VI § 17. Die Methode der kleinsten Quadrate

Eine wichtige Methode der numerischen Mathematik, die in vielen mathematischen und nichtmathematischen Gebieten zur Auswertung, qualitativen und komprimierten Darstellung und Interpretation von Messergebnissen, erfassten Daten, Beobachtungswerten, statistischen Materials u. a. eingesetzt wird, findet ihre Begründung in den Sätzen aus Kapitel VI.

Um den Wert einer physikalischen Größe, eines technischen Parameters, eines Merkmals einer Zufallsgröße usw. zu bestimmen, ermittelt, erfasst, beobachtet oder misst man genügend viele Werte dieser Größe, etwa

$$x_1,\ x_2,\ \ldots,\ x_N$$

und sucht dann einen brauchbaren Ersatzwert für diese Größe (diesen Parameter, dieses Merkmal), d. h. einen Wert $\tilde{x}$, der den wahren aber unbekannten Wert möglichst gut ersetzt, zwar ungenau sein kann, in aller Regel aber dennoch irgendetwas Objektbezogenenes mitteilt. Natürlich muss festgelegt werden, was man unter möglichst gut zu verstehen hat. Eine von mehreren akzeptablen Festlegungen ist die ***Methode der kleinsten Quadrate***, die besagt,

für $\tilde{x}$ verwende man das lokale Minimum der Funktion

$$F(x) = \sum_{i=1}^{N} (x - x_i)^2.$$

Neben den offensichtlichen Vorteilen, die die Funktion F besitzt – jeder Messwert wird mit gleicher Wichtigkeit berücksichtigt, verschiedene Abweichungen können sich aufgrund der Quadratbildung $(x - x_i)^2$ nicht kompensieren – hat F aus der Sicht der Analysis und der Einsetzbarkeit analytischer Mittel für weitere Untersuchungen die angenehme Eigenschaft der Differenzierbarkeit auf ganz $\mathbb{R}$ Die Berechnung von $\tilde{x}$ kann mit der Differentialrechnung für Funktionen einer Variablen schnell ausgeführt werden und ergibt (Satz von Fermat) als einzigen stationären Punkt $\tilde{x} = \frac{1}{N}\sum\limits_{i=1}^{N} x_i$, also das arithmetische Mittel der Zahlen $x_1, \ldots, x_N$. Wegen $F''(\tilde{x}) = 2n > 0$ erweist es sich als das absolute Minimum der Funktion F auf $\mathbb{R}$.

Oft hat man die folgende Situation vorliegen. Gegeben sind n Messpunkte

$$(x_1, y_1),\ (x_2, y_2),\ \ldots, (x_N, y_N),$$

gesucht ist eine sogenannte *Ausgleichskurve*, d. h. eine Funktion möglichst einfacher Gestalt (z. B. ein Polynom), die den Messpunkten „möglichst gut" gerecht wird.
Ist die gesuchte Funktion ein Polynom

$$p(x) = a_m x^m + a_{m-1} x^{m-1} + \cdots + a_1 x + a_0 \quad m < n,$$

dann bedeutet „möglichst gut" entsprechend der Methode der kleinsten Quadrate die Bestimmung der Koeffizienten $a_0, a_1, \ldots, a_m$ so, dass die Funktion

$$Q(a_0, a_1, \ldots, a_m) = \sum_{i=1}^{N} (y_i - p(x_i))^2$$

ihr Minimum annimmt.

Ein ähnliches Problem tritt bei der Berechnung des *Interpolationspolynoms* auf. Die Forderungen sind dort etwas anders geartet; man verlangt, dass das Interpolationspolynom in den Punkten x_i gerade die Werte y_i für alle $i = 1, \ldots, N$ annimmt, so dass die Punkte (x_i, y_i) alle auf der Polynomkurve liegen. Im Falle $m = N - 1$ liefern beide Methoden das gleiche Polynom. Natürlich will man mit Polynomen geringen Grades auskommen, denn einerseits hält sich der Rechenaufwand in Grenzen und andererseits erreicht man damit bereits eine sehr gute Vorstellung von der funktionellen Abhängigkeit der y-Werte von den x-Werten.

Das Problem ist also nach der Festlegung des Polynomgrades (etwa m) die Bestimmung der Koeffizienten $a_0, a_1, \ldots, a_m$ des Polynoms $p(x)$. Die notwendigen Bedingungen für ein lokales Extremum der Funktion Q lauten

$$\frac{\partial Q}{\partial a_0} = \frac{\partial Q}{\partial a_1} = \frac{\partial Q}{\partial a_m} = 0,$$

woraus sich das Gleichungssystem

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^{N} (y_i - p(x_i)) \qquad &= 0 \\
\sum_{i=1}^{N} (y_i - p(x_i))\, x_i \quad &= 0 \\
&\vdots \\
\sum_{i=1}^{N} (y_i - p(x_i))\, x_i^m &= 0
\end{aligned}$$

aus $m + 1$ Gleichungen mit $m + 1$ Unbekannten ergibt[1]. Wenn $a_0^*, a_1^*, \ldots, a_m^*$ eine Lösung des Systems ist, dann nennt man $Q(a_0^*, a_1^*, \ldots, a_m^*)$ das *Fehlermaß*. Dieses gibt Auskunft über die Güte des Ausgleichs mittels des Polynoms $p(x) = a_m^* x^m + \ldots + a_1^* x + a_0^*$.

Als Ausgleichsfunktionen verwendet man problemabhängig häufig auch folgende Funktionen

$$a_0 + a_1 \mathrm{e}^x, \quad a_0 + a_1 \mathrm{e}^{-x}, \quad a_0 + a_1 \cos x + b_1 \sin x, \quad a_0 + \frac{a_1 x}{1 + x^2}.$$

Für die 5 Messpunkte

$$(0.5, 1),\ (1.5, 1.6),\ (3, 2),\ (4, 2.7),\ (5, 3.5)$$

soll die Ausgleichsgerade gefunden werden. Die Lage der Punkte im xy-Koordinatensystem weist auf eine Gerade als Ausgleichskurve hin.

Mit $p(x) = a_0 + a_1 x$ ist das Minimum der Funktion

$$Q(a_0, a_1) = \sum_{i=1}^{5} (y_i - (a_0 + a_1 x_i))^2$$

[1] Diese Gleichungen heißen auch die Gaussschen *Normalgleichungen*.

zu berechnen. Die notwendigen Bedingungen sind in diesem Falle

$$\begin{aligned} 5a_0 + 14a_1 &= 10.8 \\ 14a_0 + 52.5a_1 &= 37.2, \end{aligned}$$

woraus man als Lösung

$$p(x) = 0.7 + 0.52x$$

und als Fehlermaß $Q(0.7, 0.52) = 0.13$ erhält.
Für $Q(a_0, a_1)$ kann man im allgemeinen Falle über das hinreichende Kriterium leicht zeigen, dass die Lösung stets ein lokales Minimum ergibt. Man überzeugt sich leicht davon, dass

$$\frac{\partial^2 Q}{\partial a_0^2} = 2m, \ \frac{\partial^2 Q}{\partial a_0 \partial a_1} = \frac{\partial^2 Q}{\partial a_1 \partial a_0} = 2\sum_{i=1}^{m} x_i, \ \frac{\partial^2 Q}{\partial a_1^2} = 2\sum_{i=1}^{m} x_i^2$$

gilt, so dass $\frac{\partial^2 Q}{\partial a_0^2} > 0$ und wegen der CAUCHYschen Ungleichung

$$\begin{vmatrix} \frac{\partial^2 Q}{\partial a_0^2} & \frac{\partial^2 Q}{\partial a_0 \partial a_1} \\ \frac{\partial^2 Q}{\partial a_1 \partial a_0} & \frac{\partial^2 Q}{\partial a_1^2} \end{vmatrix} = 4\left(m\sum_{i=1}^{m} x_i^2 - (\sum_{i=1}^{m} x_i)^2\right) > 0$$

gilt.
Will man eine Parabel als Ausgleichskurve berechnen, so ergibt sich im vorliegenden Fall als Lösung

$$p(x) = 0.000888x^2 + 0.52815x + 0.681179,$$

also eine Parabel, deren Verlauf im Intervall $[0, 5]$ nahezu als linear anzusehen ist.

Aufgaben

1. Mit Hilfe der Methode der kleinsten Quadrate bestimme man für die Wertepaare

$$(0, 15), \quad (1, 5), \quad (2, 1), \quad (3, 1), \quad (4, 3)$$

eines Messvorganges eine Ausgleichskurve der Art $y = y(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2$.
(Lösung: $y(x) = 2x^2 - 10,8x + 14,6$)

2. Von einem Gas wurden der Druck p und das Volumen V gemessen. Man ermittelte dabei die folgenden Werte

p	61,2	49,5	37,6	28,4	19,2	10,1
V	54,3	61,8	72,4	88,7	118,6	194

Bestimmen Sie mit Hilfe der Methode der kleinsten Quadrate die Konstanten κ und C für die adiabatische Zustandsgleichung $pV^{\kappa} = C$.

Hinweis: Logarithmieren Sie zunächst die Gleichung.

(Lösung: $\kappa = 1,405, \ C = 16032$)