

Beispiel

Wir haben folgende Messdaten gegeben:

t	-1	0	1
y	2	1	-3

Aus theoretischen Überlegungen vermuten wir, dass sich die Messdaten durch eine Funktion der Form

$$f_{x_1, x_2}: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}, t \mapsto x_1 + x_2 t$$

mit geeigneten Parametern $x_1, x_2 \in \mathbb{R}$ beschreiben lässt. Da f_{x_1, x_2} von 2 Parametern abhängt, wir aber 3 Messpunkte haben, werden wir vermutlich keine Parameter finden, sodass f_{x_1, x_2} alle Messpunkte interpoliert, d.h. die Gleichungen

$$f_{x_1, x_2}(-1) = 2, \quad f_{x_1, x_2}(0) = 1, \quad f_{x_1, x_2}(1) = -3$$

werden (i. A.) nicht alle gleichzeitig erfüllt. Können wir Parameter finden, sodass f_{x_1, x_2} die Messdaten „bestmöglich“ approximiert?



Um ein Maß für den Fehler der Funktion von der Messung zu definieren, brauchen wir zunächst einen Abstandsbegriff in höheren Dimensionen.

Definition

Für einen Vektor $w = \begin{pmatrix} w_1 \\ \vdots \\ w_n \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^n$ nennen wir die positive reelle

Zahl

$$|w| = \sqrt{w_1^2 + \dots + w_n^2}$$

den *Betrag* von w .

Wir suchen nun einen Vektor $x^* \in \mathbb{R}^2$, der

$$r(x^*) \leq r(x)$$

für alle $x \in \mathbb{R}^2$ erfüllt, d. h. wir wollen die Funktion

$$r: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}, x \mapsto |Ax - y|$$

minimieren. Wie finden wir $x^* \in \mathbb{R}^2$?

Wir müssen uns also überlegen wir einen Tiefpunkt einer Funktion mit Definitionsbereich \mathbb{R}^2 berechnen können. Da wir für eine Funktion $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ die Ableitung berechnen um einen Tiefpunkt zu bestimmen, brauchen wir zunächst einen Begriff der Ableitung für Funktionen mit Definitionsbereich \mathbb{R}^2 .

Definition

Seien $n \in \mathbb{N}^*$, $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ und $a = \begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^n$. Definiere

$$g_{a,1}: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}, x \mapsto f(x, a_2, \dots, a_n),$$

$$g_{a,2}: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}, x \mapsto f(a_1, x, a_3, \dots, a_n),$$

$$\vdots$$

$$g_{a,n}: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}, x \mapsto f(a_1, \dots, a_{n-1}, x).$$

Für $i \in \{1, \dots, n\}$ heißt

$$\begin{aligned} \partial_i f(a) &= g'_{a,i}(a_i) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{g_{a,i}(a_i + h) - g_{a,i}(a_i)}{h} \\ &= \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(a + he_i) - f(a)}{h} \end{aligned}$$

die *i-te partielle Ableitung von f in a .*

Definition

Falls die i -te partielle Ableitung von f in a für alle $i = 1, \dots, n$ existiert, so nennen wir f *partiell differenzierbar in a* . Ist f in jedem Punkt partiell differenzierbar, so heißt f *partiell differenzierbar*. Falls f partiell differenzierbar in a ist, nennen wir den Vektor

$$\text{grad}(f)(a) = \begin{pmatrix} \partial_1 f(a) \\ \vdots \\ \partial_n f(a) \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^n$$

Gradient von f in a .

Bemerkung

Die i -te Ableitung von f wird also gebildet indem man alle Variablen bis auf die i -te konstant hält und dann nach der i -ten ableitet.

Beispiel

1 Betrachte die Funktion $f: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$, $\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \mapsto x_1 \cdot x_2$ und sei

$$a = \begin{pmatrix} 4 \\ -1 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^2. \text{ Dann gilt}$$

$$g_{a,1}: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}, x \mapsto x \cdot (-1) = -x,$$

$$g_{a,2}: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}, x \mapsto 4 \cdot x,$$

sodass

$$g'_{a,1}(x) = -1,$$

$$g'_{a,2}(x) = 4$$

für alle $x \in \mathbb{R}$. Also

$$\partial_1 f(a) = g'_{a,1}(4) = -1,$$

$$\partial_2 f(a) = g'_{a,2}(-1) = 4.$$

Beispiel

2 Seien $f: \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$, $\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} \mapsto x_1 + \exp(x_2 \cdot x_3)$ und $a = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix}$.

Dann gilt

$$g_{a,1}: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}, x \mapsto x + \exp(1 \cdot 2) = x + \exp(2),$$

$$g_{a,2}: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}, x \mapsto 2 + \exp(x \cdot 2) = 2 + \exp(2x),$$

$$g_{a,3}: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}, x \mapsto 2 + \exp(1 \cdot x) = 2 + \exp(x),$$

sodass

$$g'_{a,1}(x) = 1,$$

$$g'_{a,2}(x) = 2 \exp(2x),$$

$$g'_{a,3}(x) = \exp(x)$$

für alle $x \in \mathbb{R}$.



Beispiel

Also

$$\partial_1 f(a) = g'_{a,1}(2) = 1,$$

$$\partial_2 f(a) = g'_{a,2}(1) = 2 \exp(2),$$

$$\partial_3 f(a) = g'_{a,3}(2) = \exp(2).$$

Beispiel

3 Seien $f: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$, $\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \mapsto \exp(x_1) \sin(x_2)$ und $a = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}$.

Dann gilt

$$g_{a,1}: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}, x \mapsto \exp(x) \sin(a_2),$$

$$g_{a,2}: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}, x \mapsto \exp(a_1) \sin(x),$$

sodass

$$g'_{a,1}(x) = \exp(x) \sin(a_2),$$

$$g'_{a,2}(x) = \exp(a_1) \cos(x)$$

für alle $x \in \mathbb{R}$. Also

$$\partial_1 f(a) = g'_{a,1}(a_1) = \exp(a_1) \sin(a_2),$$

$$\partial_2 f(a) = g'_{a,2}(a_2) = \exp(a_1) \cos(a_2).$$

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 $i = 1, \dots, n$.

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

$$\partial_1 f(a) = a_2 - 1,$$

$$\partial_2 f(a) = a_1,$$

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 .

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.

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 getauschen.
- 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

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

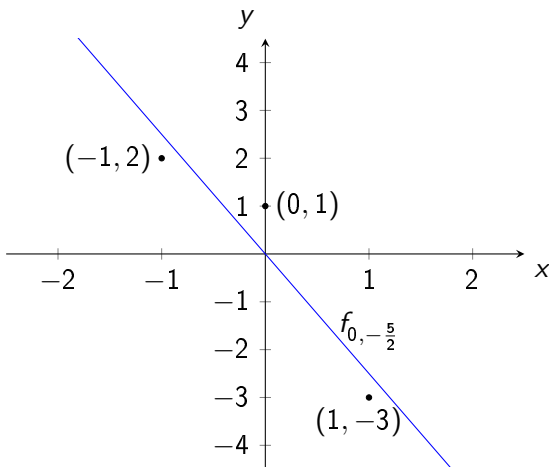
Da

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

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

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

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

sodass

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

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

Bemerkung

Im eindimensionalen Fall kann man hinreichende Bedingungen formulieren, die sicherstellen, dass ein kritischer Punkt ein Tiefpunkt ($f''(x^*) > 0$) oder ein Hochpunkt ($f''(x^*) < 0$) ist. In höheren Dimensionen kann solche Bedingungen ebenfalls formulieren (dies führt auf die *Definitheit* der sog. *Hessematrix*); dies führt aber an dieser Stelle zu weit. Für

$$r^2 : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}, x \mapsto |Ax - y|^2$$

kann man zeigen, dass, wenn $m \geq n$ (d. h. wir haben mehr Messdaten als Parameter) und $A^T A$ invertierbar ist, die Bedingung für einen Tiefpunkt immer erfüllt ist.

Satz

Falls $m \geq n$ und $A^T A$ ist invertierbar, so ist

$$x^* = (A^T A)^{-1} A^T y$$

die eindeutige Lösung des Minimierungsproblems.

Bemerkung

Gilt $m = n$ und

$$h_1(t) = 1, h_2(t) = t, h_3(t) = t^2, \dots, h_n(t) = t^{n-1}$$

für alle $t \in \mathbb{R}$, d. h.

$$f_{x_1, \dots, x_n}(t) = x_1 + x_2 t + x_3 t^2 + \dots + x_n t^{n-1}$$

für alle $t \in \mathbb{R}$, so erhalten wir die Polynominterpolation zurück.

Beispiel

1 Betrachte die Messdaten

t	-1	0	1
y	e^2	e	e^{-3}

und die Funktion

$$f_{x_1, x_2}: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}, \quad t \mapsto x_1 \exp(x_2 t)$$

mit Parametern $x_1, x_2 \in \mathbb{R}$. Dies ist a priori keine lineare Ausgleichsrechnung, da x_2 in der Exponentialfunktion steht. Betrachte deswegen

$$\begin{aligned} g_{\tilde{x}_1, \tilde{x}_2} = \ln(f_{x_1, x_2}): \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}, \quad t \mapsto \ln(x_1 \exp(x_2 t)) &= \ln(x_1) + x_2 t \\ &= \tilde{x}_1 + \tilde{x}_2 t \end{aligned}$$

mit $\tilde{x}_1 = \ln(x_1)$ und $\tilde{x}_2 = x_2$.

Beispiel

Die neuen Messdaten, die durch das Logarithmieren entstehen, lauten

$$\begin{array}{c|ccc} t & -1 & 0 & 1 \\ \hline \tilde{y} & 2 & 1 & -3 \end{array}$$

Dies ist aber unser ursprüngliches Beispiel, sodass wir

$$0 = \tilde{x}_1 = \ln(x_1) \quad \Leftrightarrow \quad x_1 = 1$$

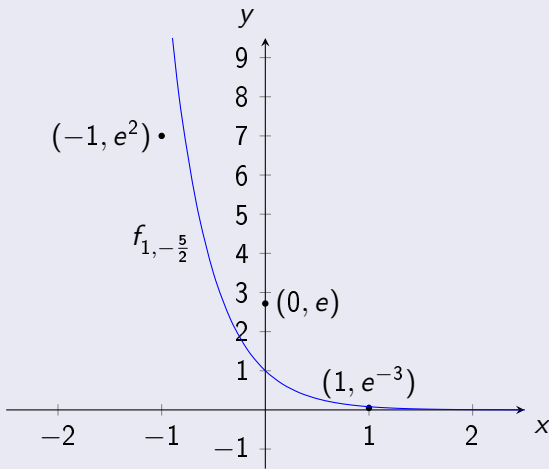
$$-\frac{5}{2} = \tilde{x}_2 = x_2$$

erhalten, also

$$f_{1, -\frac{5}{2}}(t) = \exp\left(-\frac{5}{2}t\right)$$

für alle $t \in \mathbb{R}$.

Beispiel



Beispiel

2 Betrachte die Messdaten

t	0	$\frac{\pi}{2}$	π	2π
y	$\frac{1}{2}$	1	0	$\frac{1}{8}$

und die Funktion

$$f_{x_1, x_2}: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}, t \mapsto x_1 \sin(x) + x_2 \cos(x)$$

mit Parametern $x_1, x_2 \in \mathbb{R}$. Also gilt

$$\frac{1}{2} = f_{x_1, x_2}(0) = x_2,$$

$$1 = f_{x_1, x_2}\left(\frac{\pi}{2}\right) = x_1,$$

$$0 = f_{x_1, x_2}(\pi) = -x_2,$$

$$\frac{1}{8} = f_{x_1, x_2}(2\pi) = x_2.$$

Beispiel

Damit erhalten wir

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \\ 0 & -1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad y = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ 1 \\ 0 \\ \frac{1}{8} \end{pmatrix},$$

sodass

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

$$(A^T A)^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \frac{1}{3} \end{pmatrix}, \quad A^T y = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ 1 \\ 0 \\ \frac{1}{8} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{5}{8} \end{pmatrix}.$$

Beispiel

Also

$$x^* = (A^T A)^{-1} A^T y = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \frac{1}{3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{5}{8} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{5}{24} \end{pmatrix},$$

d. h.

$$f_{1, \frac{5}{24}} : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}, \quad t \mapsto \sin(x) + \frac{5}{24} \cos(t)$$

ist die gesuchte Funktion.

Beispiel

