Über eine allgemeine Form der Ausgleichungsrechnung nach der Methode der kleinsten Quadrate

Von Helmut Wolf

In einer großen Zahl von naturwissenschaftlichen und auch technischen Disziplinen steht die Messung, die Beobachtung, am Anfang der forschenden Tätigkeit; und es gilt, theoretisch erkannte Gesetzmäßigkeiten experimentell zu bestätigen, zahlenmäßige Beiwerte möglichst genau zu ermitteln oder auch überhaupt den Nachweis funktionaler Abhängigkeit zweier oder mehrerer Größen, die aus Beobachtungen gewonnen wurden, sicherzustellen und zu diskutieren.

So mißt man z. B. bei verschiedenen Temperaturen die Länge eines Metallstabes und erhält sowohl den experimentellen Nachweis der bekannten linearen thermischen Ausdehnungsformel wie auch den numerischen Temperatur-Beiwert, d. h. den linearen Ausdehnungskoeffizienten, und die Stablänge für eine beliebig wählbare Bezugstemperatur. Beispiele solcher Art lassen sich in großer Anzahl häufen.

Im vorgenannten Falle nun würde es hinreichen, zur Ermittelung der erwähnten Zahlenwerte die Stablänge bei zwei verschiedenen Temperaturen zu messen. Jede weitere Messung stellt eine „überschüssige Beobachtung" dar. Infolge der unvermeidlichen Beobachtungsfehler, welche aus den Unvollkommenheiten der menschlichen Sinnesorgane und aus denen der Meßinstrumente resultieren, wird man niemals die wahren Werte der Messungsgrößen ermitteln können. Hieraus folgt, daß die abzuleitenden, gesuchten Zahlenwerte verschiedene sein werden, je nachdem, welche zwei Wertepaare aus der Gesamtheit aller Messungen ausgewählt werden. Will man das System widerspruchsfrei machen, so ist es erforderlich, für alle beobachteten Größen Verbesserungswerte zu bestimmen. Nach dem Vorgang von C. F. *Gauss* ist deren Berechnung so vorzunehmen, daß dem System aller verbesserten oder „ausgeglichenen" Größen ein Maximum an Wahrscheinlichkeit zukommt, was bekanntlich formal auf die Forderung hinausläuft, die Summe aller Verbesserungsquadrate zum Minimum zu machen. *Legendre* hat hiernach die sprachlich wenig glückliche Bezeichnung „Methode der kleinsten Quadrate" geprägt.

Die mathematischen Formen, in die man ein Ausgleichsproblem zu kleiden vermag, sind je nach den gestellten Aufgaben recht unterschiedlich. Wir wissen, daß die einfachste Ausgleichungsaufgabe in der Bestimmung des Mittelwertes für eine mehrfach gemessene Größe besteht; — eine Aufgabe, die man auch als „Ausgleichung von direkten Beobachtungen" bezeichnet. Bestehen zwischen den direkt gemessenen Größen gewisse mathematische Beziehungen, die von den ausgeglichenen Größen streng erfüllt werden müssen, wie es z. B. bei der Messung aller drei Winkel eines Dreieckes der Fall ist, so liegt eine Ausgleichungsaufgabe „nach bedingten Beobachtungen" vor. Treten dagegen die Beobachtungen in Verbindung mit gewissen, zusätzlichen Unbekannten auf, die der direkten Messung nicht zugänglich sind, so spricht man von einer „Ausgleichung nach vermittelnden Beobachtungen". Darüber hinaus bestehen noch weitere Ausgleichungsformen, die unter den Namen „Ausgleichung nach bedingten Beobachtungen mit Unbekannten" und „Ausgleichung nach vermittelnden Beobachtungen mit partiellen Bedingungsgleichungen" bekannt geworden sind.

Im folgenden soll nun gezeigt werden, daß sämtliche vorstehend aufgeführten Ausgleichungsformen lediglich Sonderfälle eines noch allgemeineren Ausgleichungsproblemes sind, das man zweckmäßig als „Ausgleichung nach bedingten Beobachtungen mit Unbekannten und mit partiellen Bedingungsgleichungen" bezeichnen würde.

Die Aufgabenstellung lautet hierbei:

Beobachtet seien

die „fehlerhaften" Messungsgrößen $l_1, l_2, \ldots, l_n$ in überschüssiger Anzahl,
die zugehörigen Gewichte seien $g_1, g_2, \ldots, g_n$
und die anzubringenden Verbesserungen $v_1, v_2, \ldots, v_n$.
Gleichzeitig seien die Unbekannten x, y, z zu ermitteln.

Gegeben seien ferner die von ausgeglichenen Größen streng zu erfüllenden Bedingungsgleichungen

$$\left.\begin{aligned} f_1\,((l_1+v_1),\,(l_2+v_2),\,\ldots,\,(l_n+v_n),\,c_1,\,x,\,y,\,z) &= 0 \\ f_2\,((l_1+v_1),\,(l_2+v_2),\,\ldots,\,(l_n+v_n),\,c_2,\,x,\,y,\,z) &= 0 \\ \text{usw.} \end{aligned}\right\} \quad (1)$$

c_1, c_2 sind gewisse, aus der Aufgabenstellung sich ergebende Konstanten.

Außerdem sollen zwischen den Unbekannten die partiellen Bedingungsgleichungen

$$\begin{aligned} \varphi_1\,(x,\,y,\,z,\,h_1) &= 0 \\ \varphi_2\,(x,\,y,\,z,\,h_2) &= 0 \end{aligned} \quad (2)$$

bestehen.

Gesucht sind die verbesserten oder ausgeglichenen Werte $l_i + v_i$, $(i = 1, 2, \ldots, n)$ und die Unbekannten x, y, z, und zwar so, daß

$$\sum_{i=1}^{n} g v^2 = \text{Min}$$

oder in der herkömmlichen, von C. F. *Gauss* stammenden Schreibweise:

$$[gvv] = \text{Min.} \quad (3)$$

Nennt man

r = die Anzahl der Bedingungsgleichungen (1),
m = die Anzahl der partiellen Bedingungsgleichungen (2),
u = die Anzahl der Unbekannten (hier $u = 3$),

so ist die Ausgleichung nur dann durchführbar, wenn

$$\left.\begin{aligned} u &> m \\ \text{und } r = n + m - u &> 0 \end{aligned}\right\} \text{ oder: } r + u = n + m > u > m$$

Wendet man auf (1) und (2) den Satz von Taylor an, und vernachlässigt man hierbei alle kleinen Größen II. und höherer Ordnung, so ergibt sich:

$$p_1 v_1 + p_2 v_2 + \ldots + p_n v_n + a_1 \bar{x} + b_1 \bar{y} + c_1 \bar{z} + w_1 = 0$$
$$q_1 v_1 + q_2 v_2 + \ldots + q_n v_n + a_2 \bar{x} + b_2 \bar{y} + c_2 \bar{z} + w_1 = 0 \tag{4}$$

usw.

sowie

$$P_1 \bar{x} + P_2 \bar{y} + P_3 \bar{z} + P_0 = 0$$
$$Q_1 \bar{x} + Q_2 \bar{y} + Q_3 \bar{z} + Q_0 = 0 \tag{5}$$

worin unter Zerlegung der Unbekannten in 2 Bestandteile, nämlich in einen rohen Näherungswert x_0, bzw. y_0, z_0, und einen durch die Ausgleichung zu bestimmenden Zuschlag $\bar{x}$, bzw. $\bar{y}$, $\bar{z}$, dergestalt daß

$$x = x_0 + \bar{x}, \quad y = y_0 + \bar{y}, \quad z = z_0 + \bar{z} \tag{6}$$

gilt:

$$p_i = \frac{\partial f_1}{\partial l_i}, \; a_1 = \frac{\partial f_1}{\partial x}, \; b_1 = \frac{\partial f_1}{\partial y}, \; c_1 = \frac{\partial f_1}{\partial z}, \; w_1 = f_1 (l_1, l_2, \ldots, l_n, c_1, x_0, y_0, z_0)$$
$$q_i = \frac{\partial f_2}{\partial l_i}, \; a_2 = \frac{\partial f_2}{\partial x}, \; b_2 = \frac{\partial f_2}{\partial y}, \; c_2 = \frac{\partial f_2}{\partial z}, \; w_2 = f_2 (l_1, l_2, \ldots, l_n, c_2, x_0, y_0, z_0) \tag{7a}$$

$$P_1 = \frac{\partial \varphi_1}{\partial x}, \; P_2 = \frac{\partial \varphi_1}{\partial y}, \; P_3 = \frac{\partial \varphi_1}{\partial z}, \; P_0 = \varphi_1 (x_0, y_0, z_0, h_1)$$
$$Q_1 = \frac{\partial \varphi_2}{\partial x}, \; Q_2 = \frac{\partial \varphi_2}{\partial y}, \; Q_3 = \frac{\partial \varphi_2}{\partial z}, \; Q_0 = \varphi_2 (x_0, y_0, z_0, h_2) \tag{7b}$$
$$(i = 1, 2, \ldots, n)$$

Der weitere Rechengang erfolgt nach dem Vorgang von *Lagrange*, nämlich des Minimumsproblemes mit Nebenbedingungen: Bezeichnet man die den Gleichungen (1) zuzuordnenden Lagrangeschen Multiplikatoren mit $-2\,k_1$, $-2\,k_2$ ..... und die der Gleichungen (2) mit $-2\,K_1$, $-2\,K_2$, (in der Ausgleichungsrechnung nennt man die Größen k bzw. K auch „Korrelaten"), so hat man zunächst die neue Funktion Ω zu bilden, nämlich:

$$\Omega = [gvv] - 2\,k_1 (p_1 v_1 + p_2 v_2 + \ldots + p_n v_n + a_1 \bar{x} + b_1 \bar{y} + c_1 \bar{z} + w_1) -$$
$$- 2\,k_2 (q_1 v_1 + q_2 v_2 + \ldots + q_n v_n + a_2 \bar{x} + b_2 \bar{y} + c_2 \bar{z} + w_2) - \ldots -$$
$$- 2\,K_1 (P_1 \bar{x} + P_2 \bar{y} + P_3 \bar{z} + P_0) - 2\,K_2 (Q_1 \bar{x} + Q_2 \bar{y} + Q_3 \bar{z} + Q_0)$$

Setzt man nun die partiellen Ableitungen von Ω nach den Größen v_i, $\bar{x}$, $\bar{y}$, $\bar{z}$ je einzeln und nacheinander gleich Null, so ergibt sich:

$$\begin{aligned} g_1 v_1 &= p_1 k_1 + q_1 k_2 + \ldots \\ g_2 v_2 &= p_2 k_2 + q_2 k_2 + \ldots \\ &\ldots\ldots\ldots\ldots \\ g_n v_n &= p_n k_1 + q_n k_2 + \ldots \end{aligned} \tag{8}$$

und

$$\begin{aligned} a_1 k_1 + a_2 k_2 + \ldots + a_n k_n + P_1 K_1 + Q_1 K_2 &= 0 \\ b_1 k_1 + b_2 k_2 + \ldots + b_n k_n + P_2 K_1 + Q_2 K_2 &= 0 \\ c_1 k_1 + c_2 k_2 + \ldots + c_n k_n + P_3 K_1 + Q_3 K_2 &= 0 \end{aligned} \tag{9}$$

Setzt man (8) in (4) ein, so wird

$$\left[\frac{pp}{g}\right] k_1 + \left[\frac{pq}{g}\right] k_2 + \ldots . + a_1 \bar{x} + b_1 \bar{y} + c_1 \bar{z} + w_1 = 0$$
$$\left[\frac{pq}{g}\right] k_1 + \left[\frac{qq}{g}\right] k_2 + \ldots . + a_2 \bar{x} + b_2 \bar{y} + c_2 \bar{z} + w_2 = 0 \qquad (10)$$

Zusammen mit (5) und (9) ergibt (10) das schematisch geschriebene System (11):

k_1	k_2	...	$\bar{x}$	$\bar{y}$	$\bar{z}$	K_1	K_2	Absolut-glied	
$\underline{\left[\frac{pp}{g}\right]}$	$\left[\frac{pq}{g}\right]$	...	a_1	b_1	c_1	.	.	w_1	$= 0$
$\left[\frac{pq}{g}\right]$	$\underline{\left[\frac{qq}{g}\right]}$		a_2	b_2	c_2	.	.	w_2	$= 0$
a_1	a_2	...	$\underline{\ .\ }$			P_1	Q_1	.	$= 0$
b_1	b_2		.	$\underline{\ .\ }$		P_2	Q_2		$= 0$
c_1	c_2		.	.	$\underline{\ .\ }$	P_3	Q_3	.	$= 0$
	.		P_1	P_2	P_3	$\underline{\ .\ }$	.	P_0	$= 0$
.	.	...	Q_1	Q_2	Q_3	.	$\underline{\ .\ }$	Q_0	$= 0$

Man erhält also ein symmetrisches „Normalgleichungssystem"; die Glieder, die in der Symmetrieachse stehen, sind unterstrichen. Im Falle einer zahlenmäßigen Anwendung braucht man dieses Gleichungssystem z. B. nach dem Gaußschen Algorithmus aufzulösen, um die Unbekannten und die Korrelaten zu finden. Setzt man die letzten in die Gleichungen (8), die man „Korrelatengleichungen" nennt, ein, so erhält man die gesuchten Verbesserungen v, welche — zu den beobachteten Größen l addiert — die ausgeglichenen Größen $l + v$ ergeben.

Sonderfall I: Ausgleichung nach bedingten Beobachtungen mit Unbekannten.

Man setze $\qquad P_1 = P_2 = P_3 = Q_1 = Q_2 = Q_3 = 0$

Dann entfallen in den Normalgleichungen (11) die beiden letzten Zeilen und Spalten, abgesehen vom Absolutglied.

Sonderfall II: Ausgleichung nach bedingten Beobachtungen

Man setze im Sonderfall I zusätzlich noch $x = y = z = 0$, bzw. $\bar{x} = \bar{y} = \bar{z} = 0$. Dann entfallen in den Normalgleichungen (11) die fünf letzten Zeilen und Spalten.

Sonderfall III: Ausgleichung nach vermittelnden Beobachtungen mit partiellen Bedingungsgleichungen

Man setze im allgemeinen Fall (s. o.): $p_1 = q_1 = \ldots . = 1$ und alle übrigen p und q je gleich null.

Dann wird: $\left[\frac{pp}{g}\right] = \frac{1}{g_1}$, $\left[\frac{qq}{g}\right] = \frac{1}{g_2}$, $\left[\frac{pq}{g}\right] = 0$ usw.

Man kann nun leicht eine Elimination der Korrelaten k_1, k_2 .... erreichen, wenn man folgendermaßen verfährt: Man multipliziere die 1. Zeile mit $g_1 a_1$, die 2. Zeile mit $g_2 a_2$ usw., summiere alle diese multiplizierten Zeilen und subtrahiere die 3. Zeile hiervon, dann erfolgt das Gleiche mit $g_1 b_1$ usw.

Damit erhält man das folgende Normalgleichungssystem (12):

$\bar{x}$	$\bar{y}$	$\bar{z}$	K_1	K_2	Absolut-glied	
$\underline{[gaa]}$	$[gab]$	$[gac]$	$-P_1$	$-Q_1$	$[gaw]$	$=0$
$[gab]$	$\underline{[gbb]}$	$[gbc]$	$-P_2$	$-Q_2$	$[gbw]$	$=0$
$[gac]$	$[gbc]$	$\underline{[gcc]}$	$-P_3$	$-Q_3$	$[gcw]$	$=0$
$-P_1$	$-P_2$	$-P_3$	$\underline{\cdot}$	$\cdot$	$-P_0$	$=0$
$-Q_1$	$-Q_2$	$-Q_3$	$\cdot$	$\underline{\cdot}$	$-Q_0$	$=0$

Selbstverständlich ist diese Elimination von k_1, k_2 .... keine notwendige Maßnahme: Man kann sich auch unmittelbar an das System (11) halten, muß dann aber die Elimination auf numerischem Wege durchführen, was jedoch in der Regel weniger empfehlenswert ist.

Sonderfall IV: Ausgleichung nach vermittelnden Beobachtungen

Man setze im Sonderfall III: $P_1 = P_2 = P_3 = Q_1 = Q_2 = Q_3 = 0$. Dann entfallen im System (12) die letzten beiden Zeilen und Spalten.

Sonderfall V: Ausgleichung von direkten Beobachtungen verschiedener Genauigkeit (Gewogenes Mittel)

Man setze $y = z = 0$, $a = -1$, so daß im Falle linearer Beziehungen f:

$w_1 = l_1 - x_0$. Dann wird: $[g]\,\bar{x} - [gaw] = 0$, $\bar{x} = \frac{1}{[g]}\left([g\,(l - x_0)]\right)$

$$\text{oder} \quad x = x_0 + \bar{x} = \frac{[gl]}{[g]} \tag{13}$$

Sonderfall VI: Ausgleichung von direkten Beobachtungen gleicher Genauigkeit (Gewöhnliches Mittel)

Man setze im Sonderfall V alle $g = \text{const.}$ Dann wird aus (13)

$$x = \frac{[l]}{n} \tag{14}$$

Es ist somit der eingangs erwähnte Nachweis erbracht: Die verschiedenen Ausgleichungsformen bilden nicht ein willkürliches Nebeneinander, wobei für jede einzelne Form — wie seither üblich — eine gesonderte Ableitung der erforderlichen Rechnungen notwendig ist, sondern alle diese bekannten Formen lassen sich in systematischer Weise — als Sonderfälle aus einem übergeordneten, allgemeineren Prinzip herleiten, wobei man lediglich — je nach der Aufgabenstellung — eine Reihe von Größen gleich Null zu setzen hat.