aus: Madeaus / Voß Mathematik I, Lehrbuch für Studierende der Ingenieurwissenschaften, HECO, 1993.

Kapitel 7

Lineare Ausgleichsprobleme

In (fast) allen Wissenschaftsbereichen begegnet man dem Problem, unbekannte Parameter eines funktionalen Zusammenhanges bestimmen zu müssen, dessen Struktur (abgesehen von den Werten der Parameter) etwa aus Naturgesetzen oder Modellannahmen bekannt ist.

Seit Ihrer ersten bewußt erlebten Kinderkrankheit wissen Sie zum Beispiel (wenn Sie damals beim Fiebermessen gut acht gegeben haben), daß die Höhe einer Flüssigkeitssäule h, eine lineare (genauer: affin lineare) Funktion der Temperatur T, ist:

$$h(T) = \alpha + \beta T. \tag{7.1}$$

Wenn Sie diesen Zusammenhang zur Vorhersage einer Höhe $\hat{h}$ bei einer vorgegebene Temperatur $\hat{T}$ verwenden wollen, sollten Sie die reellen Parameter α und β kennen. Hat dies für die von Ihnen betrachtete Flüssigkeit noch niemand vorher gemacht, so müssen Sie α und β aus Messungen bestimmen.

Offenbar genügt zur Bestimmung dieser Parameter die (exakte) Kenntnis zweier Höhen h_1 und h_2 zu verschiedenen Temperaturen T_1, T_2 (vgl. Abbildung 7.1). Die mit (7.1) dann gültigen Gleichungen

$$\begin{aligned} h_1 &= \alpha + T_1\beta \\ h_2 &= \alpha + T_2\beta \end{aligned}$$

stellen dann nämlich ein lineares Gleichungssystem

$$\begin{pmatrix} 1 & T_1 \\ 1 & T_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h_1 \\ h_2 \end{pmatrix} \tag{7.2}$$

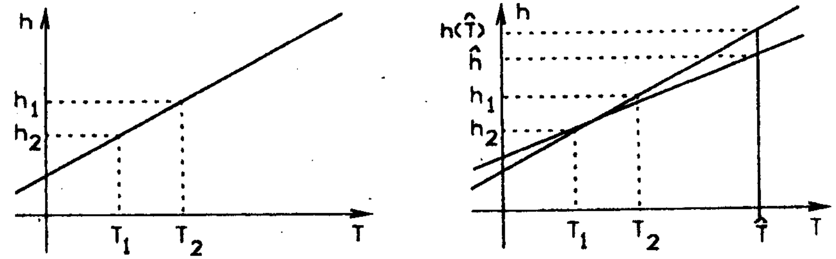

Abbildung 7.1: Vorhersage aus 2 Messungen

mit regulärer Systemmatrix ($\det = T_2 - T_1 \neq 0$) dar, welches α und β eindeutig bestimmt.

Leider sind — wie immer bei Messungen — Fehler grundsätzlich nicht auszuschließen. Dies zieht falsche Werte für α und β und damit eine falsche Voraussage $\hat{h}$ für $h(\hat{T})$ nach sich (vgl. Abbildung 7.1 rechts).

Es ist sicher nicht fernliegend, in dieser Situation weitere Messungen vorzunehmen in der Hoffnung, aus einer größeren Zahl von Meßwerten

$$(T_i, h_i), \quad i = 1, \dots, m, \quad m \geq 3,$$

mehr Information über die wahren Werte von α und β erschließen zu können.

Man sieht sich dann mit der Aufgabe konfrontiert, eine Gerade „möglichst gut" durch die erhaltenen Meßpunkte (vgl. z.B. Abbildung 7.2 links) zu legen, wobei man hofft, ein Verfahren entwickeln zu können, bei dem die Einflüsse (kleiner) Meßfehler sich untereinander ausgleichen.

Das (7.2) entsprechende Gleichungssystem

$$\begin{pmatrix} 1 & T_1 \\ 1 & T_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & T_m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h_1 \\ h_2 \\ \vdots \\ h_m \end{pmatrix}, \tag{7.3}$$

ist in diesem Fall ($m \geq 3$) überbestimmt und hat, wenn die Messungen nicht exakt sind (oder die unexakten Messungen nicht zufällig auf einer Gerade liegen), i.a. keine Lösung.

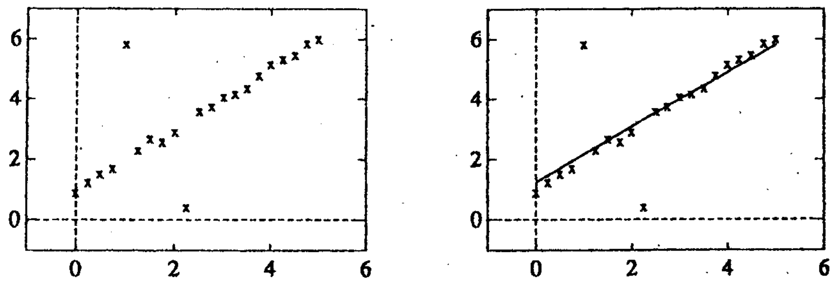

Abbildung 7.2: Ausgleichen von Meßwerten

Wie können wir nun den Lösungsbegriff für lineare Gleichungssysteme erweitern, und eine „Ausgleichslösung" für (7.3) bestimmen, die natürlich mit der herkömmlichen Lösung von (7.3) übereinstimmen sollte, wenn eine solche existiert?

Wir lassen uns bei der Entwicklung eines solchen Begriffes von der Beobachtung leiten, daß im Falle der Lösbarkeit von (7.3) der **Defektvektor**

$$d(\alpha,\beta) := \begin{pmatrix} 1 & T_1 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & T_m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} h_1 \\ \vdots \\ h_m \end{pmatrix}$$

bei einer Lösung $(\alpha^*, \beta^*)^T$ Null wird. Es ist deshalb sicherlich naheliegend, im allgemeinen Fall die Parameter α^* und β^* so zu wählen, daß der Defekt $d(\alpha, \beta)$ möglichst klein wird.

Da wir uns inzwischen daran gewöhnt haben, die Größe eines Vektors mit Normen zu messen, werden wir α^* und β^* so bestimmen wollen, daß eine Norm des Defektes, $\|d(\alpha,\beta)\|$, minimal wird.

Wählt man als Norm speziell die euklidische Norm, so hat man

$$\|d(\alpha,\beta)\|_2^2 = \left\| \begin{pmatrix} 1 & T_1 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & T_m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} h_1 \\ \vdots \\ h_m \end{pmatrix} \right\|_2^2 = \sum_{i=1}^{m} (\alpha + \beta T_i - h_i)^2$$

zu minimieren, also α und β so einzurichten, daß die Summe der Quadrate der Fehler $\varepsilon_i := (\alpha + \beta T_i) - h_i$ der gewählten Gerade $\alpha + \beta T$ in den Datenpunkten (T_i, h_i) minimal wird.

Diese Behandlung des Problems heißt die **Methode der kleinsten Quadrate**. Sie wurde erstmals von C.F. Gauß angewendet, um Bahnelemente von Planeten zu berechnen.

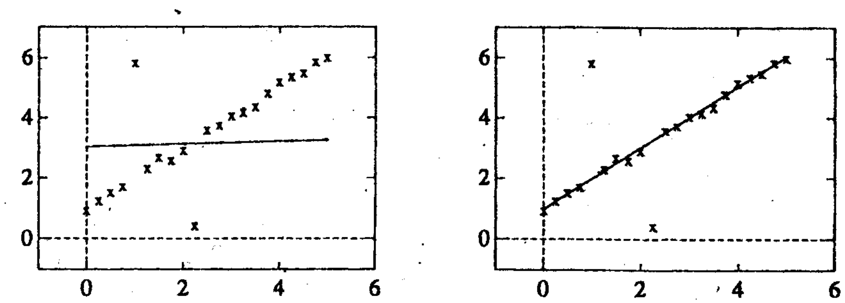

Abbildung 7.3: Approximation bzgl. anderer Normen

Für die links in Abbildung 7.2 dargestellten Daten hat die mit dieser Methode bestimmte sogenannte **Ausgleichsgerade** die rechts skizzierte Gestalt.

Es spricht natürlich prinzipiell nichts dagegen, zur Messung der Größe des Defektes $d(\alpha, \beta)$ eine andere Norm heranzuziehen. Allerdings ergeben sich abhängig von den durch die Norm spezifizierten Anforderungen an den Defekt bei verschiedenen Normen i.a. auch verschiedene Geraden:

So wird bei Verwendung der $\|\cdot\|_\infty$-Norm gefordert, daß das Betragsmaximum der Einzelfehler $\varepsilon_i = \alpha + \beta T_i - h_i$ minimal werde (vgl. Abbildung 7.3 links) und mit der $\|\cdot\|_1$-Norm minimiert man die Betragssumme $\sum_{i=1}^{m} |\alpha + \beta T_i - h_i|$ der Fehler (vgl. Abbildung 7.3 rechts). In vielen Anwendungsbereichen ist es sogar sinnvoll, den Gesamtfehler in einer dem Problem angepaßten Norm zu minimieren, in deren Definition dann Problemdaten selbst eingehen.

Wir werden in diesem Abschnitt durchweg die Euklidische Norm verwenden. Dafür spricht (neben einer in dieser Vorlesung nicht darlegbaren wahrscheinlichkeitstheoretischen Untermauerung dieser Wahl) vor allem eines: Die Theorie wird für die Euklidische Norm besonders einfach und läßt sich vollständig mit den Mitteln der linearen Algebra darlegen.

Bemerkung 7.1. Die Maximum-Norm verwendet man dann, wenn es wichtig ist, jeden einzelnen der ermittelten Datenpunkte durch die gewählte Gerade möglichst gut anzunähern. Das ist bei der Verwendung der Euklidischen Norm nicht der Fall. Durch die dort angestrebte Minimierung der Quadratsumme aller Fehler kann