74 Methode der kleinsten Quadrate

74.1 Problemstellung

In einem Experiment interessiert man sich für die Beziehung zwischen zwei Variablen x und y. Hierzu hat man viele Wertepaare

$$(x_1, y_1), \ldots, (x_n, y_n)$$

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 $a_1, \ldots, a_m$.

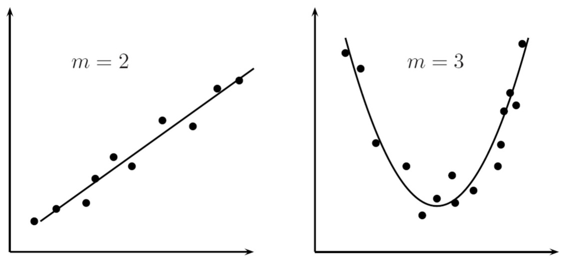

Abbildung 25:

74.2 Methode der kleinsten Quadrate

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

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

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

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

ist inkonsistent. 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

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

minimiert (Ausgleichskurve, Regressionskurve).

74.3 Minimierung des quadratischen Fehlers

Wir suchen das Minimum der Funktion

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

Notwendige Bedingung:

$$\begin{aligned} 0 \stackrel{!}{=} \nabla_a f := \begin{pmatrix} \dfrac{\partial f}{\partial a_1} \\ \vdots \\ \dfrac{\partial f}{\partial a_m} \end{pmatrix} &= M^\top Ma + \underbrace{a^\top M^\top M}_{\substack{(M^\top M)a, \\ \text{da } M^\top M \\ \text{symmetrisch}}} - 2M^\top y \\ &= 2M^\top Ma - 2M^\top y. \end{aligned}$$

Die Lösung a^* löst also die so genannte Normalengleichung

$$\boxed{M^\top Ma = M^\top y}$$

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

$$\boxed{a^* = (M^\top M)^{-1} M^\top y}$$

Man nennt

$$\boxed{M^+ := (M^\top M)^{-1} M^\top}$$

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

74.4 Bemerkungen

a) a^* ist tatsächlich ein Minimum:
Die Hesse-Matrix $H_a f = 2M^\top M$ ist positiv semidefinit:

$$x^\top \cdot 2M^\top Mx = 2(Mx)^\top Mx \geq 0 \qquad \forall x \in \mathbb{R}^n.$$

Da $M^\top M$ invertierbar sein soll, ist $H_a f$ sogar positiv definit. Nach 58.5 folgt also: a^* ist ein Minimum.

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

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

74.5 Satz: (Pseudolösung überbestimmter Gleichungssysteme)

Sei $n > m$, $A \in \mathbb{R}^{n\times m}$, 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 eindeutige Pseudolösung x^*, die den quadratischen Fehler $|Ax - b|^2$ minimiert: $x^* = A^+ b$ mit der Pseudoinversen $A^+ = (A^\top A)^{-1} A^\top$.

74.6 Bemerkung

Pseudolösungen spielen auch in der Informatik eine wichtige Rolle. Überbestimmte Gleichungssyteme treten z.B. bei der Suche in Internetdatenbaken auf ($\rightarrow$ Prof. Weikum, Informationssysteme)

74.7 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:

$$\begin{aligned} a_1 + 0 \cdot a_2 &= 1 \\ a_1 + 1 \cdot a_2 &= 3 \\ a_1 + 2 \cdot a_2 &= 4 \\ a_1 + 3 \cdot a_2 &= 4 \end{aligned}$$

Das überbestimmte Gleichungssystem lautet $Ma = y$ mit

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

$$\Rightarrow M^\top M = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 2 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 2 \\ 1 & 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 & 6 \\ 6 & 14 \end{pmatrix}.$$

$(M^\top M)^{-1}$ existiert, da $\det(M^\top M) = 4 \cdot 14 - 6 \cdot 6 = 20 \neq 0$.
Nach kurzer Rechnung erhält man:

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

Damit lautet die Pseudolösung von $Ma = y$:

$$\begin{aligned}
a^* = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} &= (M^\top M)^{-1} M^\top y \\
&= \frac{1}{10}\begin{pmatrix} 7 & -3 \\ -3 & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 3 \\ 4 \\ 4 \end{pmatrix} \\
&= \frac{1}{10}\begin{pmatrix} 7 & -3 \\ -3 & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 12 \\ 23 \end{pmatrix} = \frac{1}{10}\begin{pmatrix} 15 \\ 10 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1,5 \\ 1 \end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

Die Ausgleichgerade lautet somit $y = 1,5 + x$.