V. Ausgleichsrechnung

Ziele: - Überbestimmte LGSe lösen
- (Gauss'sche) Normalengleichungen anwenden

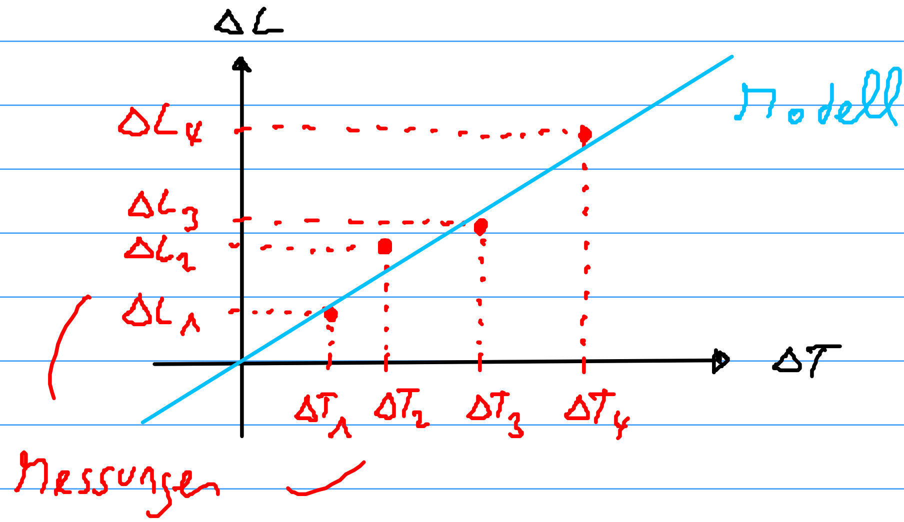
Wozu: s. Bsp. (1)

Es kommt häufig vor, dass man die Parameter eines Modells durch Messungen bestimmen muss. Die Anzahl Messungen ist in der Regel viel grösser als die Anzahl zu bestimmender (Modell-) Parameter.
Dieser Umstand führt zu sog. überbestimmten LGSen, d.h. ein LGS mit mehr Gleichungen als Unbekannten.

Bsp.: (1) linearer Wärmeausdehnungskoeffizient

$$\Delta L = \alpha \; L_0 \; \Delta T$$

Längenänderung — Anfangslänge — Temperaturdifferenz



1 Modell-Parameter α

4 Messungen
$$\Delta L_1 = \alpha L_0 \Delta T_1$$
$$\Delta L_2 = \alpha L_0 \Delta T_2$$
$$\Delta L_3 = \alpha L_0 \Delta T_3$$
$$\Delta L_4 = \alpha L_0 \Delta T_4$$

α ist überbestimmt!

Wie bestimmt nun α?

Idee: Bestimme α so, dass die sog.
Residuen

$$
\begin{aligned}
\alpha L_0 \Delta T_1 - \Delta L_1 &= v_1 \\
\alpha L_0 \Delta T_2 - \Delta L_2 &= v_2 \\
\alpha L_0 \Delta T_3 - \Delta L_3 &= v_3 \\
\alpha L_0 \Delta T_4 - \Delta L_4 &= v_4
\end{aligned}
$$

sog. Fehlergleichungen

minimal sind

↳ ? Hier Methode der kleinsten Quadrate
(Aber andere Arten möglich ...)

Betrachten wir den allgemeinen Fall mit
m Fehlergl. und n Unbekannte $(m > n)$

$$
\begin{aligned}
a_{11} x_1 + a_{12} x_2 + \ldots + a_{1n} x_n - b_1 &= v_1 \\
a_{21} x_1 + a_{22} x_2 + \ldots + a_{2n} x_n - b_2 &= v_2 \\
&\vdots \\
a_{m1} x_1 + a_{m2} x_2 + \ldots + a_{mn} x_n - b_m &= v_m
\end{aligned}
$$

wobei a_{ij} ... Koeffizienten
x_j ... Unbekannte / (Modell-) Parameter
b_i ... Messungen
v_i ... Residuen

Dies definiert ein sog. Ausgleichsproblem, welches daraus besteht die Unbekannten /(Modell-) Parameter $x_1, x_2, \dots, x_n$ so zu bestimmen, dass die Residuen $r_1, r_2, \dots, r_m$ minimal sind.

Dies kann man kürzer mit der Spalten-Schreibweise schreiben:

$$\vec{a}_1 x_1 + \vec{a}_2 x_2 + \dots + \vec{a}_n x_n - \vec{b} = \vec{r}$$

mit

$$\vec{a}_j = \begin{pmatrix} a_{1j} \\ a_{2j} \\ \vdots \\ a_{mj} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^m, \quad \underbrace{\vec{b} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{pmatrix}}_{\text{Messungsvektor}} \in \mathbb{R}^m, \quad \underbrace{\vec{r} = \begin{pmatrix} r_1 \\ r_2 \\ \vdots \\ r_m \end{pmatrix}}_{\text{Residuenvektor}} \in \mathbb{R}^m,$$

$$\vec{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^n$$

Unbekannten /(Modell-) Parameter-Vektor

Und noch kürzer

$$A\vec{x} - \vec{b} = \vec{r}$$

mit

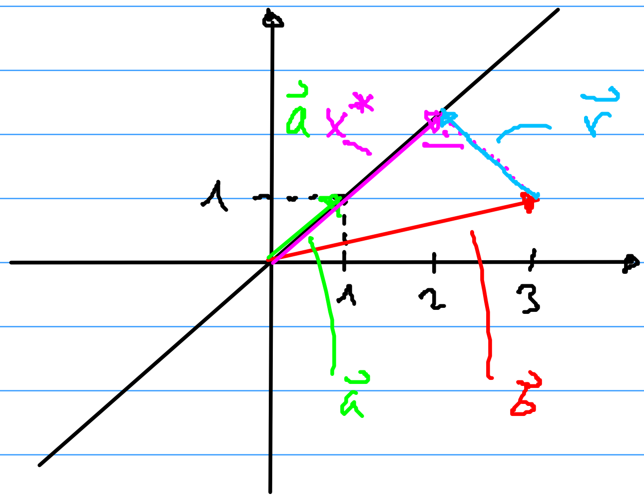
$$A = \begin{pmatrix} | & | & & | \\ \vec{a}_1 & \vec{a}_2 & \dots & \vec{a}_n \\ | & | & & | \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{m \times n}$$

Koeffizientenmatrix der Fehlergl.

Nun zur Frage was bedeut minimal. Dazu betrachte folgendes Ausgleichsproblem mit zwei Gleichungen (~ Messungen) und einen Parameter:

$$\underbrace{\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}}_{\vec a} x - \underbrace{\begin{pmatrix}3\\1\end{pmatrix}}_{\vec b} = \underbrace{\begin{pmatrix}r_1\\r_2\end{pmatrix}}_{\vec r}$$

Graphisch:



$\vec r = \vec a x^* - \vec b$

kürzester/minimaler $\vec r$ wenn $\vec r \perp \vec a$

senkrecht!

25.11.16

$$\rightsquigarrow \langle \vec a, \vec r \rangle = \vec a^T (\vec a x - \vec b) \overset{!}{=} 0$$

$$\rightsquigarrow \vec a^T \vec a x - \vec a^T \vec b = 2x - 4 = 0$$

$$x = 2$$

Wir meinen also mit minimal die kürzeste Länge / euklidische Norm.

Für allgemeine Ausgleichsprobleme verlangen wir (analog zu obigem Bsp.):

$$\langle \vec{a}_1, \vec{r} \rangle = 0$$
$$\langle \vec{a}_2, \vec{r} \rangle = 0$$
$$\vdots$$
$$\langle \vec{a}_n, \vec{r} \rangle = 0$$

Quizz: Wieviele Bedingungen/ Gleichungen sind das?

D.h. $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \dots, \vec{a}_n \perp$ auf $\vec{r}$. Nutzen wir die obige Spaltenschreibweise des Ausgleichs-problem erhalten wir

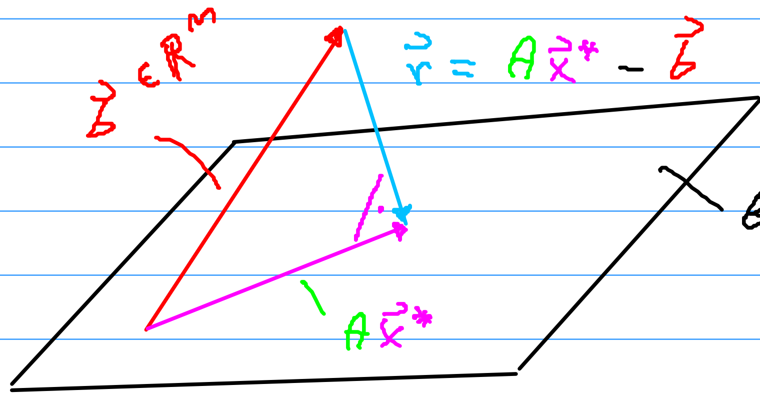
$$\langle \vec{a}_1, \vec{r} \rangle = \vec{a}_1^T \left(\vec{a}_1 x_1 + \vec{a}_2 x_2 + \dots + \vec{a}_n x_n - \vec{b} \right) = 0$$
$$\langle \vec{a}_2, \vec{r} \rangle = \vec{a}_2^T \left(\vec{a}_1 x_1 + \vec{a}_2 x_2 + \dots + \vec{a}_n x_n - \vec{b} \right) = 0$$
$$\vdots$$
$$\langle \vec{a}_n, \vec{r} \rangle = \vec{a}_n^T \left(\vec{a}_1 x_1 + \vec{a}_2 x_2 + \dots + \vec{a}_n x_n - \vec{b} \right) = 0$$

Und noch kürzer

$$A^T A \vec{x} = A^T \vec{b}$$

Dies sind die sog. (Gauss'schen) Normalengleichungen. (NG)

Bem.: (i) Graphisch



$\text{Bild}(A) = \text{span}(\vec{a}_1, \dots, \vec{a}_n) \cong$ n-dimensionaler UR von $\mathbb{R}^m$

(ii) Die NG kann man auch aus einem Minimierungsproblem herleiten

$$\vec{x} = \min_{\vec{x} \in \mathbb{R}^n} \| \underbrace{A\vec{x} - \vec{b}}_{\vec{r}} \|_2$$

$\|\cdot\|_2$: Länge / euklidische Norm

D.h. finde $\vec{x}$ so, dass der Residuenvektor $\vec{r}$ minimale Länge hat

Dieser Lösungsansatz für das Ausgleichsproblem heisst Methode der kleinsten Quadrate

Satz V.1: Sind die Spalten (Vektoren) der Koeffizientenmatrix A der Fehlergl. linear unabhängig, so besitzen die NG eine eindeutige Lösung

Bem.: Die lineare LU der Spaltenvektoren von A ist üblicherweise erfüllt... Sonst hat man ein schlechtes Modell!

Bsp.: (2) Modell: $\underbrace{q}_{\text{Physikalische Grösse}} = \underbrace{\alpha_1}_{\text{Steigung}} \underbrace{t}_{\text{Zeit}} + \underbrace{\alpha_2}_{\text{Höhe (bei } t=0)}$

Messungen:

$$t_1 = 0: \quad \alpha_1 \cdot t_1 + \alpha_2 = 0 \cdot \alpha_1 + \alpha_2 = 6$$

$$t_2 = 1: \quad \alpha_1 \cdot t_2 + \alpha_2 = 1 \cdot \alpha_1 + \alpha_2 = 0$$

$$t_3 = 2: \quad \alpha_1 \cdot t_3 + \alpha_2 = 2 \cdot \alpha_1 + \alpha_2 = 0$$

$m = 3$ Messungen (Gleichungen)

$n = 2$ Parameter

Koeffizientenmatrix $A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}$

Messungsvektor $\quad \vec{b} = \begin{pmatrix} 6 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$

Parametervektor $\quad \vec{x} = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$

nur Bezeichnungen!

NG: $\quad A^T A \vec{x} = A^T \vec{b}$

kurzes rechnen!

$$\begin{pmatrix} 5 & 3 \\ 3 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 6 \end{pmatrix}$$

Lösung: $\quad x_1 = -3 = \alpha_1$

$\quad x_2 = 5 = \alpha_2$