Die Methode der kleinsten Quadrate

Wir besprechen hier die Methode der kleinsten Quadrate, die von Legendre und Gauß um 1800 gefunden wurde und von Gauß zur Auswertung astronomischer Daten verwandt wurde.

Wir gehen von dem linearen Gleichungssystem

$$Ax = b \tag{1}$$

aus, wobei $A \in \mathbb{R}^{m,n}$ und $b \in \mathbb{R}^m$ ist. Nach der Lösungstheorie für lineare Gleichungssysteme aus dem 1. Semester ist (1) genau dann lösbar, wenn $\mathrm{Rg}(A) = \mathrm{Rg}(A, b)$ ist. Wenn man davon ausgeht, daß in (1), sei es durch Messung oder durch Rundung, gestörte Werte eingehen, erscheint es glaubhaft, daß sich dadurch die Ränge von A und (A, b) ändern. Insbesondere bedeutet dies, daß, auch wenn das exakte Gleichungssystem lösbar war, dies möglicherweise nicht mehr für das gestörte gilt. Wir werden also daran interessiert sein, (1) „so gut wie möglich zu lösen". Dabei muß natürlich das umgangsspachliche „so gut wie möglich" in eine mathematische Form gebracht werden. Eine dieser Formen ist, die Norm von $Ax - b$ möglichst klein zu halten.

Es sei nun der $\mathbb{R}^m$ der kanonische, euklidische Vektorruam, und bezeichne $\|\ \ \|$ die durch das Standardskalarprodukt definierte Norm des $\mathbb{R}^m$. Dann lautet also unsere Aufgabe, ein $x_0 \in \mathbb{R}^n$ zu finden, so daß gilt

$$\|Ax_0 - b\| = \min\{\|Ax - b\| \mid x \in \mathbb{R}^n\}\,.$$

Wir zeigen nun, daß ein solches $x_0 \in \mathbb{R}^n$ existiert, und folgen dabei dem Weg, der in der 8. Aufgabe der Klausur vorgeschlagen wurde.

Wir zeigen zuerst, daß das lineare Gleichungssystem

$$A^tAx = A^tb \tag{2}$$

lösbar ist:
Es gilt:

$$\mathrm{Rg}(A^tA) = n - \dim\ker(A^tA)$$

und

$$\mathrm{Rg}(A^tA, A^tb) = \mathrm{Rg}\begin{pmatrix} A^tA \\ b^tA \end{pmatrix} = n - \dim\ker\begin{pmatrix} A^tA \\ b^tA \end{pmatrix}.$$

Damit ist $\mathrm{Rg}(A^tA) = \mathrm{Rg}(A^tA, A^tb)$ gleichbedeutend mit $\dim\ker(A^tA) = \dim\ker\begin{pmatrix} A^tA \\ b^tA \end{pmatrix}$.

Wir zeigen, daß $\ker(A^tA) = \ker\begin{pmatrix} A^tA \\ b^tA \end{pmatrix}$ ist:

Da offensichtlich $\ker\begin{pmatrix} A^tA \\ b^tA \end{pmatrix} \subseteq \ker(A^tA)$ ist, reicht es, $\ker(A^tA) \subseteq \ker\begin{pmatrix} A^tA \\ b^tA \end{pmatrix}$ zu zeigen. Es sei also $x \in \ker(A^tA)$, dann gilt $A^tAx = 0$ und somit erst recht $0 = x^tA^tAx = \|Ax\|^2$, also $\|Ax\| = 0$, woraus $Ax = 0$ folgt. Dies gibt nun $b^tAx = 0$ und damit $x \in \ker\begin{pmatrix} A^tA \\ b^tA \end{pmatrix}$. Also gilt $\ker(A^tA) = \ker\begin{pmatrix} A^tA \\ b^tA \end{pmatrix}$, und somit ist (2) lösbar. Dies ist die Lösung zu Teil (b).

Wir zeigen nun, daß eine Lösung von (2) die gesuchte Minimaleigenschaft besitzt:
Es sei $x_0 \in \mathbb{R}^n$ mit $A^tAx = A^tb$. Wir werden zeigen, daß für alle $x \in \mathbb{R}^n$ gilt

$$\|Ax_0 - b\| \le \|Ax - b|\,.$$

Dazu betrachten wir

$$\begin{aligned} ||Ax-b||^2 &= ||Ax_0 - b + A(x-x_0)||^2 \\ &= (Ax_0 - b + A(x-x_0))^t \cdot (Ax_0 - b + A(x-x_0)) \\ &= ||Ax_0 - b||^2 + 2(A(x-x_0))^t \cdot (Ax_0 - b) + ||A(x-x_0)||^2 . \end{aligned}$$

Nun gilt aber

$$(A(x-x_0))^t \cdot (Ax_0 - b) = (x-x_0)^t \cdot (A^tAx_0 - A^tb) = 0 ,$$

da x_0 eine Lösung von $A^tAx = A^tb$ ist. Also erhalten wir

$$||Ax-b||^2 = ||Ax_0 - b||^2 + ||A(x-x_0)||^2. \tag{3}$$

Somit gilt $||Ax_0 - b|| \leq ||Ax - b||$ für alle $x \in \mathbb{R}^n$. Dies ist die Lösung von Teil (c).

Wir haben sogar noch etwas mehr gezeigt, denn ist $y \in \mathbb{R}^n$ ein weiterer Vektor mit

$$||Ay - b|| = \min\{||Ax - b|| \mid x \in \mathbb{R}^n\} , \tag{4}$$

so gilt nach (3), daß $||A(y-x_0)|| = 0$, also $A(y-x_0) = 0$ ist. Damit bilden die Vektoren $y \in \mathbb{R}^n$ mit der Eigenschaft (4) eine lineare Varietät, die durch das lineare Gleichungssystem $Ay = Ax_0$ bestimmt ist.
In dem Fall, daß $Ax = b$ sogar lösbar ist, gibt es ein $x_0 \in \mathbb{R}^n$ mit $||Ax_0 - b|| = 0$, was natürlich das Minimum der $||Ax - b||$ ist. Deshalb sind in diesem Fall die Lösungsmengen von $Ax = b$ und $A^tAx = A^tb$ gleich.

Da $||Ax - b|^2$ eine Summe von Quadraten ist, erklärt dies den Namen der Methode.

Beispiel: *Lineare Regression*

Es sei eine Meßreihe $\binom{u_1}{v_1}, \ldots, \binom{u_k}{v_k} \in \mathbb{R}^2$ gegeben, die wir so interpretieren, daß wir in einem Experiment zu einem u_i das Ergebnis v_i gemessen haben. Wir wollen nun annehmen, daß der Zusammenhang zwischen u und v aus theoretischen oder anderen Gründen als linear angenommen werden kann. Das heißt, es gibt $r, s, t \in \mathbb{R}$ mit $ru + sv = t$. Diese r, s, t wollen wir nun bestimmen, was auf die Lösung des linearen Gleichungssystems

$$A \cdot \begin{pmatrix} r \\ s \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} u_1 & v_1 \\ \vdots & \vdots \\ u_k & v_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r \\ s \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t \\ \vdots \\ t \end{pmatrix} =: b$$

führt. Nun enthalten unsere Meßdaten häufig Meßfehler, so daß dieses Gleichungssystem höchst selten überhaupt eine Lösung haben wird. Deshalb möchte man eine Gerade bestimmen, die „so gut wie möglich“ aus den Meßdaten den linearen Zusammenhang $ru + sv = t$ annähert. Dies kann man mit der Methode der kleinsten Quadrate tun, indem man $x_0 = \begin{pmatrix} r \\ s \end{pmatrix}$ bestimmt, so daß

$$||Ax - b||^2 = \sum_{i=1}^{k} (rx_i + sy_i - t)^2$$

minimal wird. Fast immer wird die Lösung x_0 von $A^tAx = A^tb$ sogar eindeutig sein, da die Matrix A^tA meist den Rang 2 haben wird.