

**VL5: Die Methode der kleinsten Quadrate bei p Regressoren:
Projektion auf p-dimensionale Unterräume, Teil1**

Gegeben seien die Datenvektoren

$$\vec{x}_1 = \begin{pmatrix} x_{1,1} \\ x_{2,1} \\ \vdots \\ x_{n,1} \end{pmatrix}, \quad \vec{x}_2 = \begin{pmatrix} x_{1,2} \\ x_{2,2} \\ \vdots \\ x_{n,2} \end{pmatrix}, \quad \dots, \quad \vec{x}_p = \begin{pmatrix} x_{1,p} \\ x_{2,p} \\ \vdots \\ x_{n,p} \end{pmatrix}$$

und

$$\vec{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$$

Wir möchten das \vec{y} möglichst gut durch eine Linearkombination der $\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_p$ approximieren:

$$\vec{y} = \beta_1 \vec{x}_1 + \beta_2 \vec{x}_2 + \dots + \beta_p \vec{x}_p + \text{error} \quad (1)$$

oder in Koordinaten

$$y_i = \beta_1 x_{i,1} + \beta_2 x_{i,2} + \dots + \beta_p x_{i,p} + \text{error}_i \quad (2)$$

Wenn wir noch einen konstanten Term in Gleichung (2) erlauben wollen, schreiben wir anstatt Gleichung (2) das folgende:

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{i,1} + \beta_2 x_{i,2} + \dots + \beta_p x_{i,p} + \text{error}_i \quad (3)$$

Um eine kompakte Notation in vektorschreibweise zu ermöglichen, definieren wir den Vektor

$$\vec{x}_0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^n$$

so dass wir anstatt von Gleichung (3) auch folgendes schreiben können:

$$\vec{y} = \beta_0 \vec{x}_0 + \beta_1 \vec{x}_1 + \beta_2 \vec{x}_2 + \dots + \beta_p \vec{x}_p + \text{error} \quad (4)$$

Unter ‘möglichst gut’ approximieren wollen wir von jetzt an das Minimieren der L^2 -Norm verstehen. Wir wollen die Regressionskoeffizienten $\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_p$ also durch die Forderung

$$F(\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_p) := \|\vec{y} - (\beta_0 \vec{x}_0 + \beta_1 \vec{x}_1 + \dots + \beta_p \vec{x}_p)\|^2 \stackrel{!}{\rightarrow} \min \quad (5)$$

bestimmen. In Koordinaten liest sich das dann so:

$$F(\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_p) = \sum_{i=1}^n [y_i - (\beta_0 + \beta_1 x_{i,1} + \dots + \beta_p x_{i,p})]^2 \stackrel{!}{\rightarrow} \min$$

oder, um die Notation etwas einheitlicher zu machen,

$$F(\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_p) = \sum_{i=1}^n [y_i - (\beta_0 x_{i,0} + \beta_1 x_{i,1} + \dots + \beta_p x_{i,p})]^2 \stackrel{!}{\rightarrow} \min \quad (6)$$

da wir ja $x_{i,0} = 1$ definiert hatten. Notwendige Bedingung für ein Minimum ist

$$\nabla F = \left(\frac{\partial F}{\partial \beta_0}, \frac{\partial F}{\partial \beta_1}, \dots, \frac{\partial F}{\partial \beta_p} \right) \stackrel{!}{=} 0 \quad (7)$$

Wir haben für $j \in \{0, 1, \dots, p\}$:

$$\frac{\partial F}{\partial \beta_j} = \sum_{i=1}^n (-2x_{i,j}) [y_i - (\beta_0 x_{i,0} + \beta_1 x_{i,1} + \dots + \beta_p x_{i,p})] \stackrel{!}{=} 0 \quad (8)$$

Wegen

$$\sum_{i=1}^n x_{i,j} y_i = \vec{x}_j \vec{y}$$

ist Gleichung (8) äquivalent zu

$$\vec{x}_j \vec{y} - (\beta_0 \vec{x}_j \vec{x}_0 + \beta_1 \vec{x}_j \vec{x}_1 + \dots + \beta_p \vec{x}_j \vec{x}_p) \stackrel{!}{=} 0 \quad \forall j \in \{0, 1, \dots, p\}$$

oder

$$\beta_0 \vec{x}_j \vec{x}_0 + \beta_1 \vec{x}_j \vec{x}_1 + \dots + \beta_p \vec{x}_j \vec{x}_p = \vec{x}_j \vec{y} \quad \forall j \in \{0, 1, \dots, p\}$$

Damit erhalten wir das System

$$\begin{aligned} \beta_0 \vec{x}_0 \vec{x}_0 + \beta_1 \vec{x}_0 \vec{x}_1 + \dots + \beta_p \vec{x}_0 \vec{x}_p &= \vec{x}_0 \vec{y} \\ \beta_0 \vec{x}_1 \vec{x}_0 + \beta_1 \vec{x}_1 \vec{x}_1 + \dots + \beta_p \vec{x}_1 \vec{x}_p &= \vec{x}_1 \vec{y} \\ &\vdots \\ \beta_0 \vec{x}_p \vec{x}_0 + \beta_1 \vec{x}_p \vec{x}_1 + \dots + \beta_p \vec{x}_p \vec{x}_p &= \vec{x}_p \vec{y} \end{aligned} \quad (9)$$

oder in Matrix-Notation

$$A \vec{\beta} = \vec{b} \quad (10)$$

mit

$$A = \begin{pmatrix} \vec{x}_0\vec{x}_0 & \vec{x}_0\vec{x}_1 & \cdots & \vec{x}_0\vec{x}_p \\ \vec{x}_1\vec{x}_0 & \vec{x}_1\vec{x}_1 & \cdots & \vec{x}_1\vec{x}_p \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \vec{x}_p\vec{x}_0 & \vec{x}_p\vec{x}_1 & \cdots & \vec{x}_p\vec{x}_p \end{pmatrix}, \quad \vec{b} = \begin{pmatrix} \vec{x}_0\vec{y} \\ \vec{x}_1\vec{y} \\ \vdots \\ \vec{x}_p\vec{y} \end{pmatrix} \quad (11)$$

und dem Vektor der Regressionskoeffizienten

$$\vec{\beta} = \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_p \end{pmatrix} \quad (12)$$

Die beta's sind damit gegeben durch

$$\vec{\beta} = A^{-1}\vec{b} \quad (13)$$

In dem folgendem Lemma halten wir fest, dass, wenn die Regressoren $\vec{x}_0, \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_p$ linear unabhängig sind, die Matrix A auch tatsächlich invertierbar ist.

Lemma 5.1: Die Matrix

$$A = \begin{pmatrix} \vec{x}_0\vec{x}_0 & \vec{x}_0\vec{x}_1 & \cdots & \vec{x}_0\vec{x}_p \\ \vec{x}_1\vec{x}_0 & \vec{x}_1\vec{x}_1 & \cdots & \vec{x}_1\vec{x}_p \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \vec{x}_p\vec{x}_0 & \vec{x}_p\vec{x}_1 & \cdots & \vec{x}_p\vec{x}_p \end{pmatrix}$$

ist genau dann invertierbar, wenn die Vektoren

$$\vec{x}_0, \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_p$$

linear unabhängig sind.

Beweis: Übungsblatt 5. ■

Im folgenden wollen wir immer annehmen, dass die Regressoren $\vec{x}_0, \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_p$ linear unabhängig sind, und wir führen die folgende Notation ein: die Matrix X der Regressoren ist gegeben durch

$$X := \begin{pmatrix} | & | & \cdots & | \\ \vec{x}_0 & \vec{x}_1 & & \vec{x}_p \\ | & | & & | \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times (p+1)} \quad (14)$$

Damit können wir dann schreiben

$$\begin{aligned} X^T X &= \begin{pmatrix} - & \vec{x}_0 & - \\ - & \vec{x}_1 & - \\ & \vdots & \\ - & \vec{x}_p & - \end{pmatrix} \begin{pmatrix} | & | & \cdots & | \\ \vec{x}_0 & \vec{x}_1 & & \vec{x}_p \\ | & | & & | \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \vec{x}_0\vec{x}_0 & \vec{x}_0\vec{x}_1 & \cdots & \vec{x}_0\vec{x}_p \\ \vec{x}_1\vec{x}_0 & \vec{x}_1\vec{x}_1 & \cdots & \vec{x}_1\vec{x}_p \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \vec{x}_p\vec{x}_0 & \vec{x}_p\vec{x}_1 & \cdots & \vec{x}_p\vec{x}_p \end{pmatrix} = A \end{aligned}$$

und

$$X^T \vec{y} = \begin{pmatrix} - & \vec{x}_0 & - \\ - & \vec{x}_1 & - \\ & \vdots & \\ - & \vec{x}_p & - \end{pmatrix} \begin{pmatrix} | \\ \vec{y} \\ | \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vec{x}_0 \vec{y} \\ \vec{x}_1 \vec{y} \\ \vdots \\ \vec{x}_p \vec{y} \end{pmatrix} = \vec{b}$$

und bekommen

$$\vec{\beta} = A^{-1} \vec{b} = (X^T X)^{-1} X^T \vec{y} \quad (15)$$

Der Regression-Fit, das ist die rechte Seite von Gleichung (4) ohne den Error-Term, mit den berechneten beta's, ist dann gegeben durch

$$\begin{aligned} \text{RegressionFit} &:= \beta_0 \vec{x}_0 + \beta_1 \vec{x}_1 + \beta_2 \vec{x}_2 + \cdots + \beta_p \vec{x}_p \\ &= \begin{pmatrix} | & | & \cdots & | \\ \vec{x}_0 & \vec{x}_1 & \cdots & \vec{x}_p \\ | & | & & | \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_p \end{pmatrix} \\ &= X \vec{\beta} \\ &= X (X^T X)^{-1} X^T \vec{y} \\ &=: P_X \vec{y} \end{aligned} \quad (16)$$

mit der $n \times n$ Matrix

$$P_X = X (X^T X)^{-1} X^T \quad (17)$$

Fassen wir unsere Resultate in einem Theorem zusammen:

Theorem 5.2: Gegeben seien die Datenvektoren $\vec{y} \in \mathbb{R}^n$ und $\vec{x}_0, \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_p \in \mathbb{R}^n$ mit $n \geq p + 1$ wobei die Regressoren $\vec{x}_0, \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_p$ linear unabhängig seien, die Matrix der Regressoren

$$X := \begin{pmatrix} | & | & \cdots & | \\ \vec{x}_0 & \vec{x}_1 & \cdots & \vec{x}_p \\ | & | & & | \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times (p+1)}$$

habe also maximalen Rang. Wir betrachten das Minimierungsproblem

$$\begin{aligned} F(\vec{\beta}) &= F(\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_p) = \|\vec{y} - (\beta_0 \vec{x}_0 + \beta_1 \vec{x}_1 + \cdots + \beta_p \vec{x}_p)\|^2 \\ &= \|\vec{y} - X \vec{\beta}\|^2 \xrightarrow{!} \min \end{aligned}$$

Dann gilt: Das F wird durch die folgende Wahl der beta's minimiert,

$$\vec{\beta}_{\min} = (X^T X)^{-1} X^T \vec{y}$$

und die beste Approximation an das \vec{y} , der Regression-Fit $\vec{y}_{\min} := X\vec{\beta}_{\min}$, ist gegeben durch

$$\vec{y}_{\min} = P_X \vec{y}$$

mit der linearen Abbildung

$$P_X : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n ,$$

$$P_X = X(X^T X)^{-1} X^T .$$

In der nächsten Vorlesung werden wir uns dann das P_X etwas genauer anschauen und eine geometrische Interpretation angeben.