M)^{-1} = \frac{1}{10} \begin{pmatrix} 7 & -3 \\ -3 & 2 \end{pmatrix}$$

Damit lautet die Pseudolösung von $Ma = y$:

$$\begin{aligned}a^* = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} &= (M^T M)^{-1} M^T y \\ &= \frac{1}{10} \begin{pmatrix} 7 & -3 \\ -3 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 2 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \\ 4 \\ 4 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{10} \begin{pmatrix} 7 & -3 \\ -3 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 12 \\ 23 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{10} \begin{pmatrix} 15 \\ 20 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1.5 \\ 1 \end{pmatrix}\end{aligned}$$

Die Ausgleichsgerade ist somit

$$y = 1.5 + x$$

Bemerkung:

$M^T M = \begin{pmatrix} 4 & 6 \\ 6 & 14 \end{pmatrix}$ ist invertierbar, da

$$\begin{aligned}\det(M^T M) &= 4 \cdot 14 - 6 \cdot 6 \\ &= 56 - 36 = 20 \neq 0\end{aligned}$$