Angewandte lineare Algebra und Ausgleichsrechnung

Prof. Dr. Andreas Meisel

Zum Inhalt

- Problemstellung
- Lösungsverfahren
- Gaußelimination
- Rechnen mit begrenzter Stellenzahl
- Lösen überbestimmter Gleichungssysteme
- Ausgleichsrechnung

1. Einführung

1.1 Aufgabenstellung

Ein wichtiges Problemfeld der Ingenieurmathematik ist die Lösung *linearer Gleichungssysteme.*

Dabei geht es darum, die m unbekannten Größen $x_1, x_2, \ldots\ldots, x_m$ aus einem System von m linearen Gleichungen zu bestimmen.

Die Größen a_{ik} und b_i sind dabei bekannt.

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 &+ a_{12}x_2 + \ldots\ldots\ldots + a_{1m}x_m = b_1 \\ a_{21}x_1 &+ a_{22}x_2 + \ldots\ldots\ldots + a_{2m}x_m = b_2 \\ \ldots \\ a_{m1}x_1 &+ a_{m2}x_2 + \ldots\ldots\ldots + a_{mm}x_m = b_m \end{aligned} \qquad (1)$$

Beispiel:

$$\begin{aligned} +5x_1 + 2x_2 + 7x_3 &= -9 \\ -2x_1 + 6x_2 - 2x_3 &= 0 \\ -9x_1 - 2x_2 - 5x_3 &= +7 \end{aligned}$$

1.2 Matrixschreibweise

In Matrixschreibweise hat (1) die Form:

$$\underline{A} \cdot \vec{x} = \vec{b} \qquad (2)$$

mit der *Koeffizientenmatrix*

$$\underline{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2m} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nm} \end{pmatrix}$$

dem *Lösungsvektor*

$$\vec{b} = (b_1, b_2, \dots\dots, b_m)^T$$

dem *Unbekanntenvektor*

$$\vec{x} = (x_1, x_2, \dots\dots, x_m)^T$$

Beispiel:

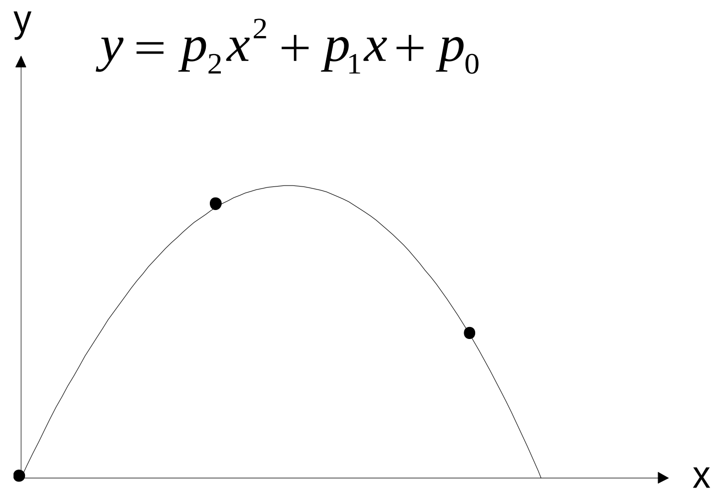
$$\begin{aligned} +5x_1 + 2x_2 + 7x_3 &= -9 \\ -2x_1 + 6x_2 - 2x_3 &= 0 \\ -9x_1 - 2x_2 - 5x_3 &= +7 \end{aligned}$$

$$\begin{bmatrix} +5 & +2 & +7 \\ -2 & +6 & -2 \\ -9 & -2 & -5 \end{bmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -9 \\ 0 \\ +7 \end{pmatrix}$$

ÜBUNG: Berechnung eines Polynoms aus Meßwerten

Aufgabenstellung: Von einem physikalischen Prozess sei bekannt, daß er parabelförmig verläuft (z.B. Wurfparabel).

$$y = p_2 x^2 + p_1 x + p_0$$



An drei Punkten werden die Koordinaten (x,y) bestimmt:

$(x_1,y_1) = (0,0)$
$(x_2,y_2) = (2,6)$
$(x_3,y_3) = (5,3)$

Stellen Sie das lin. Gleichungssystem auf, dessen Lösung die <u>unbekannten Parameter</u> p_0, p_1, p_2 liefert.

2. Lösungsverfahren

2.1 Übersicht über einige Lösungsverfahren

1. ***Cramersche Regel (Determinantenverfahren)***
   - für bis zu max. 3 Unbekannte gutes manuelles Verfahren
   - für mehr als 3 Unbekannte ist es sehr uneffektiv

2. ***Gauß-Elimination*** *(Dreieckszerlegung einer Matrix)*
   - gutes manuelles Verfahren, auch für mehr als 3 Unbekannte
   - leicht implementierbar
   - auch bei begrenzter Stellenzahl (Computer !) noch brauchbar durch "*Pivotisierung*"

3. ***Householder-Transformation***
   - Verfahren zur Minimierung des Rundungsfehlereinflusses
   - auch zur Lösung überbestimmter Gleichungssysteme verwendbar
   - siehe „*Einführung in die Numerische Mathematik 1*“, J. Stoer, Springer Verlag

4. ***Singuläre-Werte-Zerlegung (SVD: Singular Value Decomposition)***
   - Verfahren für numerisch kritische Fälle, speziell für überbestimmte, schlecht konditionierte Gleichungssysteme
   - siehe *"Numerical Recipes in C", Cambridge University Press*

2.2 Gauß-Elimination

Prinzip:

Durch geeignete Vertauschungen und Linearkombinationen von Gleichungen (*Äquivalenzumformungen*) wird das Gleichungssystem schrittweise in Diagonalform (*Dreiecksgestalt*) gebracht:

$$\underline{R}\vec{x} = \vec{c}, \qquad \underline{R} = \begin{bmatrix} r_{11} & . & . & . & r_{1n} \\ & . & & & . \\ & & . & & . \\ & & & . & . \\ 0 & & & & r_{nn} \end{bmatrix}$$

$$\text{Beispiel:} \quad \begin{bmatrix} 2 & 7 & 9 \\ 0 & 3 & 1 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_0 \\ x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 131 \\ 23 \\ 22 \end{pmatrix}$$

Folgende *Äquivalenzumformungen* sind erlaubt:

- Vertauschen zweier Gleichungen
- Multiplikation einer Gleichung mit einer Zahl ungleich 0
- Add./Subt. einer Gleichg. mit dem Vielfachen einer anderen Gleichg.

Das so "*gestaffelte*" Gleichungssystem lässt sich dann leicht durch schrittweise Auflösung, beginnend bei der letzten Gleichung, auflösen (*Rückwärtseinsetzen*).

siehe *"Einführung in die numerische Mathematik I", Josef Stoer, Springer Verlag*

Beispiel

Demonstration der Wirkungsweise an einem Beispiel:

$$\begin{aligned}
&2x_1 + 2x_2 + 2x_3 = 1 \\
&3x_1 + 2x_2 + 4x_3 = 0.5 \qquad (-3/2 \bullet Gl.1 \;=\; -3x_1 - 3x_2 - 3x_3 = -1.5) \\
&1x_1 + 3x_2 + 9x_3 = 2.5 \qquad (-1/2 \bullet Gl.1 \;=\; -1x_1 - 1x_2 - 1x_3 = -0.5)
\end{aligned}$$

Subtraktion des 3/2-fachen der 1. Gleichung von der 2. Gleichung und
Subtraktion des 1/2-fachen der 1. Gleichung von der 3. Gleichung ergibt:

$$\begin{aligned}
&2x_1 + 2x_2 + 2x_3 = +1 \\
&0 \quad -1x_2 + 1x_3 = -1 \\
&0 \quad +2x_2 + 8x_3 = +2 \qquad (+2 \bullet Gl.2 \;=\; 0 \quad -2x_2 + 2x_3 = -2)
\end{aligned}$$

Addition des 2-fachen der 2. Gleichung von der 3. Gleichung ergibt:

$$\begin{aligned}
2x_1 + 2x_2 + 2x_3 &= +1 \\
-1x_2 + 1x_3 &= -1 \\
10x_3 &= +0
\end{aligned}$$

Daraus folgt durch "*Rückwärtseinsetzen*": $x_3=0$, $x_2=1$, $x_1=-0.5$

Gauß-Elimination in kürzerer Matrixschreibweise

1.

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 2 & 2 & 2 & 1 \\ 3 & 2 & 4 & 0.5 \\ 1 & 3 & 9 & 2.5 \end{array}\right] \quad \begin{array}{l} \\ -3/2 \bullet Gl.1 \quad (-3\ \ -3\ \ -3 \mid -1.5) \\ -1/2 \bullet Gl.1 \quad (-1\ \ -1\ \ -1 \mid -0.5) \end{array}$$

2.

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 2 & 2 & 2 & 1 \\ 0 & -1 & 1 & -1 \\ 0 & 2 & 8 & 2 \end{array}\right] \quad \begin{array}{l} \\ \\ +2 \bullet Gl.2 \quad (0\ \ -2\ \ 2 \mid -2) \end{array}$$

3.

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 2 & 2 & 2 & 1 \\ 0 & -1 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 10 & 0 \end{array}\right]$$

ÜBUNG: Lösen eines lin. Gleichungssystems durch Gaußelimination

Lösen Sie folgendes lin. Gleichungssystem:

$$\underline{A}\vec{x} = \vec{b}$$

$$\begin{bmatrix} 3 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 3 & 2 \\ 0 & 1 & 0 & 3 \end{bmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -3 \\ -2 \\ -1 \\ 3 \end{pmatrix}$$

2.3 Gauß-Elimination bei begrenzter Stellenzahl

<u>Beispiel</u>: Wie lautet die Lösung des folgenden Gleichungssystems bei vierstelliger (d.h. <u>vier signifikante Ziffern</u>) Rechnung?

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0.00031 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -7 \\ -3 \end{pmatrix}$$

Wie lautet die Lösung des Gleichungssystems bei Vertauschung der Zeilen (ebenfalls bei vierstelliger Rechnung)?

$$\begin{bmatrix} 0.00031 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -3 \\ -7 \end{pmatrix}$$

Welches Ergebnis ist das bessere?

Kritisch für die Rechengenauigkeit:

- Matrixelemente besitzen unterschiedliche Größenordnungen
  → Gefahr der *Auslöschung*,
- schleifende Schnitte (Zeilen sind nahezu Vielfache von anderen Zeilen),
  Fehler in den Eingangsdaten wirken sich dann besonders gravierend aus

Verbesserung der Rechengenauigkeit durch "*Spaltenpivotisierung*":

Wird mit <u>begrenzter Stellenzahl</u> gerechnet (Computer !), so ist die Rechengenauigkeit größer, wenn bei jedem Eliminationsschritt die Zeilen so getauscht werden, daß der <u>Betrag des *Pivotelements*</u> (=Diagonalelement) <u>möglichst groß</u> ist.

Gaußelimination mit Spaltenpivotisierung

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 3 & 1 & 6 & 2 \\ 2 & 1 & 3 & 7 \\ 1 & 1 & 1 & 4 \end{array}\right] \quad \begin{array}{l} \\ -2/3 \bullet Gl.1 \\ -1/3 \bullet Gl.1 \end{array}$$

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 3 & 1 & 6 & 2 \\ 0 & 1/3 & -1 & 17/3 \\ 0 & 2/3 & -1 & 10/3 \end{array}\right]$$

Vertauschung Z2 <-> Z3, um das betragsgrößte Diagonalelement als Pivotelement zu setzen

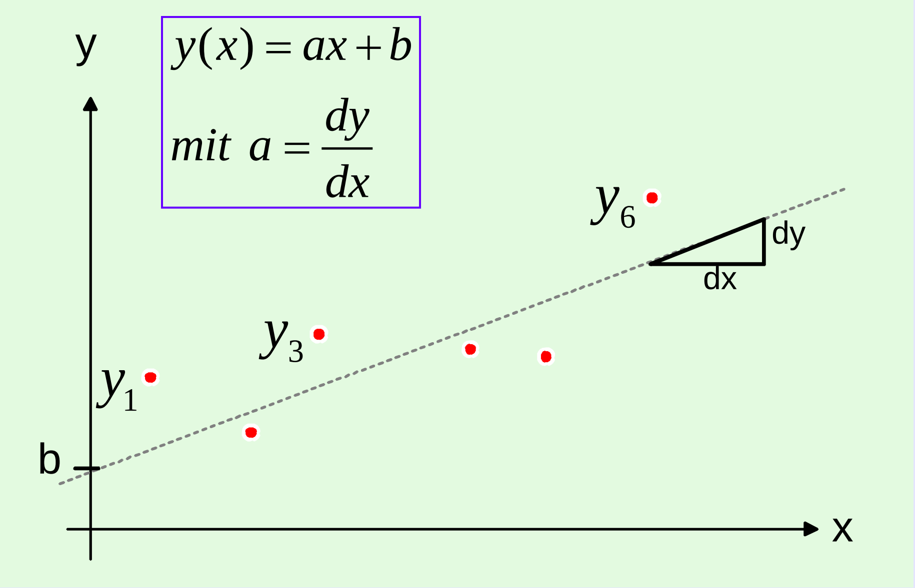
$$\left[\begin{array}{ccc|c} 3 & 1 & 6 & 2 \\ 0 & 2/3 & -1 & 10/3 \\ 0 & 1/3 & -1 & 17/3 \end{array}\right] \quad \begin{array}{l} \\ \\ -1/2 \bullet Gl.2 \end{array} \quad \Rightarrow \quad \left[\begin{array}{ccc|c} 3 & 1 & 6 & 2 \\ 0 & 2/3 & -1 & 10/3 \\ 0 & 0 & -1/2 & 4 \end{array}\right]$$

3. Ausgleichsrechnung

3.1 Aufgabenstellung und Vorüberlegungen

Gegeben sei ein Funktion $y=f(x_1,x_2,\ldots,x_k)$.
Der Funktionsverlauf werde durch die Parameter (ξ_1, ξ_2, ξ_3, ... , ξ_m) festgelegt.

Die m Parameter der Funktion sind unbekannt und sollen bestimmt werden.
Es stehen mindestens m Messwerte y_i (sog. *Beobachtungen* L_i) zur Verfügung.



Beispiel:

Es ist bekannt, dass das phys. Modell eine Gerade beschreibt:

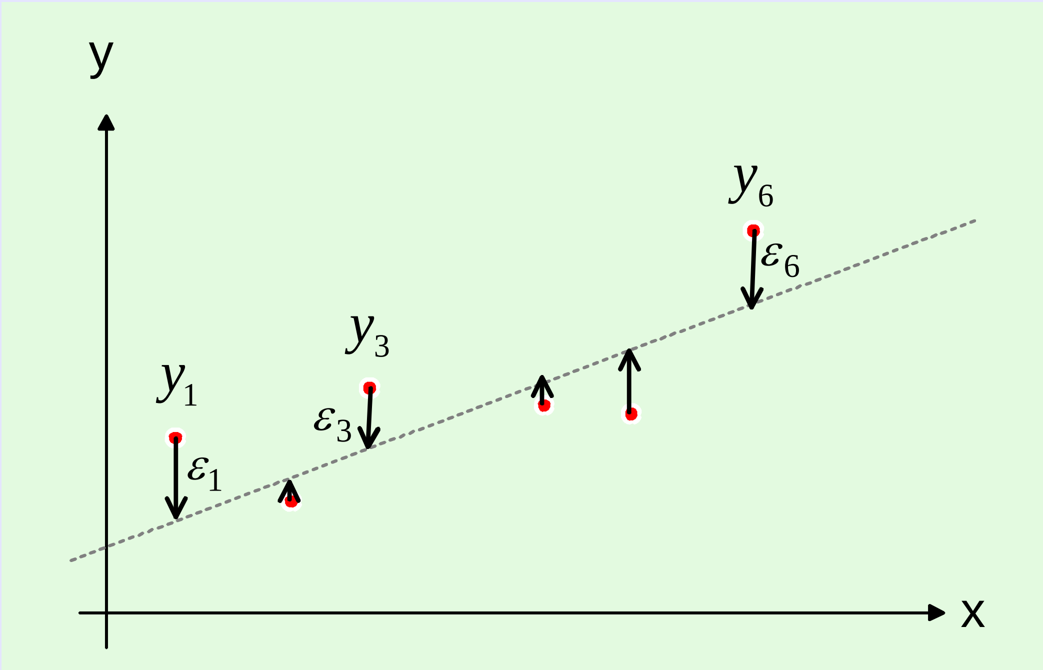
$$y(x) = ax + b$$

unbek. Parameter ξ_1, ξ_2 → a und b

Es sind n Messungen bekannt.

Beobachtungen L_i → $y_i(x_i)$

Alle Beobachtungen (Messungen) sind fehlerbehaftet.
Die Beobachtungen L_i müssen daher um die (unbek.) Werte ε_i "verbessert" werden.



Fortsetzung des Beispiels

Angenommen die Parameter a und b der Gerade wären bekannt, dann müssten die Messwerte um ε_i verbessert werden, damit sie auf der Geraden liegen.

$$y_1 + \varepsilon_1 = a x_1 + b$$

$$y_2 + \varepsilon_2 = a x_2 + b$$

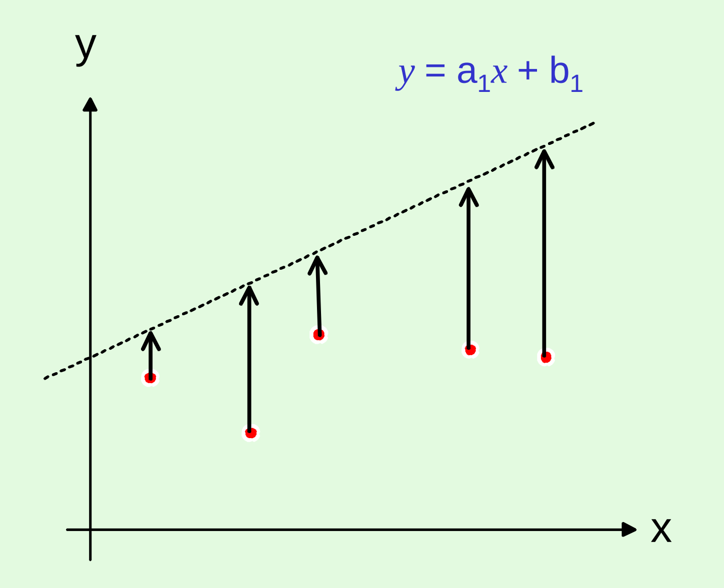
....

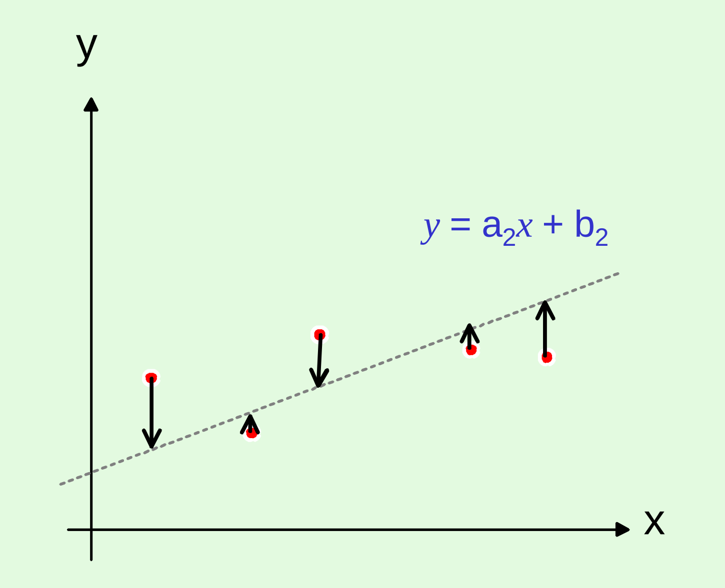
Dieser Sachverhalt wird beschrieben durch die sog. *Fehlergleichungen*:

$$L_i + \varepsilon_i = f_i(\xi_1, \xi_2, \xi_3, ..., \xi_m) \qquad mit \;\; i = 1,2,3,....,n \qquad (1)$$

Welche Parameter (ξ_1, ξ_2, ξ_3, ... , ξ_m) sind also die bestmögliche Lösung ?

Fortsetzung des Beispiels Welche der beiden Geraden ist die bessere Lösung ?





Es geht also darum die unbekannten Parameter (ξ_1, ξ_2, ξ_3, ... , ξ_m) so zu bestimmen, dass die Verbesserungen ε_i der Beobachtungen L_i minimal werden.

Realisierung dieser Idee:

Um in einem Gleichungssystem

$$L_i + \varepsilon_i = f_i(\xi_1, \xi_2, \xi_3, \ldots, \xi_m) \qquad mit \;\; i = 1,2,3,\ldots,n$$

die unbekannten Parameter ξ_1 **.... ,** ξ_m bestimmen zu können, muss gelten: $n \geq m$

Bei überbestimmten Gleichungssystemen gibt es i.Allg. keine Lösung, die alle Gleichungen erfüllt.

Einf. Beispiel: 2x = 10
2x = 12

Es ist offensichtlich, dass kein x beide Gleichungen gleichzeitig erfüllen kann.

Wenn das Problem also schon nicht exakt gelöst werden kann, dann soll die Lösung doch wenigstens "möglichst gut" sein.

Eine gängige Definition für "möglichst gut" ist folgender Ausdruck (C. F. Gauss):

$$\sum_{i=1}^{n} \varepsilon_i^{\,2} = \sum_{i=1}^{n} \left[f_i(\xi_1, \xi_2, \xi_3, \ldots, \xi_m) - L_i \right]^2 \;\rightarrow\; Minimum \qquad (2)$$

Beispiel 1: Würfelbeispiel (1 Unbekannte)

Gegeben ist ein Würfel. Die Seitenlänge a ist unbekannt und soll bestimmt werden.

Das Volumen V des Würfels wurde 3 mal mit Hilfe eines Messbechers gemessen:

$$V_1 = 125\text{cm}^3$$
$$V_2 = 130\text{cm}^3$$
$$V_3 = 110\text{cm}^3$$

→ a — unbekannter Parameter ξ

$V=a^3$ — Funktion $f_i(\xi)$ mit unbekanntem Parameter ξ

V_i — Beobachtungen L_i

Die Fehlergleichungen lauten in diesem Fall:

$$V_1 + \varepsilon_1 = a^3$$
$$V_2 + \varepsilon_2 = a^3$$
$$V_3 + \varepsilon_3 = a^3$$

Anm.: Die ε werden nur deswegen benötigt, damit die Gleichungen sich nicht widersprechen.

Lösungsansatz (im Sinne der Ausgleichsrechnung)**:**

1. Fehlerquadratformel aufstellen:

$$(\varepsilon_1)^2 + (\varepsilon_2)^2 + (\varepsilon_3)^2$$

$$= (a^3 - V_1)^2 + (a^3 - V_2)^2 + (a^3 - V_3)^2$$

→ a muss so bestimmt werden, dass dieser Ausdruck minimal wird

2. Man erhält das Minimum <u>durch Ableiten</u> (nach der Unbekannten a) und <u>Nullsetzen</u>:

$$\frac{d}{da}\left[(a^3 - V_1)^2 + (a^3 - V_2)^2 + (a^3 - V_3)^2\right]$$

$$= 6a^2 \cdot (a^3 - V_1) + 6a^2 \cdot (a^3 - V_2) + 6a^2 \cdot (a^3 - V_3) = 0$$

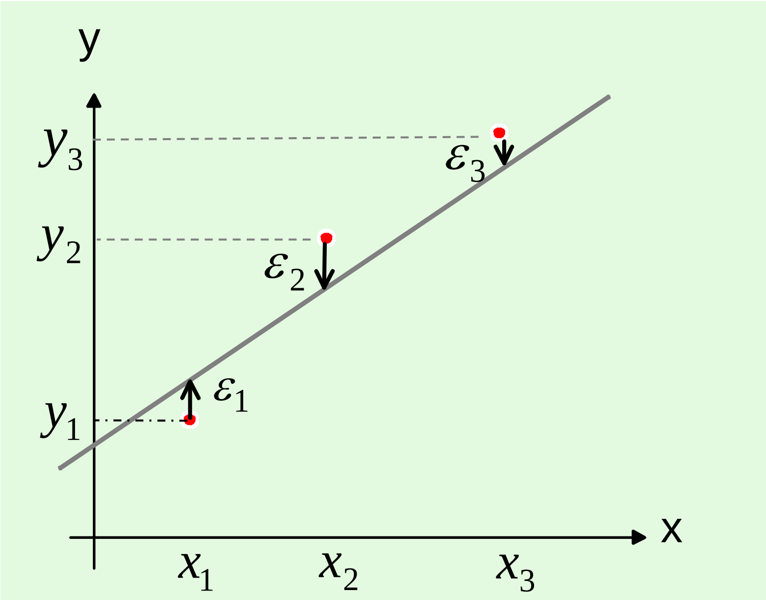
→ $$a = \sqrt[3]{\frac{V_1 + V_2 + V_3}{3}}$$

Beispiel 2: Geradenbeispiel (2 Unbekannte)

Bekannt ist, daß das phys. Modell eines Prozeses durch eine Gerade *y=ax+b* beschrieben wird. Gemessen wurden folgende Werte:

$x_1 = 2 \rightarrow y_1 = 4$
$x_2 = 5 \rightarrow y_2 = 11$
$x_3 = 8 \rightarrow y_3 = 15$

→ a, b unbekannte Parameter ξ_1 …..
y=ax+b Funktion $f_i\,(\xi_1\ \ldots..)$ mit unbekannten Parametern ξ_1 …..
y_i Beobachtungen L_i



Die Fehlergleichungen lauten in diesem Fall:

$$y_1 + \varepsilon_1 = ax_1 + b$$
$$y_2 + \varepsilon_2 = ax_2 + b$$
$$y_3 + \varepsilon_3 = ax_3 + b$$

Lösungsansatz (im Sinne der Ausgleichsrechnung)**:**

1. Fehlerquadratformel aufstellen:

$$(\varepsilon_1)^2 + (\varepsilon_2)^2 + (\varepsilon_3)^2$$

$$= (ax_1 + b - y_1)^2 + (ax_2 + b - y_2)^2 + (ax_3 + b - y_3)^2$$ → soll minimal werden

2. Ableitungen nach a und b berechnen:

$$\frac{\partial}{\partial a}\left(\varepsilon_1^2+\varepsilon_2^2+\varepsilon_3^2\right)=x_1\cdot 2\cdot(ax_1+b-y_1)+x_2\cdot 2\cdot(ax_2+b-y_2)+x_3\cdot 2\cdot(ax_3+b-y_3)$$

$$\frac{\partial}{\partial b}\left(\varepsilon_1^2+\varepsilon_2^2+\varepsilon_3^2\right)=2\cdot(ax_1+b-y_1)+2\cdot(ax_2+b-y_2)+2\cdot(ax_3+b-y_3)$$

3. Ableitungen zu Null setzen:

$$\cancel{2}\cdot(ax_1^2+bx_1-y_1x_1)+\cancel{2}\cdot(ax_2^2+bx_2-y_2x_2)+\cancel{2}\cdot(ax_3^2+bx_3-y_3x_3)=0$$

$$\cancel{2}\cdot(ax_1+b-y_1)+\cancel{2}\cdot(ax_2+b-y_2)+\cancel{2}\cdot(ax_3+b-y_3)=0$$

4. Durch Umstellen der Gleichungen erhält man:

$$\left(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2\right) \cdot a + \left(x_1 + x_2 + x_3\right) \cdot b = x_1 y_1 + x_2 y_2 + x_3 y_3$$

$$\left(x_1 + x_2 + x_3\right) \cdot a + (1+1+1) \cdot b = y_1 + y_2 + y_3$$

→ 2 Gleichungen mit 2 Unbekannten (leicht auflösbar)

3.2 Allg. Lösung des Ausgleichsproblems im linearen Fall

3.2.1 Beschreibung und Aufstellen der Fehlergleichungen

Ein linearen Ausgleichsproblems liegt vor, wenn die Fehlergleichungen sich auf die folgende Form bringen lassen:

$$\underbrace{\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & ..... & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & ..... & a_{2m} \\ \dots & \dots & ..... & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & ..... & a_{nm} \end{bmatrix}}_{\text{bekannt}} \cdot \underbrace{\begin{pmatrix} \xi_1 \\ \dots \\ \xi_m \end{pmatrix}}_{\text{zu berechnen}} = \underbrace{\begin{pmatrix} L_1 \\ L_2 \\ \dots \\ L_n \end{pmatrix}}_{\text{bekannt}} + \underbrace{\begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \dots \\ \varepsilon_n \end{pmatrix}}_{\text{zu minimieren}} \qquad n \geq m \qquad (3) \qquad \boxed{\underline{A} \cdot \vec{\xi} = \vec{L} + \vec{\varepsilon}}$$

Beispiel: Gesucht sind die Parameter *a* und *b* der Geradengleichung *y=ax+b*. Gegeben sind 3 Messpunkte (2, 4), (5, 11), (8, 15).

Einsetzen der Messpunkte in die Geradengleichung führt auf das Gleichungssystem:

$$\begin{aligned} 4 + \varepsilon_1 &= 2a + b \\ 11 + \varepsilon_2 &= 5a + b \\ 15 + \varepsilon_3 &= 8a + b \end{aligned}$$

bzw.

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 5 & 1 \\ 8 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 \\ 11 \\ 15 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \end{pmatrix}$$

3.2.2 Lösung

Die Anwendung des Gauss'schen Ansatzes (Gl. 2) auf (Gl. 3) führt zu der folgenden allgemeinen Lösung (o.Bew. *1)

$$\boxed{\underline{A}^T \underline{A} \cdot \vec{\xi} = \underline{A}^T \cdot \vec{L}} \qquad (4)$$

Gl. (4) liefert die bestmögliche Lösung im Sinne von (2). ➔ Fehlerminimierung

Beispiel: Fortsetzung "Geradenbeispiel"

$$\underline{A}^T \underline{A} = \begin{bmatrix} 2 & 5 & 8 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 5 & 1 \\ 8 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 93 & 15 \\ 15 & 3 \end{bmatrix}$$

$$\underline{A}^T \vec{L} = \begin{bmatrix} 2 & 5 & 8 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 4 \\ 11 \\ 15 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 183 \\ 30 \end{bmatrix}$$

aus (4) →

$$\begin{bmatrix} 93 & 15 \\ 15 & 3 \end{bmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} 183 \\ 30 \end{bmatrix}$$

auflösen →

$$a = 1.833 \qquad b = 0.833$$

*1 s. Einführung in die Numerische Mathematik I, Josef Stoer, Springer Verlag):

ÜBUNG: Berechnung einer Ausgleichsgerade

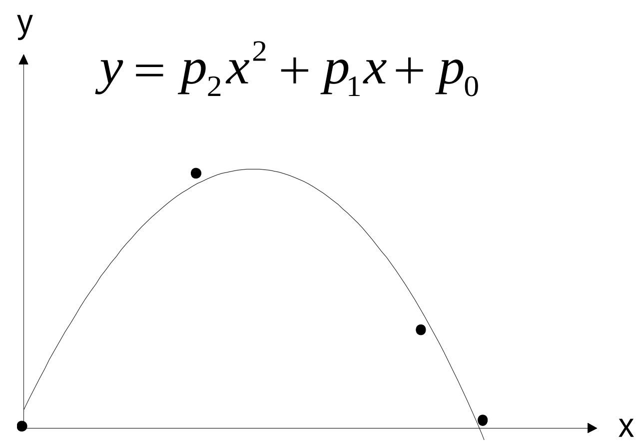
Es ist zu zeigen, dass der allg. Lösungsansatz

$$\underline{A}^T \underline{A} \cdot \vec{\xi} = \underline{A}^T \cdot \vec{L}$$

für die Ausgleichsgerade das gleiche Ergebnis liefert wie der Lösungsweg in Beispiel 2.

ÜBUNG: Berechnung eines Polynoms aus Meßwerten

Aufgabenstellung: Von einem physikalischen Prozess sei bekannt, daß er parabelförmig verläuft (z.B. Wurfparabel).



An vier Punkten werden die Koordinaten (x,y) bestimmt:

$(x_1,y_1) = (0,0)$
$(x_2,y_2) = (2,6)$
$(x_3,y_3) = (5,3)$
$(x_4,y_4) = (6,0)$

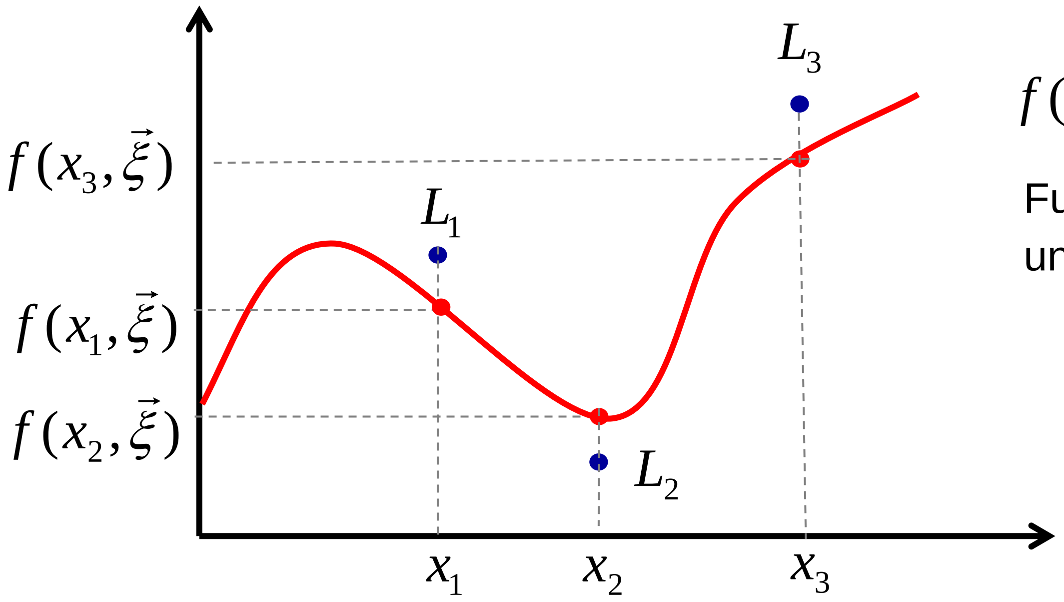
Bestimmen Sie p_0, p_1, p_2 und geben Sie die Restfehler an.

3.3 Lösung des Ausgleichsproblems im nichtlinearen Fall

3.3.1 Beschreibung

Es sind n Beobachtungen $(\vec{x}_i, L_i)$ $(i=1,2,..n)$ und ein math. Modell f gegeben.

Dessen konkreter Verlauf wird festgelegt durch die m zu bestimmenden und nichtlinear miteinander verknüpften Parameter $\vec{\zeta} = (\xi_1, \xi_2, \xi_3, ... , \xi_m)$.



$f(x, \vec{\xi})$

Funktion mit der Variablen x und den Parametern $\vec{\zeta}$.

Allgemein lässt sich das Problem so beschreiben:

$$L_i + \varepsilon_i = f(\vec{x}_i, \vec{\xi}) \qquad mit \;\; i = 1,2,3,....,n$$

Daraus ergeben sich n nichtlineare Funktionen bezüglich der Parameter (ξ_1, ξ_2, ... , ξ_m).

Eine Umformung zu einem linearen Gleichungssystem ist hier nicht möglich !

Beispiel: Es ist bekannt, dass ein physikalischer Prozess eine Kreisbahn beschreibt. Die Parameter x_m, y_m und r sind jedoch unbekannt:

$$r^2 = (x - x_m)^2 + (y - y_m)^2 \qquad \text{mit} \quad r \;:\; \text{Radius der Kreisbahn}$$
$$x_m, y_m \;:\; \text{Kreismittelpunkt}$$

Es liegen die gemessenen Koordinaten mehrerer Bahnpunkte vor:

$(x_1,y_1) = (10, 0)$, $(x_2,y_2) = (5, 4)$, $(x_3,y_3) = (0, 0)$, $(x_4,y_4) = (5, -4)$

ÜBUNG: Welche Funktionsparameter (a,b,c...) lassen sich linear bestimmen ?

a) $$y = a \cdot x^4 + b \cdot \sin(\tfrac{\pi}{2} \cdot x^3) + c$$

b) $$y = a \cdot x^b + 2 \cdot \sin(cx) + 1$$

c) $$y = \frac{ax^2 + bx + c}{dx^2 + ex + 1}$$

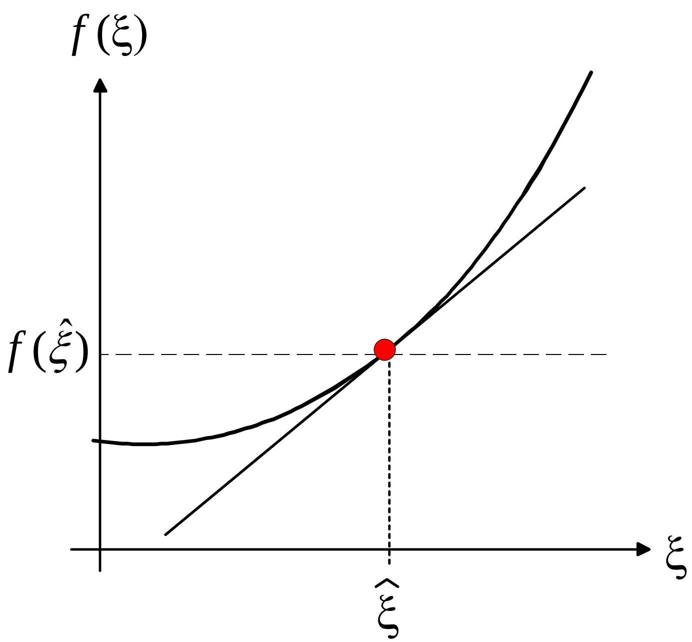
d) $$y = \frac{ax + b}{cx + d} + f$$

3.2.2 Lösungsansatz: Linearisierung der nichtlinearen Funktion

Gegeben: - nichtlineare Funktion
- ein bekannter Funktionswert $f(\hat{\zeta})$ bei $\hat{\zeta}$ (Punkt auf dem Funktionsverlauf).

Gesucht: - eine <u>lineare Ersatzfunktion</u> (Gerade), die sich in der Nähe des bekannten Punktes näherungsweise wie die nichtlineare Funktion f verhält.

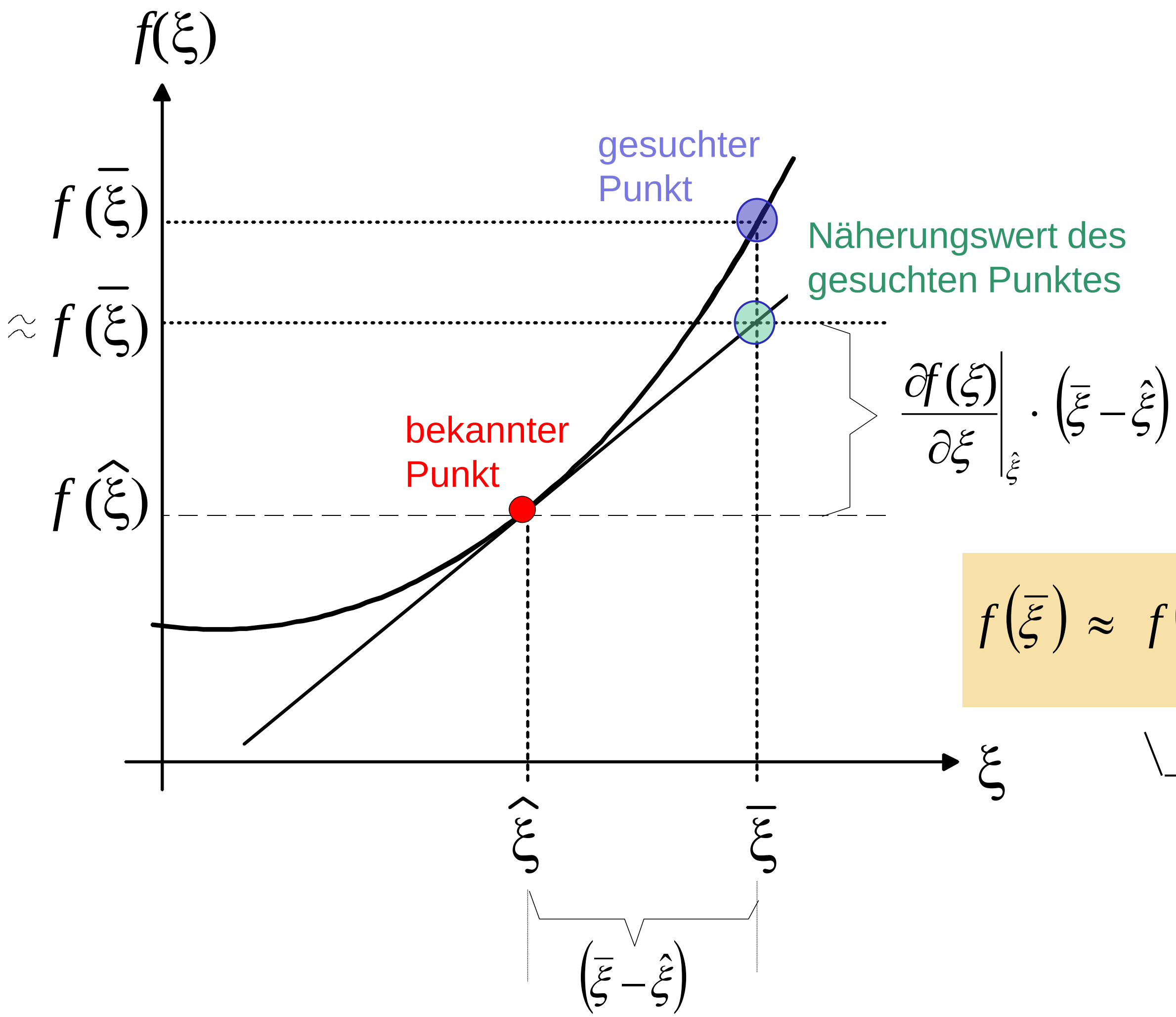
→ Linearisierung um einen Punkt der Funktion



Worin liegt der Gewinn?

1. Möglichkeit, eine (kompliziertere) <u>nichtlineare Funktion</u> näherungsweise <u>durch</u> eine (viel einfachere) <u>lineare Funktion</u> (Gerade) <u>ersetzen</u> zu können (zumindest in der Nähe eines bekannten Funktionswertes).
2. Möglichkeit zur <u>vereinfachten</u> (näherungsweisen) <u>Berechnung</u> eines <u>Funktionswertes</u> in der Nähe eines bekannten Funktionswertes.

Herleitung: Linearisierung einer Funktion f(ξ) um einen Punkt $[\ \xi,\ f(\xi)\ ]$



$$\underbrace{f\left(\bar{\xi}\right) \approx f\left(\hat{\xi}\right) + \left.\frac{\partial f(\xi)}{\partial \xi}\right|_{\hat{\xi}} \cdot \left(\bar{\xi} - \hat{\xi}\right)}_{\text{Näherungsgerade}}$$

ÜBUNG: Linearisierung einer Parabel um einen vorgegebenen Punkt

Gegeben ist die Parabel $f(x) = x^2 - 2x + 1$

Linearisieren Sie die Funktion um den Punkt $\hat{x} = 2,\ f(\hat{x}) = 1$.

Wie lautet die Linearisierungsgerade?

Wie groß ist der Fehler der Linearisierung bei $\hat{x} = 2.1$?

3.2.3 Linearisierung von Funktionen mit mehreren Variablen

Auch Funktionen mit mehreren Variablen können um einen Punkt linearisiert werden.

So erhält man den Funktionswert $f(\bar{\xi}_1, \bar{\xi}_2, \bar{\xi}_3, \ldots, \bar{\xi}_m)$ in der Nähe

des gegebenen Funktionswertes $f(\hat{\xi}_1, \hat{\xi}_2, \hat{\xi}_3, \ldots, \hat{\xi}_m)$ näherungsweise mit

$$f(\bar{\xi}_1, \bar{\xi}_2, \bar{\xi}_3, \ldots, \bar{\xi}_m) = f(\hat{\xi}_1, \hat{\xi}_2, \hat{\xi}_3, \ldots, \hat{\xi}_m) + \left.\frac{\partial f(\xi)}{\partial \xi_1}\right|_{\hat{\xi}} \cdot \left(\bar{\xi}_1 - \hat{\xi}_1\right) + \left.\frac{\partial f(\xi)}{\partial \xi_2}\right|_{\hat{\xi}} \cdot \left(\bar{\xi}_2 - \hat{\xi}_2\right) + \ldots\ldots$$

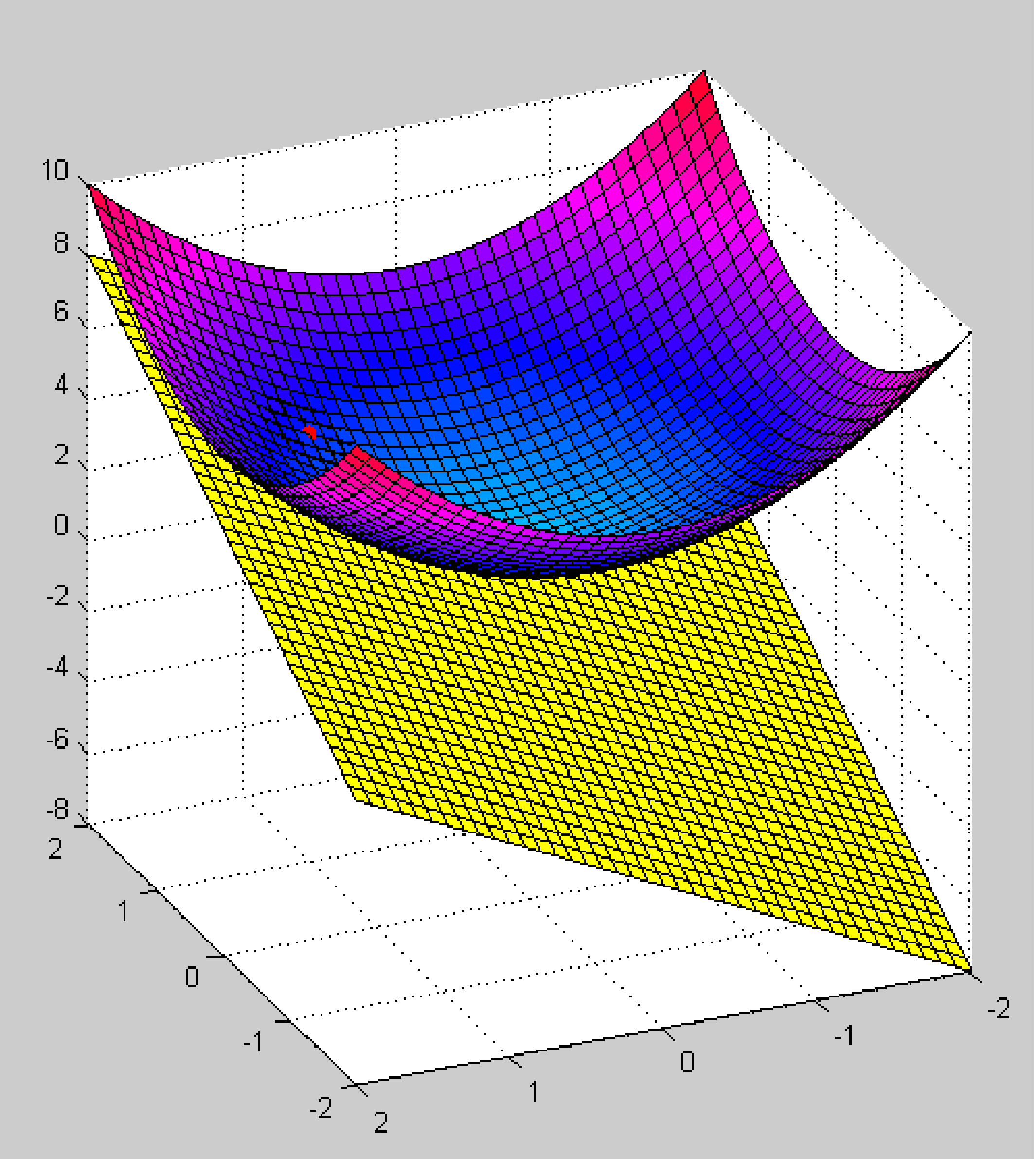
Beispiel: Linearisierung einer Funktion mit 2 Variablen

$$f(x,y) = x^2 + y^2 + 2$$

bei x=1, y=1

Linearisierte Funktion :

$$e(x,y) = 2x + 2y$$



3.2.4 Anwendung auf nichtlineare Ausgleichsprobleme

Das nichtlineare Gleichungssystem

$$L_i + \varepsilon_i = f(\vec{x}_i,\ \vec{\xi}) \qquad mit\ \ i = 1,2,3,\ldots,n$$

wird um einen Schätzwert der Parameter linearisiert :

$$\begin{aligned} L_i + \varepsilon_i \quad = \quad & f(\vec{x}_i,\ \hat{\xi}_1, \hat{\xi}_2, \hat{\xi}_3, \ldots, \hat{\xi}_m) \ + \\ & + \left.\frac{\partial f(\vec{x}_i, \vec{\xi})}{\partial \xi_1}\right|_{\hat{\xi}} \cdot \left(\bar{\xi}_1 - \hat{\xi}_1\right) \ + \ \left.\frac{\partial f(\vec{x}_i, \vec{\xi})}{\partial \xi_2}\right|_{\hat{\xi}} \cdot \left(\bar{\xi}_2 - \hat{\xi}_2\right) + \ldots\ldots \end{aligned}$$

$\hat{\xi}_i$ Schätzwerte der gesuchten Parameter (gegeben)

$\bar{\xi}_i$ verbesserte Parameter (gesucht) oder in Matrixform und mit den Abkürzungen

$$\Delta\xi_i = \bar{\xi}_i - \hat{\xi}_i$$

die sog. „*verkürzten Unbekannten*“

$$f(\vec{x}_i, \vec{\xi}) = f_i$$

lineares Gleichungssystem !!!

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial \xi_1} & \frac{\partial f_1}{\partial \xi_2} & \cdots\cdots & \frac{\partial f_1}{\partial \xi_m} \\ \frac{\partial f_2}{\partial \xi_1} & \frac{\partial f_2}{\partial \xi_2} & \cdots\cdots & \frac{\partial f_2}{\partial \xi_m} \\ \cdots & \cdots & \cdots\cdots & \cdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial \xi_1} & \frac{\partial f_n}{\partial \xi_2} & \cdots\cdots & \frac{\partial f_n}{\partial \xi_m} \end{bmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \Delta\xi_1 \\ \cdots \\ \Delta\xi_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L_1 - f(\vec{x}_1, \hat{\xi}_1, \ldots \hat{\xi}_m) \\ L_2 - f(\vec{x}_2, \hat{\xi}_1, \ldots \hat{\xi}_m) \\ \cdots \\ L_n - f(\vec{x}_n, \hat{\xi}_1, \ldots \hat{\xi}_m) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \cdots \\ \varepsilon_n \end{pmatrix}$$

Jacobi-Matrix $\underline{\boldsymbol{J}}$

Unbekannten-vektor

Lösungsvektor $\vec{l}$

3.2.5 Lösungsalgorithmus

while $\Delta\xi >$ *Fehlerschranke*

Die Jacobimatrix $\boldsymbol{J}$ und den Lösungsvektor $\vec{l}$
mit den Schätzwerten $\left(\hat{\xi}_1, \hat{\xi}_2, \hat{\xi}_3, \ldots\ldots, \hat{\xi}_m\right)$ aktualisieren.

Die "*verkürzten Unbekannten*" $\Delta\vec{\xi}$ mit dem linearisierten Glchgs.-Syst. berechnen.

Mit den "*verkürzten Unbekannten*" und dem letzten Schätzwert die „*verbesserten Unbekannten*“ berechnen:

$$\bar{\xi}_i = \hat{\xi}_i + \Delta\xi_i \qquad \mathrm{i} = 1,2,\ldots\ldots \mathrm{n}$$

Die"verbesserten Unbekannten" als neuen Schätzwert nehmen.

endwhile

ÜBUNG: Nichtlineare Ausgleichung

Gegeben ist die Funktion $f(x) = a \cdot e^{-bx}$

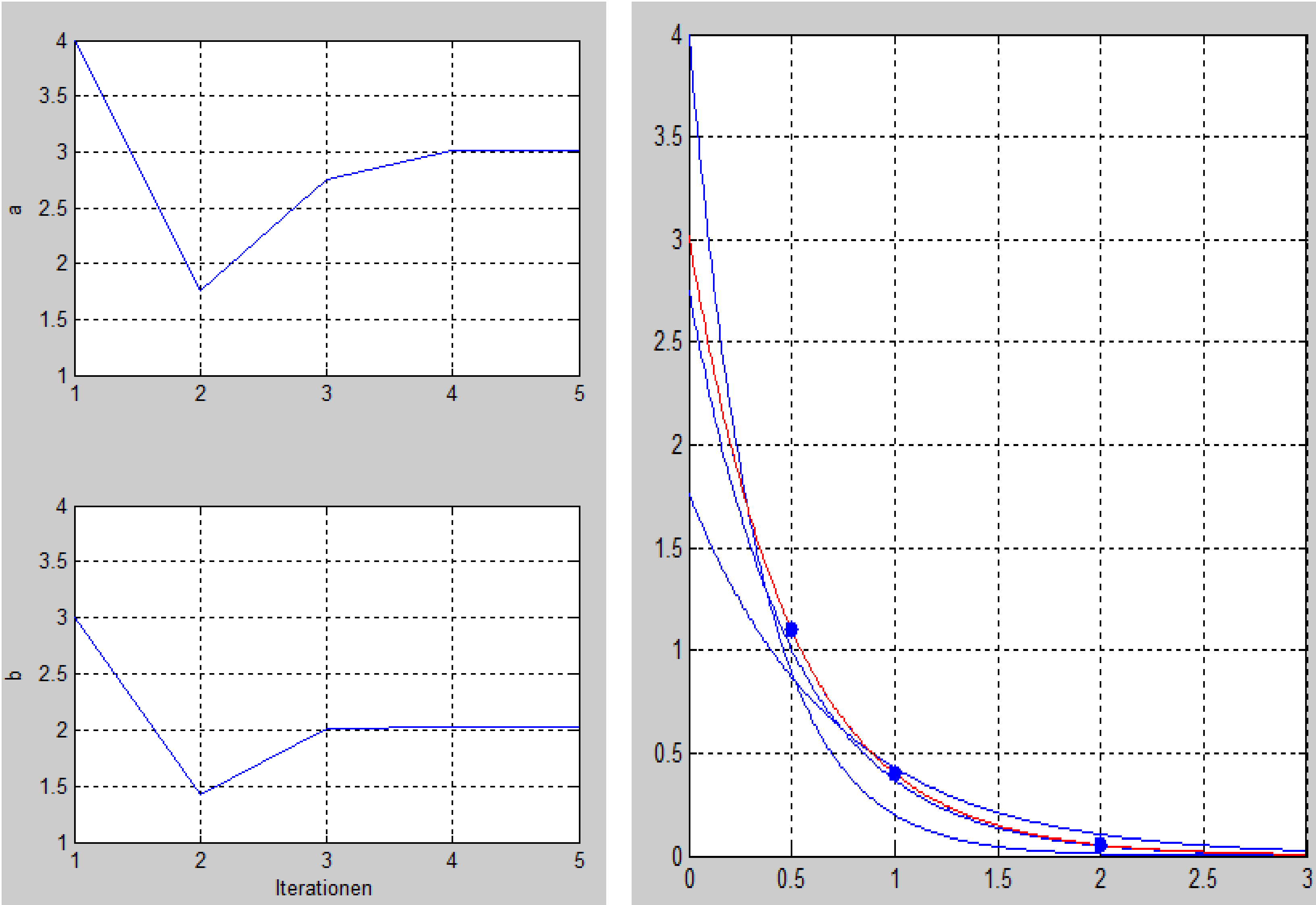
Weiter sind folgende Messwerte gegeben: (0.5, 1.1), (1.0, 0.4), (2.0, 0.055)

Die initialen Schätzwerte der Parameter sind: $a_0 = 4$, $b_0=3$
Die Parameter a und b sind durch Ausgleichung zu verbessern.

```
% Iterieren bis Fehlergrenze unterschritten
while norm(DeltaXi) > 1e-4

    % aktuelle Jacobimatrix J berechnen
    J = [ exp(-b*x1),  -a*x1*exp(-b*x1); ...
          exp(-b*x2),  -a*x2*exp(-b*x2); ...
          exp(-b*x3),  -a*x3*exp(-b*x3); ];

    % aktuellen Lösungsvektor l berechnen
    l = [ y1 - a*exp(-b*x1) ; ...
          y2 - a*exp(-b*x2) ; ...
          y3 - a*exp(-b*x3) ];

    % Lösen des Gleichungssystems
    DeltaXi = linsolve(J, l);

    % Aktualisierung der Parameter a und b
    a = a + DeltaXi(1);
    b = b + DeltaXi(2);

end
```

Fortsetzung ... : Entwicklung von $\underline{J}$, $\vec{l}$ und $\Delta\vec{\zeta}$ über mehrere Iterationen

```
J =                         l =                 DeltaXi =
    0.2231   -0.4463            0.2075             -2.2361
    0.0498   -0.1991            0.2009             -1.5820
    0.0025   -0.0198            0.0451          DeltaXi =
J =                         l =                     0.9883
    0.4921   -0.4340            0.2319              0.5955
    0.2422   -0.4272           -0.0272          DeltaXi =
    0.0587   -0.2069           -0.0485              0.2664
J =                         l =                     0.0064
    0.3654   -0.5028            0.0943          DeltaXi =
    0.1335   -0.3675            0.0325            1.0e-003 *
    0.0178   -0.0981            0.0059              0.0674
J =                         l =                    -0.5129
    0.3643   -0.5498            0.0005          DeltaXi =
    0.1327   -0.4005           -0.0005            1.0e-005 *
    0.0176   -0.1063            0.0019             -0.2801
J =                         l =                    -0.1560
    0.3643   -0.5499            0.0002
    0.1327   -0.4007           -0.0007
    0.0176   -0.1064            0.0018
```


a
b
Iterationen

Fortsetzung des Beispiels: Berechnung der Kreisbahn

Die nichtlinearen Fehlergleichungen lauten:

$$L_i + \varepsilon_i \;=\; r^2 - (x_i - x_m)^2 - (y_i - y_m)^2 \qquad mit \;\; i = 1,2,3,\ldots,n$$

Mit den Ableitungen

$$\frac{\partial f_i}{\partial x_m} \;=\; 2\cdot(x_i - x_m) \qquad \frac{\partial f_i}{\partial y_m} \;=\; 2\cdot(y_i - y_m) \qquad \frac{\partial f_i}{\partial r} \;=\; 2\cdot r$$

den Messwerten (s.o.)

und den Startwerten

x_m = 5.0

y_m = 5.0

r = 10

erhält man die Jacobimatrix A :

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_m} & \frac{\partial f_1}{\partial y_m} & \frac{\partial f_1}{\partial r} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_m} & \frac{\partial f_2}{\partial y_m} & \frac{\partial f_2}{\partial r} \\ \frac{\partial f_3}{\partial x_m} & \frac{\partial f_3}{\partial y_m} & \frac{\partial f_3}{\partial r} \\ \frac{\partial f_4}{\partial x_m} & \frac{\partial f_4}{\partial y_m} & \frac{\partial f_4}{\partial r} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} +10 & -10 & 20 \\ 0 & -2 & 20 \\ -10 & -10 & 20 \\ 0 & -18 & 20 \end{bmatrix}$$

und der Lösungsvektor :

$$l_i = L_i - f_i(\hat{\xi}_1, \hat{\xi}_2, \hat{\xi}_3, \ldots, \hat{\xi}_m)$$

$$\begin{bmatrix} l_1 \\ l_2 \\ l_3 \\ l_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 - \left(r^2 - (x_1 - x_m)^2 - (y_1 - y_m)^2\right) \\ 0 - \left(r^2 - (x_2 - x_m)^2 - (y_2 - y_m)^2\right) \\ 0 - \left(r^2 - (x_3 - x_m)^2 - (y_3 - y_m)^2\right) \\ 0 - \left(r^2 - (x_4 - x_m)^2 - (y_4 - y_m)^2\right) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -50 \\ -99 \\ -50 \\ -19 \end{bmatrix}$$

Das zu lösende Gleichungssystem lautet somit:

$$\begin{bmatrix} +10 & -10 & 20 \\ 0 & -2 & 20 \\ -10 & -10 & 20 \\ 0 & -18 & 20 \end{bmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \bar{x}_m - 5 \\ \bar{y}_m - 5 \\ \bar{r} - 10 \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} -50 \\ -99 \\ -50 \\ -19 \end{bmatrix}$$

Daraus ergibt sich die verbesserte Lösung: $\bar{x}_m = 5, \quad \bar{y}_m = 0, \quad \bar{r} = 4.775$