

Definition

Seien $a \in \mathbb{R}^n$ und $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ eine in a partiell differenzierbare Funktion. Wir nennen a *kritischen Punkt* von f , falls

$$\text{grad}(f)(a) = \begin{pmatrix} \partial_1 f(a) \\ \vdots \\ \partial_n f(a) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

gilt, d. h. wenn $\partial_i f(a) = 0$ für alle $i = 1, \dots, n$.

Wir wollen nun gerne die kritischen Punkte der Funktion $r^2: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$, $x \mapsto |Ax - y|^2$ von Folie 9 ausrechnen.

Bemerkung

Wir betrachten nun r^2 statt r , da beide Funktionen die gleichen Minima besitzen und man mit r^2 leichter rechnen kann (die Wurzel beim Betrag fällt weg).

Hierfür brauchen wir das Konzept des Transponierens.

Beispiel

Seien $a = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}$ und $f: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$, $\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \mapsto x_1 \cdot x_2 - x_1$. Dann gilt

$$\begin{aligned} \partial_1 f(a) &= a_2 - 1, \\ \partial_2 f(a) &= a_1, \end{aligned}$$

sodass

$$\text{grad}(f)(a) = \begin{pmatrix} a_2 - 1 \\ a_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \Leftrightarrow a = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Also ist $a = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ der einzige kritische Punkt von f .

Definition

Seien $n, m \in \mathbb{N}^*$ und $A = (a_{i,j})_{i,j} \in \mathbb{R}^{m \times n}$. Dann heißt

$$A^T = (a_{j,i})_{i,j} = \begin{pmatrix} a_{1,1} & a_{2,1} & \cdots & a_{m,1} \\ a_{1,2} & a_{2,2} & \cdots & a_{m,2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{1,n} & a_{2,n} & \cdots & a_{m,n} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times m}$$

die *transponierte Matrix* von A .

Bemerkung

- 1 Die transponierte Matrix ergibt sich also indem man alle Einträge an der Diagonale spiegelt. In anderen Worten: Die Spalten und Zeilen werden getauscht.
- 2 Es gilt $(A^T)^T = A$, d. h. wenn wir die Matrix zweimal transponieren erhalten wir die ursprüngliche Matrix zurück.

Beispiel

1 Sei $A = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{3 \times 2}$. Dann gilt

$$A^T = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{2 \times 3}.$$

2 Sei $A = \begin{pmatrix} 1 & 3 & 0 \\ 4 & -2 & -8 \\ 5 & 2 & 9 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$. Dann gilt

$$\begin{pmatrix} 1 & 4 & 5 \\ 3 & -2 & 2 \\ 0 & -8 & 9 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{3 \times 3}.$$

Beispiel

3 Sei $x = \begin{pmatrix} 3 \\ 6 \\ -2 \\ 1 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^4 = \mathbb{R}^{4 \times 1}$. Dann gilt

$$x^T = (3, 6, -2, 1) \in \mathbb{R}^{1 \times 4}.$$

Bemerkung

1 Wir sehen also, dass aus Spaltenvektoren durch Transponieren Zeilenvektoren entstehen und umgekehrt.

2 Es gilt

$$x^T x = |x|^2$$

für alle $x \in \mathbb{R}^n$.

Rechenregeln

Seien A, B Matrizen (mit jeweils passenden Größen) und $\alpha \in \mathbb{R}$. Dann gilt:

1 $(A + B)^T = A^T + B^T$,

2 $(\alpha A)^T = \alpha A^T$,

3 $(AB)^T = B^T A^T$,

4 $\det(A^T) = \det(A)$, falls A quadratisch ist,

5 falls A invertierbar ist, so ist auch A^T invertierbar und es gilt

$$(A^T)^{-1} = (A^{-1})^T.$$

Wir können also nun

$$\begin{aligned} r(x)^2 &= |Ax - y|^2 = (Ax - y)^T (Ax - y) = ((Ax)^T - y^T)(Ax - y) \\ &= (Ax)^T Ax - (Ax)^T y - y^T Ax + y^T y \\ &= x^T A^T Ax - ((Ax)^T y + y^T Ax) + |y|^2 \\ &= x^T A^T Ax - (x^T A^T y + (x^T A^T y)^T) + |y|^2 \\ &= x^T (A^T A)x - 2x^T (A^T y) + |y|^2 \end{aligned}$$

für alle $x \in \mathbb{R}^2$ schreiben. Der Gradient von r^2 berechnet sich zu

$$\text{grad}(r^2)(x) = 2A^T Ax - 2A^T y = 2(A^T Ax - A^T y)$$

für alle $x \in \mathbb{R}^2$.

Damit folgt

$$\text{grad}(r^2)(x^*) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \Leftrightarrow A^T A x^* = A^T y.$$

Da

$$A^T A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} \rightsquigarrow (A^T A)^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix},$$

$$A^T y = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ -3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -5 \end{pmatrix}$$

gelten, folgt

$$x^* = (A^T A)^{-1} A^T y = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ -5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -\frac{5}{2} \end{pmatrix}.$$

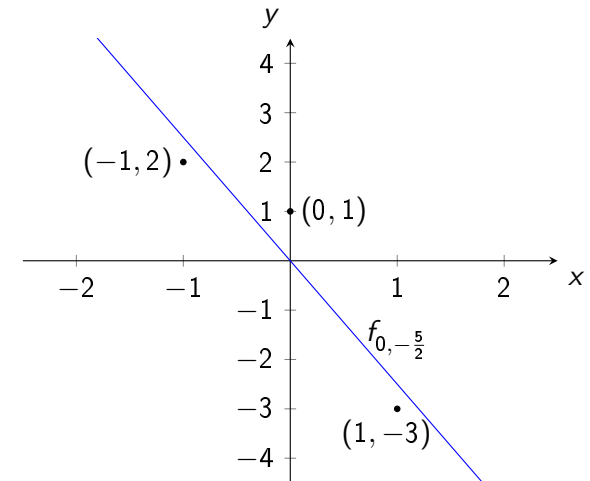
Im Allgemeinen sind wir also an folgender Problemstellung interessiert: Zu gegebenen Messdaten $(t_1, y_1), \dots, (t_m, y_m) \in \mathbb{R}^2$ und einer Funktion $f_{x_1, \dots, x_n}: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, die von den Parametern $x_1, \dots, x_n \in \mathbb{R}$ abhängt, suchen wir die Parameter $x_1^*, \dots, x_n^* \in \mathbb{R}$, die das *Residuum*

$$r: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}, \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \mapsto \left| \begin{pmatrix} f_{x_1, \dots, x_n}(t_1) \\ \vdots \\ f_{x_1, \dots, x_n}(t_m) \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_m \end{pmatrix} \right|$$

minimiert. Im Folgenden betrachten wir nur Funktionen der Form

$$f_{x_1, \dots, x_n}: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}, t \mapsto x_1 h_1(t) + x_2 h_2(t) + \dots + x_n h_n(t),$$

wobei $h_1, \dots, h_n: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ geeignete Funktionen sind. In diesem Fall sprechen wir von einer *linearen Ausgleichsrechnung*.



Damit gilt

$$\begin{pmatrix} f_{x_1, \dots, x_n}(t_1) \\ \vdots \\ f_{x_1, \dots, x_n}(t_m) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 h_1(t_1) + \dots + x_n h_n(t_1) \\ \vdots \\ x_1 h_1(t_m) + \dots + x_n h_n(t_m) \end{pmatrix} \\ = \underbrace{\begin{pmatrix} h_1(t_1) & \dots & h_n(t_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ h_1(t_m) & \dots & h_n(t_m) \end{pmatrix}}_{A \in \mathbb{R}^{m \times n}} \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix},$$

sodass

$$r(x) = |Ax - y|$$

für alle $x \in \mathbb{R}^n$, wobei $y = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_m \end{pmatrix}$.

