§ 72: METHODE DER KLEINSTEN QUADRATE

72.1. Problemstellung

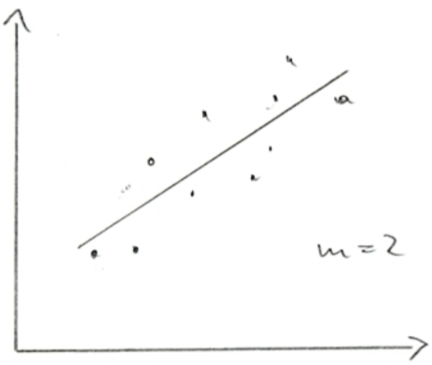
In einem Experiment interessiert man sich für die Beziehung zwischen zwei Variablen x und y.
Hierzu hat man viele Wertepaare

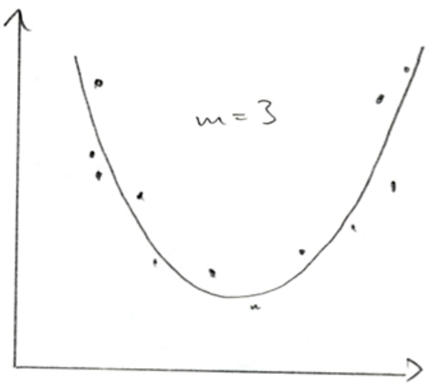
$$(x_1, y_1), \ldots, (x_n, y_n)$$

gemessen. Die Messungen können Fehler in Form von statistischen Fluktuationen enthalten.
Man möchte nun die Beziehung zwischen x und y durch ein einfaches Polynom

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

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





72.2. Methode der kleinsten Quadrate

Jede der n Messungen (x_i, y_i) beschreibt eine lineare 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 lin. Gleichungssystem

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

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 <u>quadratischen Fehler</u>

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

minimiert (<u>Ausgleichskurve</u>, <u>Regressionskurve</u>)

72.3. Minimierung des quadratischen Fehlers

Wir suchen das Minimum der Funktion

$$f(a_1, \dots, a_m) = (Ma-y)^T(Ma-y)$$

$$= a^T M^T Ma - a^T M^T y - \underbrace{y^T(Ma)}_{(a^T M^T) y} + y^T y$$

$$= a^T M^T M a - 2a^T M^T y + y^T y$$

Notwendige Bedingung:

$$0 = \nabla_a f := \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial a_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial a_m} \end{pmatrix} = M^T M a + \underbrace{a^T (M^T M)}_{(M^T M) a, \text{ da } M^T M \text{ symm.}} - 2 M^T y$$

$$= 2 M^T M a - 2 M^T y.$$

Die Lösung a^* löst also die so genannte <u>Normalengleichung</u>

$$\boxed{M^T M a = M^T y}$$

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

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

Man nennt

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

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

72.4. Bemerkungen

a) a^* ist tatsächlich ein Minimum:

Die Hesse-Matrix $H_a f = 2M^TM$ ist pos. semidefinit:

$$x^T \cdot 2M^TMx = 2(Mx)^T Mx \geq 0 \quad \forall x \in \mathbb{R}^n$$

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

b) Man kann zeigen, dass M^TM invertierbar ist, falls $\mathrm{rang}(M) = m$, d.h. es gibt m der n Gleichungen des Systems $Ma = y$, die lin. 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 $n > m$, $A \in \mathbb{R}^{n \times m}$, $\mathrm{rang}(A) = m$ 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 $A^+ = (A^TA)^{-1}A^T$.

74.6. Bemerkung

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

74.7. Beispiel

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

$$(0,1), \quad (1,3), \quad (2,4), \quad (3,4).$$

Lösung: Wir suchen die Koeffizienten der Geradengleichung

$$y = a_1 + a_2 x.$$

Hierzu haben wir 4 Bestimmungsgleichungen:

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

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

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

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

Das überbestimmte Gleichungssystem lautet: $Ma = y$ mit

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

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

$(M^T M)^{-1}$ existiert, da $\det(M^T M) = 4 \cdot 14 - 6 \cdot 6 = 20 \neq 0$.

Nach kurzer Rechung erhält man:

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

Damit lautet die Pseudolösung von $Ma = y$:

$$a^* = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = (M^T M)^{-1} M^T y$$

$$= \frac{1}{10} \begin{pmatrix} 7 & -3 \\ -3 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 2 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \\ 4 \\ 4 \end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{10} \begin{pmatrix} 7 & -3 \\ -3 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 12 \\ 23 \end{pmatrix} = \frac{1}{10} \begin{pmatrix} 15 \\ 10 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1,5 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Die Ausgleichsgerade lautet somit

$$y = 1,5 + x$$