Aufgabe 18.128

Zur Bestimmung einer Größe x liegen die widersprüchlichen Gleichungen $2x=1$ und $x=1$ vor. Bestimmen Sie den Wert von x, der die widersprüchlichen Gleichungen im Sinne der Methode der kleinsten Quadrate am besten erfüllt!

Lösung:

Es handelt sich um ein Problem der **linearen Ausgleichsrechnung**, bei der versucht wird, ein i.A. überbestimmtes (widersprüchliches) Gleichungssystem $\boldsymbol{A}\vec{x}=\vec{b}$ bestmöglich zu erfüllen. Bei der **Methode der kleinsten Quadrate** wird die Euklidische Norm des Residuums $\|\boldsymbol{A}\vec{x}-\vec{b}\| = \sqrt{(\boldsymbol{A}\vec{x}-\vec{b})\cdot(\boldsymbol{A}\vec{x}-\vec{b})}$ minimiert. Ist das Gleichungssystem lösbar, so ist das Minimum 0 und wird in der Lösung des Gleichungssystems angenommen.

Rechnerisch ist es einfacher, statt der Norm ihr Quadrat zu minimieren, das Minimum wird an der gleichen Stelle angenommen. Wir suchen also $\min\limits_{\vec{x}}\Big((\boldsymbol{A}\vec{x}-\vec{b})\cdot(\boldsymbol{A}\vec{x}-\vec{b})\Big)$. Es gilt

$$\underbrace{(\boldsymbol{A}\vec{x}-\vec{b})\cdot(\boldsymbol{A}\vec{x}-\vec{b})}_{\text{Skalarprodukt}}=\underbrace{(\boldsymbol{A}\vec{x}-\vec{b})^{\mathsf{T}}(\boldsymbol{A}\vec{x}-\vec{b})}_{\text{Matrizenmultiplikation}}=(\vec{x}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{A}^{\mathsf{T}}-\vec{b}^{\mathsf{T}})(\boldsymbol{A}\vec{x}-\vec{b})=\vec{x}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{A}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{A}\vec{x}-\vec{x}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{A}^{\mathsf{T}}\vec{b}-\vec{b}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{A}\vec{x}+\vec{b}^{\mathsf{T}}\vec{b}$$
$$=\vec{x}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{A}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{A}\vec{x}-\vec{x}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{A}^{\mathsf{T}}\vec{b}-(\boldsymbol{A}\vec{x})^{\mathsf{T}}\vec{b}+\vec{b}^{\mathsf{T}}\vec{b}=\vec{x}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{A}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{A}\vec{x}-2\vec{x}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{A}^{\mathsf{T}}\vec{b}+\vec{b}^{\mathsf{T}}\vec{b}$$

Wegen $\vec{x}^{\mathsf{T}}\vec{c}=\vec{c}^{\mathsf{T}}\vec{x}=\sum c_i x_i$ ist $\nabla(\vec{x}^{\mathsf{T}}\vec{c})=\nabla(\vec{c}^{\mathsf{T}}\vec{x})=\vec{c}$.

Nach der Produktregel folgt $\nabla(\vec{x}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{A}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{A}\vec{x})=\boldsymbol{A}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{A}\vec{x}+(\vec{x}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{A}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{A})^{\mathsf{T}}=\boldsymbol{A}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{A}\vec{x}$.

Somit ist $\nabla\Big((\boldsymbol{A}\vec{x}-\vec{b})\cdot(\boldsymbol{A}\vec{x}-\vec{b})\Big)=2\boldsymbol{A}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{A}\vec{x}-2\boldsymbol{A}^{\mathsf{T}}\vec{b}$.

Stationäre Punkte für $\nabla\Big((\boldsymbol{A}\vec{x}-\vec{b})\cdot(\boldsymbol{A}\vec{x}-\vec{b})\Big)=\vec{0}$, d.h. für $\boxed{\boldsymbol{A}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{A}\vec{x}=\boldsymbol{A}^{\mathsf{T}}\vec{b}}$
(**Gaußsches Normalgleichungssystem**).

Als Hessematrix ergibt sich $\boldsymbol{H}_{(\boldsymbol{A}\vec{x}-\vec{b})\cdot(\boldsymbol{A}\vec{x}-\vec{b})}=2\boldsymbol{A}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{A}$, diese ist wegen $\vec{x}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{A}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{A}\vec{x}=(\boldsymbol{A}\vec{x})\cdot(\boldsymbol{A}\vec{x})$ positiv definit, wenn $\boldsymbol{A}\vec{x}=\vec{0}$ nur trivial lösbar ist, so dass dann im stationären Punkt ein Minimum vorliegt. Ist $\boldsymbol{A}\vec{x}=\vec{0}$ nichttrival lösbar, so ist die Hessematrix positiv semidefinit.Dda eine quadratische Funktion betrachtet wird, deren höhere Ableitungen ja verschwinden, liegen auch da in den stationären Punkten Minima vor.

(Dass im stationären Punkt ein Minimum vorliegt, ist auch deshalb offensichtlich, da die betrachtete Funktion nach unten durch 0 beschränkt ist und es dehalb ein Minumum geben muss.)

Konkret: Gleichungssystem: $\begin{pmatrix}2\\1\end{pmatrix}x=\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}$,

Normalgleichungssystem: $(2\quad 1)\begin{pmatrix}2\\1\end{pmatrix}x=(2\quad 1)\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}$, d.h. $5x=3$, $\underline{\underline{x=\frac{3}{5}}}$

Ohne die Matrizenschreibweise kann man dies als Minimierung von $f(x)=(2x-1)^2+(x-1)^2$ darstellen: $f'(x)=4(2x-1)+2(x-1)=10x-6=0$, $x=\frac{3}{5}$, $f''(x)=10>0$, also dort Minimum.

Das Residuum im Minimum beträgt $\sqrt{\left(2\cdot\frac{3}{5}-1\right)^2+\left(\frac{3}{5}-1\right)^2}=\sqrt{\frac{1^2+(-2)^2}{5^2}}=\frac{1}{\sqrt{5}}$.