Hochschule
Deggendorf

Mathematik für Infotronik (26)

Gerald Kupris

13.12.2010

Methode der kleinsten Quadrate

Die Methode der kleinsten Quadrate (englisch: method of least squares) ist das mathematische Standardverfahren zur Ausgleichungsrechnung. Dabei wird zu einer Datenpunktwolke eine Kurve gesucht, die möglichst nahe an den Datenpunkten verläuft. Die Daten können physikalische Messwerte, wirtschaftliche Größen oder Ähnliches repräsentieren, während die Kurve aus einer parameterabhängigen problemangepassten Familie von Funktionen stammt.

Die Methode der kleinsten Quadrate besteht dann darin, die Kurvenparameter so zu bestimmen, dass die Summe der quadratischen Abweichungen der Kurve von den beobachteten Punkten minimiert wird. Die Abweichungen werden Residuen genannt.

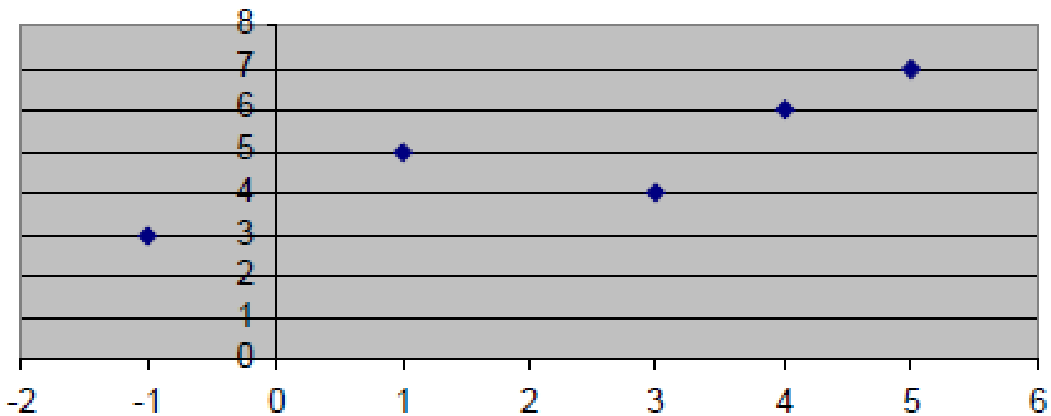
In der Stochastik wird die Methode der kleinsten Quadrate meistens als Schätzmethode in der Regressionsanalyse benutzt, wo sie auch als Kleinste-Quadrate-Schätzung bezeichnet wird.

Lineare Regression

Mit dem Begriff "lineare Regression" bezeichnet man eine numerische Methode, die eine möglichst gute Gerade an einen Satz von Messwerten anpasst.

Beispiel (5 Messwerte):

x_i:	-1	1	3	4	5
y_i:	3	5	4	6	7

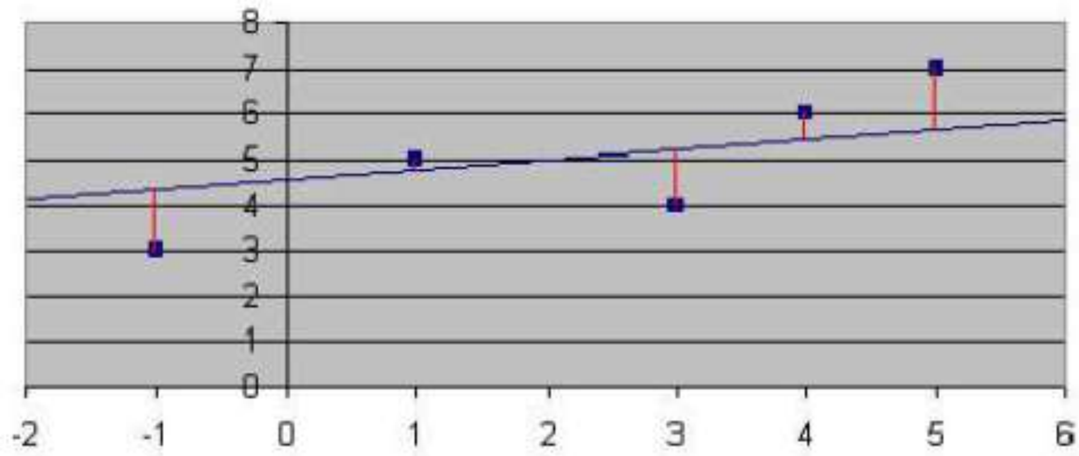


Bei der Betrachtung des Diagramms liegt die Vermutung nahe, dass die zu bestimmende Funktion, wäre sie im Diagramm mit abgebildet, eine Gerade wäre.

Die Anordnung der „Punktwolke“ lässt dies vermuten. Diese Gerade muss durch die Punktwolke hindurchgehen und eine Durchschnittsgerade sein.

Gerade

Man lege die Durchschnittsgerade zunächst einfach mal „gefühlsmäßig“ in das Diagramm.



In der Darstellung, sind schon die Abstände der Geraden zu den Zufallspunkten (= rote Linien), welche die Stichprobe simulieren, gegeben. Wenn man die Gerade der Funktion, der Form **f(x) = ax + b** bestimmen will, welche am besten ein lineares Verhältnis der Merkmale X und Y beschreibt, muss der “Gesamtabstand” der Geraden zu den Punkten der Wolke am geringsten sein.

Geradengleichung

Daraus ergibt sich:

die Geradengleichung: **$y = ax + b$**

der Abstand eines jeden Punktes **P_i (x_i | y_i)** zur Gerade: **$d_i = y_i - a \cdot x_i - b$**

Wenn man a und b für den insgesamt kleinsten Abstand haben will, benötigt man eine Funktion, deren Minimum man bestimmen kann. Diese sollte die Summe aller quadratischen Abweichungen zur Geraden angeben (Methode der kleinsten Fehlerquadrate).

Eine geeignete Funktion f ist:

$$f(a,b) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - a \cdot x_i - b)^2$$

Das ist eine Funktion mit 2 Variablen (a und b).

Nebenbedingung

Eine Nebenbedingung muss geschaffen werden, um die Funktion nur noch von einer Variable abhängig zu machen. Diese Nebenbedingung ergibt sich aus der logischen Annahme, dass die Summe aller nicht quadrierten Abweichungen, welche also auch negative Summanden enthalten kann, „0“ ist. Die Abstände ober- und unterhalb der Geraden müssen gleichmäßig verteilt sein, damit es sich um eine Regressionsgerade handelt.

$$(y_1 - a \cdot x_1 - b) + \ldots + (y_n - a \cdot x_n - b) = 0$$

Man kann nun, für den hier gegebenen Beispielfall einsetzen und umformen. Man erhält **b** (welches bei jedem Fall der Anwendung von Regression verschieden ist) welches man in **f(a, b)** einsetzt.

Dann ergibt sich: $b = -2{,}4 \cdot a + 5$

Einsetzen

$$f(a,b)=\sum_{i=1}^{n}(y_i-a\cdot x_i-b)^2$$

$$b=-2{,}4\cdot a+5$$

$$f(a)=\sum_{i=1}^{n}(y_i-a\cdot x_i+2{,}4\cdot a-5)^2$$

Nun müssen die konkreten Werte für x_i und y_i eingesetzt werden.
Man erhält eine quadratische Gleichung f(a), für die ein Minimum bestimmt werden kann.
Dazu muss die erste Ableitung von f(a) gefunden und gleich Null gesetzt werden.

In unserem Beispiel: $f'(a)=23{,}2\cdot a-13=0$

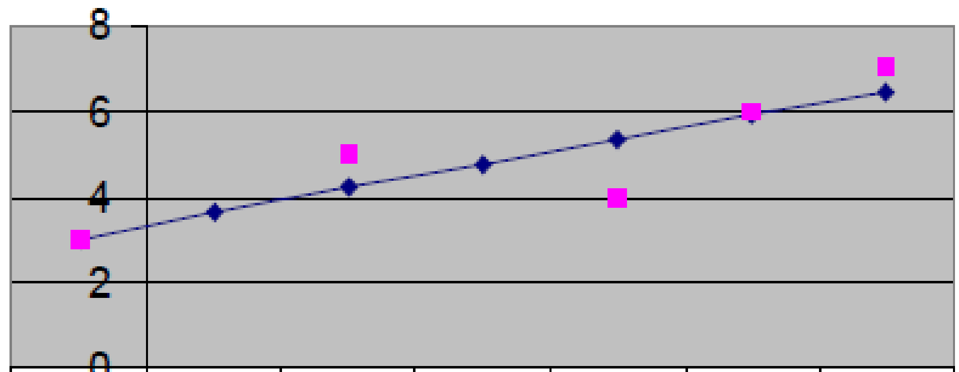
Daraus ergeben sich: $a=0{,}56$

$b=3{,}66$

Fertige Regressionsgerade

Die Formel für die Regressionsgerade lautet also:

$$y = 0{,}56 \cdot x + 3{,}66$$



	-1	0	1	2	3	4	5
Regressionsgerade	3	3,656	4,216	4,776	5,336	5,896	6,456
Zufallspunkte	3		5		4	6	7

Die Vorgehensweise zusammengefasst

1. Allgemeine Formel: $$f(a,b) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - a \cdot x_i - b)^2$$

2. Nebenbedingung: $$(y_1 - a \cdot x_1 - b) + \ldots + (y_n - a \cdot x_n - b) = 0$$

3. Umformung nach b: $$b = \frac{y_1 + \ldots + y_n}{n} - a \cdot \frac{x_1 + \ldots + x_n}{n}$$
$$b = \overline{Y} - a \cdot \overline{X}$$

4. Einsetzen in die allgemeine Formel

5. Finden des Minimums der Abweichungen.

6. Bestimmung von a und b.

Steigung der Regressionsgerade

$$a = \frac{\sum_{i=1}^{n} (y_i - \overline{Y}) \cdot (x_i - \overline{X})}{\sum_{i=1}^{n} (x_i - \overline{X})^2}$$

Bei genauerer Betrachtung ist die Steigung der Regressionsgeraden nichts anderes als der Quotient aus zwei weiteren in der Statistik zur Behandlung von Stichproben gebräuchlichen Werte.

Diese sind :

- **Empirische Kovarianz** im Zähler.
- **Empirische Varianz** im Nenner.

Gebrochenrationale Funktionen

Eine Funktion f, die sich als Quotient zweier Polynome, also in der Form

$$f(x) = \frac{a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3 + \ldots + a_n x^n}{b_0 + b_1 x + b_2 x^2 + b_3 x^3 + \ldots + b_m x^m}, \quad a_n \neq 0, b_m \neq 0,$$

darstellen lässt, bezeichnet man als gebrochenrationale Funktion. Die Koeffizienten a_0, a_1, a_2, a_3, ..., a_n und b_0, b_1, b_2, b_3, ..., b_m sind dabei beliebige Zahlen, wobei allerdings die höchsten Koeffizienten a_n und b_m nicht null sein dürfen.

Nullstellen und Definitionslücken

Bei einer gebrochenrationalen Funktion sind die Nullstellen des Nenners Definitionslücken der Funktion.

Beispiel

Die Nullstellen einer gebrochenrationalen Funktion sind die Nullstellen des Polynoms im Zähler, falls sie nicht gleichzeitig auch Nullstellen des Nenners sind.

Beispiel

Wenn bei einer gebrochenrationalen Funktion x_0 eine gemeinsame Nullstelle von Zähler und Nenner ist, dann lässt sich der Linearfaktor $(x - x_0)$ kürzen. Dabei kann eine Definitionslücke weggekürzt werden.

Beispiel

Echt und unecht gebrochenrationale Funktionen

Falls bei einer gebrochenrationalen Funktion der Grad des Zählerpolynoms größer oder gleich dem Grad des Nennerpolynoms ist, nennt man die Funktion **unecht gebrochenrational** und sonst **echt gebrochenrational**.

Durch Polynomdivision kann man jede unecht gebrochenrationale Funktion zerlegen in eine Summe aus einem Polynom und einer echt gebrochenrationalen Funktion.

Beispiel

Partialbrüche für Linearfaktoren

Jeder Nennernullstelle x_0 einer echt gebrochenrationalen Funktion ordnet man einen Partialbruch zu. Die Form des Partialbruches hängt dabei wie folgt von der Vielfachheit der Nullstelle x_0 ab:

$$
\begin{array}{lcl}
\text{einfache Nullstelle} & \Longrightarrow & \dfrac{A_1}{x - x_0} \\
\text{zweifache Nullstelle} & \Longrightarrow & \dfrac{A_1}{x - x_0} + \dfrac{A_2}{(x - x_0)^2} \\
\vdots & & \\
p\text{-fache Nullstelle} & \Longrightarrow & \dfrac{A_1}{x - x_0} + \dfrac{A_2}{(x - x_0)^2} + \ldots + \dfrac{A_p}{(x - x_0)^p}
\end{array}
$$

Die Konstanten A_1, A_2, ..., A_p bestimmt man durch Koeffizientenvergleich.

Beispiel

Partialbruchzerlegung für Linearfaktoren

Eine echt gebrochenrationale Funktion, bei der sich der Nenner in Linearfaktoren zerlegen lässt, kann man auf folgende Weise in eine Summe von Partialbrüchen zerlegen:

(1) Bestimme alle Nullstellen des Nenners.

(2) Ordne jeder Nennernullstelle einen geeigneten Partialbruch zu.

(3) Bestimme die Konstanten in den Partialbrüchen so, dass die Summe der Partialbrüche mit der Funktion übereinstimmt.

Beispiel

Partialbrüche für quadratische Funktionen

Jedem quadratischen Faktor $x^2 + bx + c$ im Nenner einer echt gebrochenrationalen Funktion ordnet man einen Partialbruch zu. Die Form des Partialbruches hängt dabei wie folgt von der Vielfachheit des Faktors $x^2 + bx + c$ ab:

$$\begin{array}{lll}
\text{einfacher Faktor} & \Longrightarrow & \dfrac{B_1x + C_1}{x^2 + bx + c} \\
\text{zweifacher Faktor} & \Longrightarrow & \dfrac{B_1x + C_1}{x^2 + bx + c} + \dfrac{B_2x + C_2}{(x^2 + bx + c)^2} \\
\vdots & & \\
p\text{-facher Faktor} & \Longrightarrow & \dfrac{B_1x + C_1}{x^2 + bx + c} + \dfrac{B_2x + C_2}{(x^2 + bx + c)^2} + \ldots + \dfrac{B_px + C_p}{(x^2 + bx + c)^p}
\end{array}$$

Die Konstanten $B_1, B_2, \ldots, B_p$ und $C_1, C_2, \ldots, C_p$ bestimmt man durch Koeffizientenvergleich.

Partialbruchzerlegung

Eine gebrochenrationale Funktion lässt sich auch dann in Partialbrüche zerlegen, wenn sich das Nennerpolynom nicht vollständig in Linearfaktoren zerlegen lässt:

(1) Bestimme alle linearen und quadratischen Faktoren des Nenners.

(2) Ordne jedem Faktor einen geeigneten Partialbruch zu.

(3) Bestimme die Konstanten in den Partialbrüchen so, dass die Summe der Partialbrüche mit der Funktion übereinstimmt.

Beispiel

Quellen

Thomas Rießinger: Mathematik für Ingenieure, Springer Verlag, Berlin 2009

Lothar Papula: Mathematik für Ingenieure und Naturwissenschaftler, Vieweg+Teubner Verlag, 2009

Jürgen Koch, Martin Stämpfle: Mathematik für das Ingenieurstudium, Hanser Verlag, München, 2010

Kurt Meyberg, Peter Vachenauer: Höhere Mathematik 1, Springer Verlag, Springer Verlag, Berlin 2003

http://de.wikipedia.org