# Die Methode der kleinsten Quadrate in der Beobachtungsauswertung

-

# Anwendung auf Polynome und orthogonale Polynome

Hans-Mereyntje Steinbach

23. Tagung der BAV

Potsdam, 18. September 2010

# Agenda

- **Die Methode der kleinsten Quadrate**
- **Anwendung auf Polynome / Besonderheiten**
- **Anwendung auf orthogonale Polynome**
- **Fazit**
- **Beispiele**
- **Lieraturempfehlung**

# Agenda

- **Die Methode der kleinsten Quadrate**
- **Anwendung auf Polynome / Besonderheiten**
- **Anwendung auf orthogonale Polynome**
- **Fazit**
- **Beispiele**
- **Literaturempfehlung**

# Geschichtliches

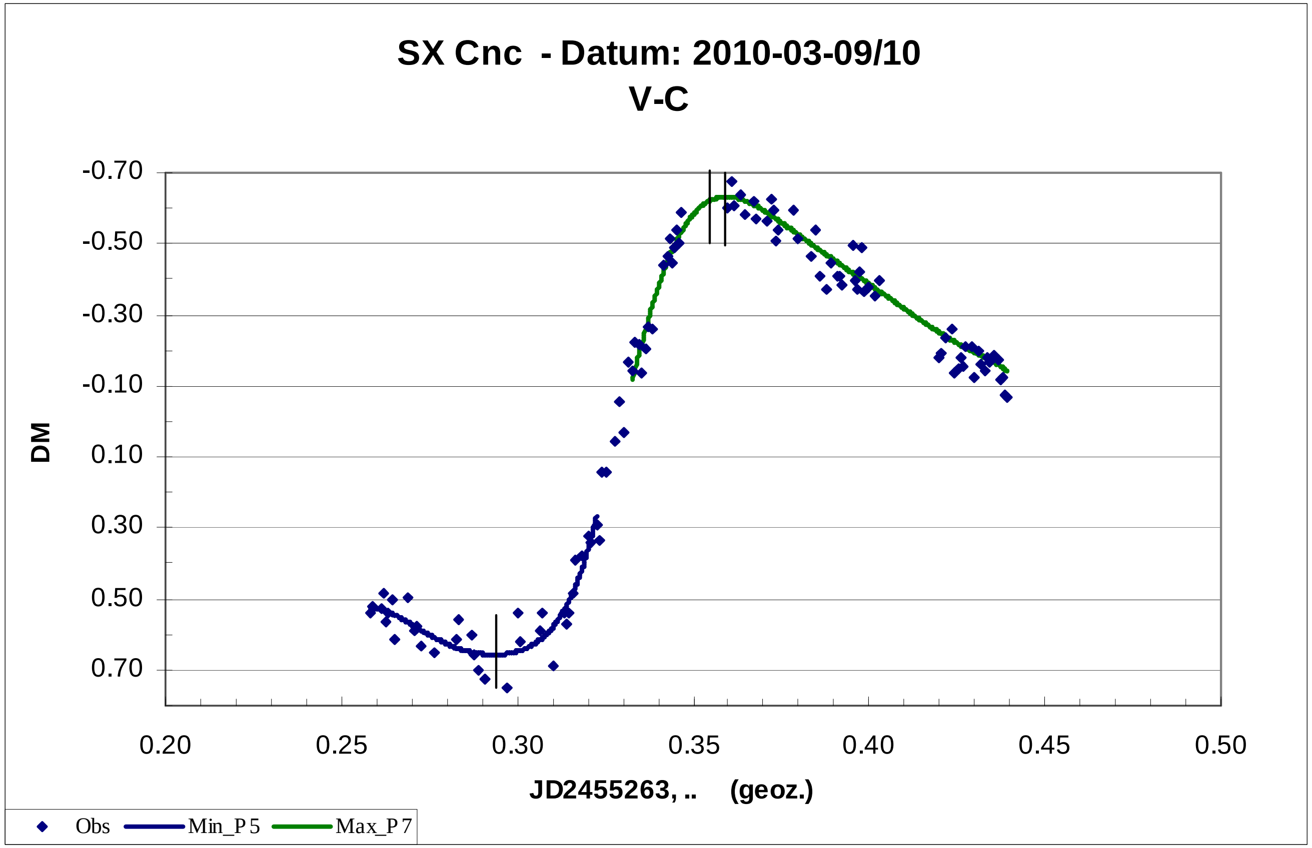
**Die Methode der kleinsten Quadrate ist ein Instrument zur Ermittlung günstigster Werte für <u>ausschließlich mit zufälligen</u> Beobachtungsfehlern behafteten Beobachtungsgrößen.**

**Entwickelt wurde sie 1784 von dem damals 18jährigen Carl Friedrich Gauß; die erste Veröffentlichung 1805 von dem französischen Mathematiker Adrien-Marie Legendre (Méthode de moindres quarrés).**

**Die Methode wurde u. a. 1801 bei der Bestimmung der Bahnelemente des neu entdeckten Planetoidens (1) Ceres erfolgreich eingesetzt, der kurz nach seiner Entdeckung verlorenging. Gauss gelang damit die Berechnung genauer elliptischer Bahnelemente aus deutlich mehr als drei vorliegenden Beobachtungen, so daß er im Dezember 1801 wiedergefunden werden konnte.**

# Intuitive Einführung

**In der Veränderlichen-beobachtung wird die MQ häufig dazu benutzt, Extremwerte von Licht-kurven zu bestimmen (z. B. durch Polynomfits)**



# Typische Aufgabenstellung

- **Es sollen unbekannte Größen (Parameter) <u>möglichst genau</u> bestimmt werden, die allerdings nicht direkt messbar sind. Stattdessen sind nur Funktionswerte dieser Parameter messbar, die zudem noch fehlerbehaftet sind.**

- **Die Anzahl zur Verfügung stehender Messungen ist meist deutlich größer als die Anzahl der zu bestimmenden Parameter.**

**<u>Beispiel</u>:**

*Lineare Lichtwechselelemente eines Bedeckungsveränderlichen.*

$$t_{Min} = E_0 + P*E$$

*Die Parameter $E_0$ und P lassen sich nicht direkt messen, sondern nur aus den beobachteten Zeiten $t_{Min}$ und den bekannten Epochenwerten E berechnen.*

# Prinzip der MQ

**Die beschriebene Aufgabenstellung kann mit Hilfe der MQ gelöst werden.**

**Das verfolgte Verfahren hierbei ist, die <u>Summe der Quadrate der Abweichungen</u> zwischen den <u>Messwerten und den</u> sich aus der Modellfunktion mit den geschätzten Parametern ergebenden <u>berechneten Werten</u> zu minimieren.**

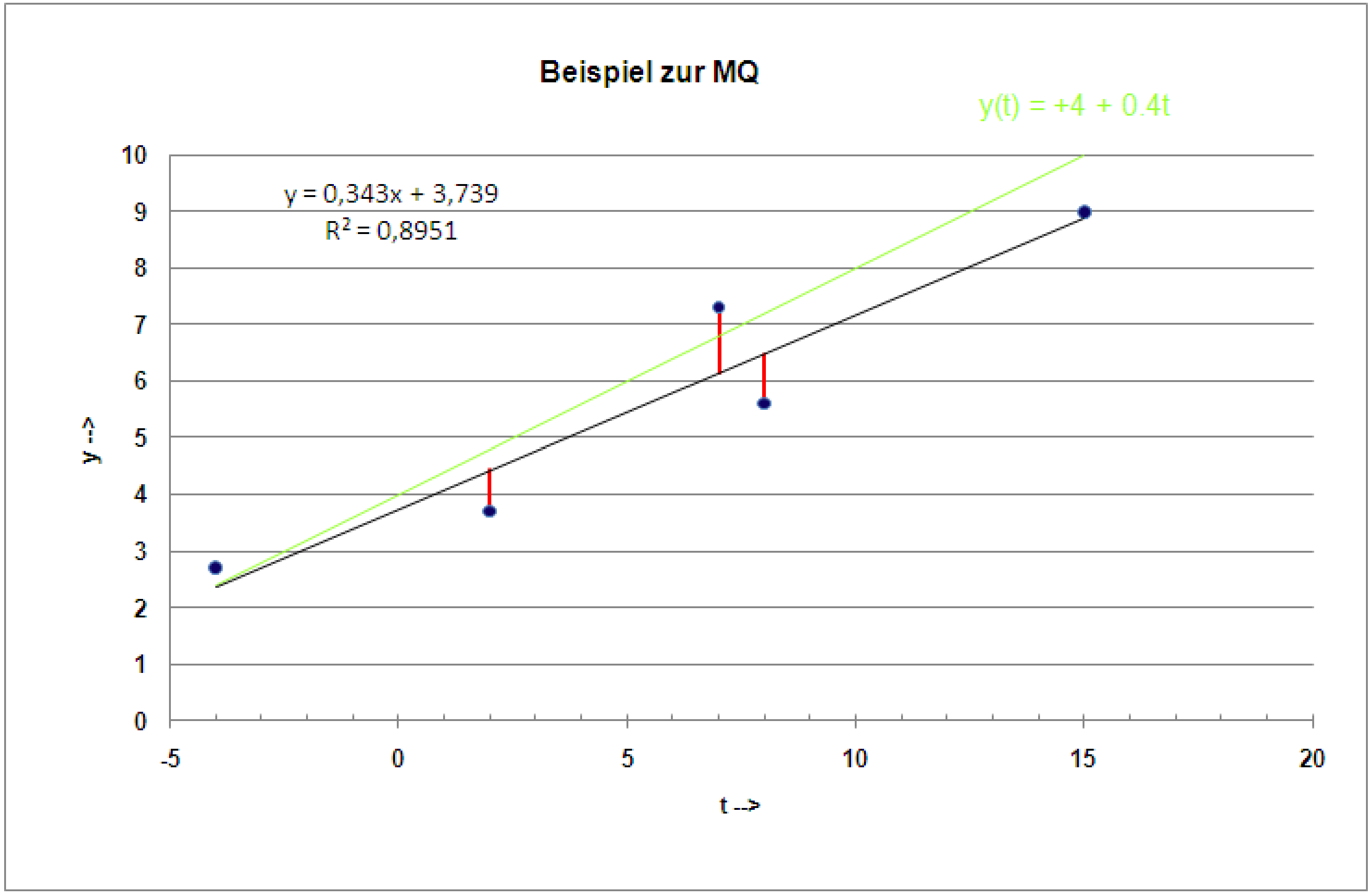
**Aufgrund der Meßfehler stellen die Ergebnisse nur Schätzwerte für die Parameter dar – man spricht deshalb auch von Parameterschätzung".**

**Die MQ lässt sich aus der – historisch sehr viel später entwickelten - „Maximum-Likelihood"- Methode der Wahrscheinlichkeitsrechnung ableiten.**

# Prinzip der MQ

**Schematische Darstellung der zu bildenden Differenzen „B-R“, deren aufsummierte Quadrate zu minimieren sind.**

**Offensichtlich sind die Fehler nicht um die gewählte Ausgangsfunktion normalverteilt, wie der Verlauf der Ausgleichungs-gerade zeigt.**



# Voraussetzungen für die Anwendung der MQ

**Für die korrekte Anwendung der Methode der kleinsten Quadrate müssen folgende Voraussetzungen erfüllt sein:**

1. **Zwischen der messbaren Größe und den aus den Messungen abzuleitenden Parametern besteht ein <u>bekannter</u> funktionaler Zusammenhang, und**

2. **Die Fehler der beobachteten Messwerte sind um die Messgröße <u>normalverteilt</u>.**

**Diese Voraussetzungen sind meist <u>nicht</u> erfüllt !**
**(unbekannter funktionaler Zusammenhang, Meßfehler nicht normalverteilt).**

**→ die Ergebnisse stellen nur „Näherung“ dar !**

# Funktionaler Zusammenhang

Zwischen der Messgröße η und einer Anzahl *r* zu schätzender Parameter $x_1$, $x_2$, ... $x_r$ bestehe folgender funktionale Zusammenhang:

$$\eta \quad = \quad p_0 + p_1 x_1 + p_2 x_2 \ldots p_r x_r \qquad (1)$$

die wir in der etwas anderen Form aufschreiben:

$$\eta + a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_2 \ldots a_r x_r = 0 \qquad (1')$$

Gemessen wird aber nicht η, sondern eine mit einem Fehler ε behaftete Größe y:

$$y = \eta + \epsilon$$

so dass sich (1‘) schreiben lässt als:

$$\underbrace{(y - \epsilon)}_{\eta} + a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_2 \ldots a_r x_r = 0 \qquad (1'')$$

# Beobachtungsgleichungsmatrix / Fehlergleichungsmatrix

Für *n>r* Beobachtungen ergibt sich also folgendes (überbestimmte) Gleichungssystem:

$$\begin{array}{lcl} y_1 - \epsilon_1 + a_{1,0} + a_{1,1}x_1 + a_{1,2}x_2 \ldots + a_{1,r}x_r & = & 0 \\ y_2 - \epsilon_2 + a_{2,0} + a_{2,1}x_1 + a_{2,2}x_2 \ldots + a_{2,r}x_r & = & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots \\ y_n - \epsilon_n + a_{n,0} + a_{n,1}x_1 + a_{n,2}x_2 \ldots + a_{n,r}x_r & = & 0 \end{array} \qquad (2)$$

Beobachtung- oder Fehlergleichungsmatrix; **"Design-Matrix**

Durch Einführung folgender Vektoren und Matrix

$$\mathbf{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}, \quad \epsilon = \begin{pmatrix} \epsilon_1 \\ \epsilon_2 \\ \vdots \\ \epsilon_n \end{pmatrix}, \quad \mathbf{a}_0 = \begin{pmatrix} a_{1,0} \\ a_{2,0} \\ \vdots \\ a_{n,0} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_r \end{pmatrix}, \quad A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1r} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2r} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nr} \end{pmatrix}$$

lässt sich das Gleichungssystem wesentlich kompakter darstellen :

$$\mathbf{y} - \epsilon + \mathbf{a}_0 + A\mathbf{x} = \mathbf{0} \quad (3)$$

# Kovarianz- und Gewichtsmatrix

Da die Fehler als normalverteilt angenommen werden, gilt für die Erwartungswerte:

$$\begin{aligned} E(\epsilon_j) &= 0 \\ E(\epsilon_j^2) &= \sigma_j^2 = 1/g_j \end{aligned}$$

Diese vorausgesetzte Eigenschaft ist entscheidend für die Anwendbarkeit der Maximum-Likelihood-Methode !

Da die einzelnen Messungen unabhängig voneinander sind, lassen sich die Varianzen $\sigma^2_j$ Beobachtungen in einer diagonalen Kovarianzmatrix $C_y$ anordnen, deren Inverses die in der Folge benötigte Gewichtsmatrix $G_y$ ist:

$$C_y = \begin{pmatrix} \sigma_1^2 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \sigma_2^2 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \sigma_n^2 \end{pmatrix}, \qquad G_y = \begin{pmatrix} g_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & g_2 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & g_n \end{pmatrix}$$

# Normalgleichungssystem I

Durch Anwendung der Maximum-Likelyhood-Methode ergibt sich dann zwangsläufig als zu erfüllende Forderung für die besten Schätzwerte für die Parameter, dass die Summe der Quadrate der Abweichungen zwischen den Funktionswerten der Modellfunktion und den Beobachtungen zu minimieren ist!

Das bedeutet, dass das namensgebende Kriterium für diese Methode eine zwingende Forderung aus der Wahrscheinlichkeitsrechnung ist, und nicht etwa vom Himmel gefallen ist (die Gallier werden erleichtert sein!).

Angewandt auf unsere anfängliche Aufgabenstellung ist „nach einigen elementaren Umformungen" folgendes Normalgleichungssystem zu lösen:

$$\underbrace{(A^T G_y A)}_{\text{Normalgleichungsmatrix}} \tilde{\mathbf{x}} = -(A^T G_y)(\mathbf{y} + \mathbf{a_0}) \quad (4)$$

# Normalgleichungssystem I

Durch Anwendung der Maximum-Likelyhood-Methode ergibt sich dann zwangsläufig als zu erfüllende Forderung für die besten Schätzwerte für die Parameter, dass die Summe der Quadrate der Abweichungen zwischen den Funktionswerten der Modellfunktion und den Beobachtungen zu minimieren ist!

Das bedeutet, dass das namensgebende Kriterium für diese Methode eine zwingende Forderung aus der Wahrscheinlichkeitsrechnung ist, und nicht etwa vom Himmel gefallen ist (die Gallier werden erleichtert sein!).

Angewandt auf unsere anfängliche Aufgabenstellung ist „nach einigen elementaren Umformungen“ folgendes Normalgleichungssystem zu lösen:

**bekannt !**

$$\underbrace{(A^T G_y A)}\,\mathbf{x} = -(A^T G_y)\,(\mathbf{y} + \mathbf{a_0}) \quad (4)$$

**Unbekannte**

**bekannt !**

# Normalgleichungssystem II

Die Lösung erfolgt durch Multiplikation der Gleichung mit dem Inversen der Normalgleichungsmatrix ($A^T G_Y A$) :

$$\tilde{\mathbf{x}} = -(A^T G_y A)^{-1} (A^T G_y) (\mathbf{y} + \mathbf{a_0}) \quad (5)$$

Anmerkung: korrekterweise muß angemerkt werden, dass die Lösung nur Schätzwerte für den Parametervektor x liefert !

Die Quadratwurzeln der Diagonalelemente der Matrix $(A^T G_Y A)^{-1}$ können als innere oder interne Fehler der geschätzten Parameter betrachtet werden, durch Multiplikation mit dem gewichteten mittleren Fehler $m_0$ ergeben sich die äußeren:

$$\epsilon_{x_k,intern} = \sqrt{(A^T G_y A)^{-1}_{k,k}} \quad (6)$$

$$m_0 = \sqrt{\frac{[pvv]}{n-k}} \quad (7)$$

$$\epsilon_{x_k} = m_0 \cdot \epsilon_{x_k,intern} \quad (8)$$

[pvv] = gewichtete Fehlerquadratsumme

n = Anzahl der Beobachtungen

k = Anzahl zu schätzender Parameter

# Agenda

- Die Methode der kleinsten Quadrate
- **Anwendung auf Polynome / Besonderheiten**
- Anwendung auf orthogonale Polynome
- Fazit
- Beispiele
- Literaturempfehlung

# Polynome und Normalgleichungsmatrix

Im Folgenden wird die Anwendung der MQ auf Polynome vorgestellt und auf die hier vorkommenden Besonderheiten aufmerksam gemacht.

Eine Funktion der Gestalt

$$P_m(t) = x_0 \cdot 1 + x_1 t + x_2 t^2 \dots x_m t^m = x_0 + \sum_{i=1}^{n} x_i t^i \quad (P1)$$

heißt <u>Polynom m. Grades</u> in t und wird durch die <u>m+1 Parameter</u> $x_0, \dots x_m$ bestimmt.

Damit nimmt eine Beobachtungsgleichung gemäß (2) folgende Gestalt an:

$$y_j - \epsilon_j + a_{j,0} + x_0 \cdot 1 + x_1 t + x_2 t^2 + \dots + x_r = 0 \qquad (P2)$$

Die Größe $a_0$ ist bei der Ausgleichung mit Polynomen 0 und braucht im Folgenden nicht mehr berücksichtigt zu werden.

# Beobachtungsgleichungs- / Designmatrix für Polynome

Daraus ergibt sich die Beobachtungsgleichungsmatrix oder Designmatrix für Polynome:

$$A_{Pol} = \begin{pmatrix} 1 & t_1 & t_1^2 & \dots & t_1^m \\ 1 & t_2 & t_2^2 & \dots & t_2^m \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & t_n & t_n^2 & \dots & t_n^m \end{pmatrix}$$

Der Name „Designmatrix“ deutet auf eine wichtige Eigenschaft dieser Matrix hin:

Sie definiert die Grundlegende Struktur des Ausgleichungsproblems und besteht ausschließlich aus der Konstanten „1“ in der 1. Spalte und Potenzen der unabhängigen Variablen t ( z. B. Zeit-Werte ) – die Messwerte ( z. B. Magnituden ) und ihr Verlauf spielen hier absolut keine Rolle !

Die Auswirkungen sehen wir bei der Lösung des Normalgleichungssystems

***Polynome***

**Gaußsche Summenschreibweise:**

$$[x] := \sum_{i=1}^{n} x_i$$

# Normalgleichungsmatrix für Polynome

Die Normalgleichungsmatrix nimmt folgende Gestalt an:

$$(A^T G_y A) = \begin{pmatrix} [g] & [gt] & [gt^2] & \dots & [gt^m] \\ [gt] & [gt^2] & [gt^3] & \dots & [gt^{m+1}] \\ [gt^2] & [gt^3] & [gt^4] & \dots & [gt^{m+2}] \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ [gt^m] & [gt^{m+1}] & [gt^{m+2}] & \dots & [gt^{2m}] \end{pmatrix} \qquad A^T G_y y = \begin{pmatrix} [gy] \\ [gxy] \\ [gx^2y] \\ \vdots \\ [gx^m y] \end{pmatrix}$$

Diese Matrixgestalt verhält sich bei der Inversenbildung numerisch sehr instabil; insbesondere für äquidistante Beobachtungszeiten im Bereich zwischen 0 und 1 (typischerweise JD-Tagesbruchteile bei CCD-Serienaufnahmen) nähert sie sich mit wachsendem *m* einer Hilbert-Matrix m. Ordnung

Desweiteren: für ein Polynom *m.* Grades Produktsummen vom Grad *2m* gebildet werden! Polynom 20 Grades ($t^{20}$) → Produktsummen bis 40. Grades ($t^{40}$)

# Weitere Eigenschaften von Polynome

- Instabiles Verhalten bei Inversion der Normalgleichungsmatrix
  (führt zu Abbruch der Inversion bereits bei niedrigen Polynomgraden
  oder zu absurd hohen Parameterfehlern).
  → Das Produkt aus NGL und deren Inverses als Qualitätsmaß benutzt
  werden.

- Polynome sind korreliert. Die ersten m Parameter eines Polynoms m+k. Grades
  unterscheiden sich von denen eines Polynom m. Grades:

# Agenda

- Die Methode der kleinsten Quadrate
- Anwendung auf Polynome / Besonderheiten
- **Anwendung auf orthogonale Polynome**
- Fazit
- Beispiele
- Literaturempfehlung

# Orthogonale / Orthonormale Polynome

Das Problem der schlecht konditionierten Normalgleichungsmatrix bei den Polynomen kann umgangen werden, indem man die Daten nicht durch ein einzelnes Polynom ausgleicht, sondern durch eine Summe unterschiedlicher, fest vorgegebener Polynome, die untereinander in einer speziell festgelegten Beziehung zueinander stehen: den Orthogonalen / Orthonormalen Polynomen:

$$y(t) = \sum_{j=0}^{r} x_j \, P_j(t) + \epsilon \qquad (OP1)$$

Dabei stellen die $P_j(t)$ einfache Polynome vom Grad j dar, allerdings mit fest vorgegebenen Koeffizienten, die aus den Beobachtungen selbst bestimmt werden müssen. Die Besonderheit der Beziehung dieser Polynome untereinander ist – bezogen auf unsere Beobachtungen - folgende:

$$\sum_{i=1}^{n} g_i \, P_k(t_i) \, P_l(t_i) = \begin{cases} 0 & \text{für } k \neq l \\ 1 & \text{für } k = l \end{cases} \qquad (OP2)$$

# Beobachtungsgleichungs- / Normalgleichungssystem

Die spezielle Gestaltung führt zu einem sehr erfreulichen Resultat:

Gemäß (OP1) nimmt die Beobachtungsgleichungsmatrix folgende Form an:

$$A_{OrthoPol} = \begin{pmatrix} P_0(t_1) & P_1(t_1) & P_2(t_1) & \dots & P_r(t_1) \\ P_0(t_2) & P_1(t_2) & P_2(t_2) & \dots & P_r(t_2) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ P_0(t_n) & P_1(t_n) & P_2(t_n) & \dots & P_r(t_n) \end{pmatrix}$$

und damit vereinfacht sich durch die Bedingung (OP2) die Normalgleichungs-matrix $(A^T G_Y A)^{-1}$ zur Einheitsmatrix. Die Konsequenz: die $x_j$ sindunabhängig und direkt aus der rechten Seite des Normalgleichungssystems zu berechnen, eine Matrixinversion entfällt komplett:

$$\tilde{\mathbf{x}} = -(A^T G_y)\,(\mathbf{y}) \quad (OP3) \quad \text{oder} \quad \tilde{\mathbf{x}}_j = \sum_{i=1}^{n} g_i\, P_j(t_i)\, y_i \quad (OP4)$$

# Berechnung der orthogonalen Polynome I

Die Berechnung der orthonormalen Polynome erfolgt über eine sogenannte **Drei-Term-Rekursionsformel**

$$\gamma_j \, P_j\,(t) \;=\; (\,t \,-\, \alpha_j\,)\, P_{j-1}\,(t) \;-\; \beta_j \, P_{j-2}\,(t) \quad (OP5)$$

wobei die ersten zwei Polynome $P_0$ und $P_1$ als konstanter und linearer Termwie folgt vorgegeben sind:

$$P_0(t) \;=\; b_{00} \qquad \text{mit} \qquad b_{00} \;=\; \left( \sum_{i=1}^{n} g_i \right)^{-1/2}$$

, sowie

$$P_1(t) \;=\; b_{10} + b_{11} t \qquad \text{mit}$$

$$b_{10} \;=\; -b_{11} \frac{\sum_{i=1}^{n} g_i \, t_i}{\sum_{i=1}^{n} g_i} \;=\; -b_{11}\, \bar{t}$$

$$b_{11} \;=\; \frac{1}{\sqrt{[g\,(t-\bar{t})^2]}}$$

# Berechnung der orthogonalen Polynome II

Alle höheren Terme lassen sich dann durch die Rekursion berechnen.

Für jede Ordnung j müssen allerdings die Größen αj, βj und γj neu berechnet werden:

$$\alpha_j = [g\, t\, P_{j-1}^2\,(t)]$$

$$\beta_j = [g\ t\ P_{j-1}(t)\ P_{j-2}(t)]$$

sowie

$$\gamma_j\,(t) = \sqrt{[g\,((t - \alpha_j\,)\,P_{j-1}\,(t) - \beta_j\,P_{j-2}\,(t))^2]}$$

# Agenda

- Die Methode der kleinsten Quadrate
- Anwendung auf Polynome / Besonderheiten
- Anwendung auf orthogonale Polynome
- **Fazit**
- Beispiele
- Literaturempfehlung

# Fazit

Ausleichung mit Polynomen

\+ Einfache Berechnung der Modelfunktion

\- Normalgleichungsmatrix unvorteilhaft für Matrixinversion
-> Beschränkung auf Polynome niedriger Ordnung

\- Parameter korreliert

Ausleichung mit orthogonalen Polynomen

\+ Parameter unkorreliert

\+ Fit mit Polynomen hoher Ordnung problemlos

\- Deutlich höherer Aufwand bei Erstellung der Polynome und Berechnung der Funktionswerte ( mit PC aber problemlos )

Empfehlung für Extremwertbestimmung:
Verwendung von Polynomen niedrigen Grades; keine Darstellung der gesamten Lichtkurve mit Polynomen

# Agenda

- Die Methode der kleinsten Quadrate
- Anwendung auf Polynome / Besonderheiten
- Anwendung auf orthogonale Polynome
- Fazit
- **Beispiele**
- Literaturempfehlung

***Beispiele***

# Ausgangsdaten zu den Beispielen

- Beobachtungen an SX Cnc am 9./10. März 2010
- Datenreduktion erfolgte mit Muniwin Vers. 1.1.22
- Die Daten wurden mit den ausgewiesenen Dezimalstellen verwendet
- Rechengenauigkeit: 10-Byte-Datentyp „Extended“ / 20 Stellen, Borland Turbo-Delphi-2006 Compiler

**Bedeutung der Spalten:**

JD : Tagesbruchteil des JD
mag : Helligkeitsdifferenz zum Vergleichsstern in mag
g : Gewicht der Messung in der Ausgleichung

| Lfd. Nr. | JD | mag | g |
|---|---|---|---|
| 1 | 0.3328 | -0.145 | 1.000 |
| 2 | 0.3335 | -0.223 | 1.000 |
| 3 | 0.3349 | -0.216 | 1.000 |
| 4 | 0.3356 | -0.138 | 1.000 |
| 5 | 0.3363 | -0.204 | 1.000 |
| 6 | 0.3370 | -0.267 | 1.000 |
| 7 | 0.3384 | -0.259 | 1.000 |
| 8 | 0.3418 | -0.438 | 1.000 |
| 9 | 0.3425 | -0.465 | 1.000 |
| 10 | 0.3432 | -0.513 | 1.000 |
| 11 | 0.3439 | -0.447 | 1.000 |
| 12 | 0.3446 | -0.488 | 1.000 |
| 13 | 0.3453 | -0.536 | 1.000 |
| 14 | 0.3460 | -0.502 | 1.000 |
| 15 | 0.3467 | -0.591 | 1.000 |
| 16 | 0.3597 | -0.599 | 1.000 |
| 17 | 0.3611 | -0.674 | 1.000 |
| 18 | 0.3618 | -0.607 | 1.000 |
| 19 | 0.3632 | -0.638 | 1.000 |
| 20 | 0.3646 | -0.581 | 1.000 |
| 21 | 0.3674 | -0.620 | 1.000 |
| 22 | 0.3681 | -0.569 | 1.000 |
| 23 | 0.3709 | -0.564 | 1.000 |
| 24 | 0.3723 | -0.628 | 1.000 |
| 25 | 0.3729 | -0.594 | 1.000 |
| 26 | 0.3736 | -0.510 | 1.000 |
| 27 | 0.3743 | -0.538 | 1.000 |
| 28 | 0.3785 | -0.594 | 1.000 |
| 29 | 0.3799 | -0.517 | 1.000 |
| 30 | 0.3834 | -0.463 | 1.000 |
| 31 | 0.3848 | -0.536 | 1.000 |
| 32 | 0.3862 | -0.410 | 1.000 |
| 33 | 0.3876 | -0.373 | 1.000 |
| 34 | 0.3890 | -0.445 | 1.000 |
| 35 | 0.3911 | -0.408 | 1.000 |
| 36 | 0.3918 | -0.407 | 1.000 |
| 37 | 0.3925 | -0.386 | 1.000 |
| 38 | 0.3952 | -0.496 | 1.000 |
| 39 | 0.3959 | -0.394 | 1.000 |
| 40 | 0.3966 | -0.374 | 1.000 |
| 41 | 0.3973 | -0.419 | 1.000 |
| 42 | 0.3980 | -0.489 | 1.000 |
| 43 | 0.3987 | -0.363 | 1.000 |
| 44 | 0.4001 | -0.380 | 1.000 |
| 45 | 0.4015 | -0.351 | 1.000 |
| 46 | 0.4029 | -0.394 | 1.000 |
| 47 | 0.4199 | -0.178 | 1.000 |
| 48 | 0.4206 | -0.193 | 1.000 |
| 49 | 0.4220 | -0.236 | 1.000 |
| 50 | 0.4234 | -0.260 | 1.000 |
| 51 | 0.4241 | -0.138 | 1.000 |
| 52 | 0.4255 | -0.145 | 1.000 |
| 53 | 0.4262 | -0.181 | 1.000 |
| 54 | 0.4269 | -0.154 | 1.000 |
| 55 | 0.4276 | -0.208 | 1.000 |
| 56 | 0.4290 | -0.213 | 1.000 |
| 57 | 0.4296 | -0.126 | 1.000 |
| 58 | 0.4310 | -0.198 | 1.000 |
| 59 | 0.4317 | -0.160 | 1.000 |
| 60 | 0.4331 | -0.141 | 1.000 |
| 61 | 0.4338 | -0.180 | 1.000 |
| 62 | 0.4345 | -0.169 | 1.000 |
| 63 | 0.4352 | -0.188 | 1.000 |
| 64 | 0.4366 | -0.173 | 1.000 |
| 65 | 0.4373 | -0.120 | 1.000 |
| 66 | 0.4380 | -0.123 | 1.000 |
| 67 | 0.4387 | -0.073 | 1.000 |
| 68 | 0.4394 | -0.068 | 1.000 |

***Beispiele***

# Beispiel 1: Polynomfit 3. Grades

Funktion: $y(t) = x_0 + x_1 t + x_2 t^2 + x_3 t^3$ (Anzahl Parameter: 4)

Die folgende Matrix beinhaltet im oberen rechten Teil die Normalgleichungsmatrix mit ihren Produktsummen.
Im linken unteren Teil ist ihr Inverses in transponierter Schreibweise aufgeführt.
Beide Gleichungen sind symmetrisch ! Diese Form der Darstellung spart Speicherplatz bei der Rechnung!

Hier steht die „Rechte Seite“, also das „$(A^T G_y)y$ aus Gleichung (4), Folie 13

```
================================================
Es folgt Matrixinversion nach CHOLIV-Methode (alt)
================================================


Ausdruck NGL (rechte obere Dreiecksmatrix, bzw. nach ihrer
Inversion zusätzlich ihr Inverses (linke untere Dreiecksmatrix
und jeweils Rechte Seite
          68.00000000          26.42750000          10.35196597           4.08608587   !    -24.37800000
       91132.39362306          10.35196597           4.08608587           1.62472798   !     -9.23891540
     -713852.90930367        5594054.40258512           1.62472798           0.65056478   !     -3.52103471
     1855393.96098014      -14545655.72634545    37837054.92396973           0.26222170   !     -1.34949661
    -1600218.24424495       12550215.50626872   -32659464.82384210    28201484.87892286
```

```
Kontrollausdruck NGL * NGL1 ( = Einheitsmatrix)
================================================
  1|      1.0000      0.0000     -0.0000      0.0000
  2|     -0.0000      1.0000     -0.0000      0.0000
  3|     -0.0000      0.0000      1.0000      0.0000
  4|     -0.0000      0.0000     -0.0000      1.0000
```

**Qualitätskontrolle: Produkt aus Normalgleichungmatrix und ihrem Inversen muss die Einheitsmatrix ergeben.**
**Dies ist hier erfüllt !**

Parameter, innere Fehler und äußere Fehler ( s. Folie 15)

```
     m_0 (:= SQRT( [pvv]/(N-K) ) :   0.05343378
              X                  Eps_i        m_0 * Eps_i
1  x0  1.837053969E+0002   3.01881E+0002  1.61307E+0001
2  x1 -1.403745568E+0003   2.36518E+0003  1.26380E+0002
3  x2  3.542095768E+0003   6.15118E+0003  3.28681E+0002
4  x3 -2.957968641E+0003   5.31051E+0003  2.83760E+0002
```

Anmerkungen:

- Die Matrixinversion ist stabil
- Die Fehler der Parameter liegen bei ca. 10%
- Beachte die hohen Parameterwerte selbst !
  (Ursache: der Datenbereich zwischen 0.33-0.43)
- tMax,3 = 0.3654, y(tMax,3) = -0.6036mag

***Beispiele***

# Beispiel 2: Polynomfit 7. Grades I

Funktion: $y(t) = x_0 + x_1 t + x_2 t^2 + ... + x_7 t^7$ (Anz. Param.: 8)

Die folgende Matrix beinhaltet im <u>oberen rechten Teil</u> die <u>Normalgleichungsmatrix</u> mit ihren Produktsummen.
Im <u>linken unteren Teil</u> ist ihr <u>Inverses in transponierter Schreibweise</u> aufgeführt.

```
==================================================
Es folgt Matrixinversion nach CHOLIV-Methode (alt)
==================================================

Ausdruck NGL (rechte obere Dreicksmatrix, bzw. nach ihrer
Inversion zusätzlich ihr transponiertes Inverses (linke untere Dreiecksmatrix
und für das NGL jeweils die "rechte Seite".

 6.800000000E+0001   2.642750000E+0001   1.035196597E+0001   4.086085866E+0000   1.624727975E+0000   6.505647787E-0001   2.622217042E-0001   1.063494797E-0001  ! -2.437800000E+0001
 ------------------
 3.019976253E+0013   1.035196597E+0001   4.086085866E+0000   1.624727975E+0000   6.505647787E-0001   2.622217042E-0001   1.063494797E-0001   4.338159224E-0002  ! -9.238915400E+0000
                    ------------------
-5.509569347E+0014   1.005714337E+0016   1.624727975E+0000   6.505647787E-0001   2.622217042E-0001   1.063494797E-0001   4.338159224E-0002   1.779068775E-0002  ! -3.521034705E+0000
                                        ------------------
 4.300985635E+0015  -7.855432917E+0016   6.139215596E+0017   2.622217042E-0001   1.063494797E-0001   4.338159224E-0002   1.779068775E-0002   7.331854245E-0003  ! -1.349496606E+0000
                                                            ------------------
-1.862352239E+0016   3.403385527E+0017  -2.661356621E+0018   1.154367647E+0019   4.338159224E-0002   1.779068775E-0002   7.331854245E-0003   3.035229483E-0003  ! -5.201628861E-0001
                                                                                ------------------
 4.830882718E+0016  -8.833337056E+0017   6.911423755E+0018  -2.999583324E+0019   7.798863481E+0019   7.331854245E-0003   3.035229483E-0003   1.261702763E-0003  ! -2.016389905E-0001
                                                                                                    ------------------
-7.506994946E+0016   1.373456640E+0018  -1.075250924E+0019   4.669353402E+0019  -1.214735490E+0020   1.893160774E+0020   1.261702763E-0003   5.264432442E-0004  ! -7.860789165E-0002
                                                                                                                        ------------------
 6.470853785E+0016  -1.184574025E+0018   9.279195215E+0018  -4.031917470E+0019   1.049522832E+0020  -1.636641408E+0020   1.415714646E+0020   2.204078867E-0004  ! -3.081701703E-0002
                                                                                                                                            ------------------    ------------------
-2.386787181E+0016   4.371868563E+0017  -3.426645981E+0018   1.489791753E+0019  -3.880266069E+0019   6.054512933E+0019  -5.240316761E+0019   1.940864725E+0019
```

Deutlich erkennbar „schießen" die Elemente der inversen Matrix betragsmäßig mächtig in die Höhe.

***Beispiele***

# Beispiel 2: Polynomfit 7. Grades II

Funktion: $y(t) = x_0 + x_1 t + x_2 t^2 + \ldots + x_7 t^7$ (Anz. Param.: 8)

Kontrollausdruck NGL * NGL1 ( = Einheitsmatrix)

| | | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | 1.0715 | -1.4531 | 10.8125 | -47.8750 | 118.2500 | -158.0000 | 141.0000 | -58.5000 |
| 2 | 0.0280 | 0.4785 | 3.8750 | -16.6875 | 45.3750 | -65.2500 | 63.1250 | -22.6250 |
| 3 | 0.0097 | -0.1943 | 2.6406 | -7.1406 | 15.6875 | -24.8125 | 21.6250 | -9.1875 |
| 4 | 0.0037 | -0.0701 | 0.6191 | -1.8359 | 6.3594 | -10.3750 | 8.9063 | -3.6719 |
| 5 | 0.0017 | -0.0341 | 0.2559 | -1.1406 | 3.7344 | -4.0156 | 3.6094 | -1.4453 |
| 6 | 0.0006 | -0.0126 | 0.1079 | -0.4434 | 1.1055 | -0.6172 | 1.3672 | -0.5723 |
| 7 | 0.0003 | -0.0058 | 0.0472 | -0.1895 | 0.4688 | -0.7559 | 1.6641 | -0.2451 |
| 8 | 0.0001 | -0.0020 | 0.0172 | -0.0784 | 0.1763 | -0.2539 | 0.2402 | 0.9133 |

**Qualitätskontrolle: Produkt aus Normalgleichungmatrix und ihrem Inversen muss die Einheitsmatrix ergeben. <u>Dies ist hier nicht erfüllt</u> !!**

Parameter, innere Fehler und äußere Fehler ( s. Folie 15)

m_0 (:= SQRT( [pvv]/(N-K) ) : 0.04782136

| | | X | Eps_i | m_0 * Eps_i |
|---|---|---|---|---|
| 1 | x0 | -3.458201118E+0005 | 5.49543E+0006 | 2.62799E+0005 |
| 2 | x1 | 6.315172576E+0006 | 1.00285E+0008 | 4.79578E+0006 |
| 3 | x2 | -4.929722553E+0007 | 7.83531E+0008 | 3.74695E+0007 |
| 4 | x3 | 2.132694804E+0008 | 3.39760E+0009 | 1.62478E+0008 |
| 5 | x4 | -5.523117639E+0008 | 8.83112E+0009 | 4.22316E+0008 |
| 6 | x5 | 8.563269446E+0008 | 1.37592E+0010 | 6.57985E+0008 |
| 7 | x6 | -7.360639014E+0008 | 1.18983E+0010 | 5.68997E+0008 |
| 8 | x7 | 2.706121925E+0008 | 4.40552E+0009 | 2.10678E+0008 |

<u>Anmerkungen:</u>

- Die Matrixinversion ist instabil; die asymmetrische Form resultiert aus den wachsenden numerischen Fehlern bei der Berechnung der Inversen Normalgleichungsmatrix
- Die Fehler der Parameter liegen im 100%-Bereich !
- Beachte die hohen Parameterwerte selbst ! (Ursache: der Datenbereich zwischen 0.33-0.43)
- Dennoch ist die Darstellung der Beobachtungen plausibel.
- TMax,7 = 0.3593, y(tMax,7) = -0.6329mag

***Beispiele***

# Beispiel 3: Orthonormales Polynom 12. Grades I

Der folgende Ausdruck gibt die Rekursionselemente $\alpha$, $\beta$, $\gamma$, dieRegressionskoeffizienten der einzelnen Polynome (hier mit c bezeichnet, entspricht den „x“-Parametern in Formel OP1), Fehlerquadratsumme, Standardabweichung sowie statistische Daten zu einem Hypothesen-test ggü. der Nullhypothese(Studentscher F-Test; liefert eine Aussage im Sinne von „ist der Koeffizient des j. Polynoms statistisch signifikant (OK in der letzten Spalte), oder könnte er auch „0“ sein, d. h., dass er nicht benötigt würde). Hier ist mindestens das OP vom Grad 4 erforder-lich. Die „OKs“ bei Grad 7 und 9 können auch statistisch erzeugt sein. Da die Normalgleichungsmatrix die Einheitsmatrix ist, sind die Varianzen aller Parameter 1 → das einzige Fehlerkriterium ist somit die Fehlerquadratsumme !

```
Ausgabe der Parameter und Fehlerquadratsumme und Fehlermasze
============================================================

          100*N+M                             :              6813
          Variance estimation                 :       1.000
          P0(x) = constant term               :       0.121
```

```
Ausgabe der Iterationsparamater, Koeffizienten und Fehlerquadratsumme
======================================================================
```

| Deg | alpha[j] | beta[j] | gamma[j] | c[j] | Sum(Chi^2)j | Sigma_est | F(1,n) | n | F0.95 | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 0 | 6813.0000 | 1.0000 | 0.1213 | -2.9563 | 2.0861 | 0.1765 | 280.689 | 67 | 3.984 | OK |
| 1 | 0.3886 | 0.0000 | 28.9403 | 0.8259 | 1.4039 | 0.1458 | 32.070 | 66 | 3.986 | OK |
| 2 | 0.3861 | 0.0346 | 34.7931 | 0.9544 | 0.4930 | 0.0871 | 120.108 | 65 | 3.989 | OK |
| 3 | 0.3833 | 0.0287 | 43.4905 | -0.5570 | 0.1827 | 0.0534 | 108.663 | 64 | 3.991 | OK |
| 4 | 0.3869 | 0.0230 | 34.3345 | 0.2314 | 0.1292 | 0.0453 | 26.124 | 63 | 3.993 | OK |
| 5 | 0.3906 | 0.0291 | 34.5323 | -0.0578 | 0.1258 | 0.0450 | 1.648 | 62 | 3.996 | - |
| 6 | 0.3769 | 0.0290 | 46.0043 | -0.0188 | 0.1255 | 0.0454 | 0.172 | 61 | 3.998 | - |
| 7 | 0.3922 | 0.0217 | 35.4138 | 0.1458 | 0.1042 | 0.0417 | 12.236 | 60 | 4.001 | OK |
| 8 | 0.3916 | 0.0282 | 36.6989 | -0.0017 | 0.1042 | 0.0420 | 0.002 | 59 | 4.004 | - |
| 9 | 0.3731 | 0.0272 | 38.9457 | 0.1029 | 0.0936 | 0.0402 | 6.556 | 58 | 4.007 | OK |
| 10 | 0.3884 | 0.0257 | 36.2089 | -0.0430 | 0.0918 | 0.0401 | 1.146 | 57 | 4.010 | - |
| 11 | 0.3971 | 0.0276 | 45.5350 | -0.0097 | 0.0917 | 0.0405 | 0.058 | 56 | 4.013 | - |
| 12 | 0.3770 | 0.0220 | 35.2563 | 0.0352 | 0.0904 | 0.0406 | 0.755 | 55 | 4.016 | - |

**Beispiele**

# Beispiel 3: Orthonormales Polynom 12. Grades II

Lage der sich ergebenden Maximumzeitpunkte und –helligkeiten.

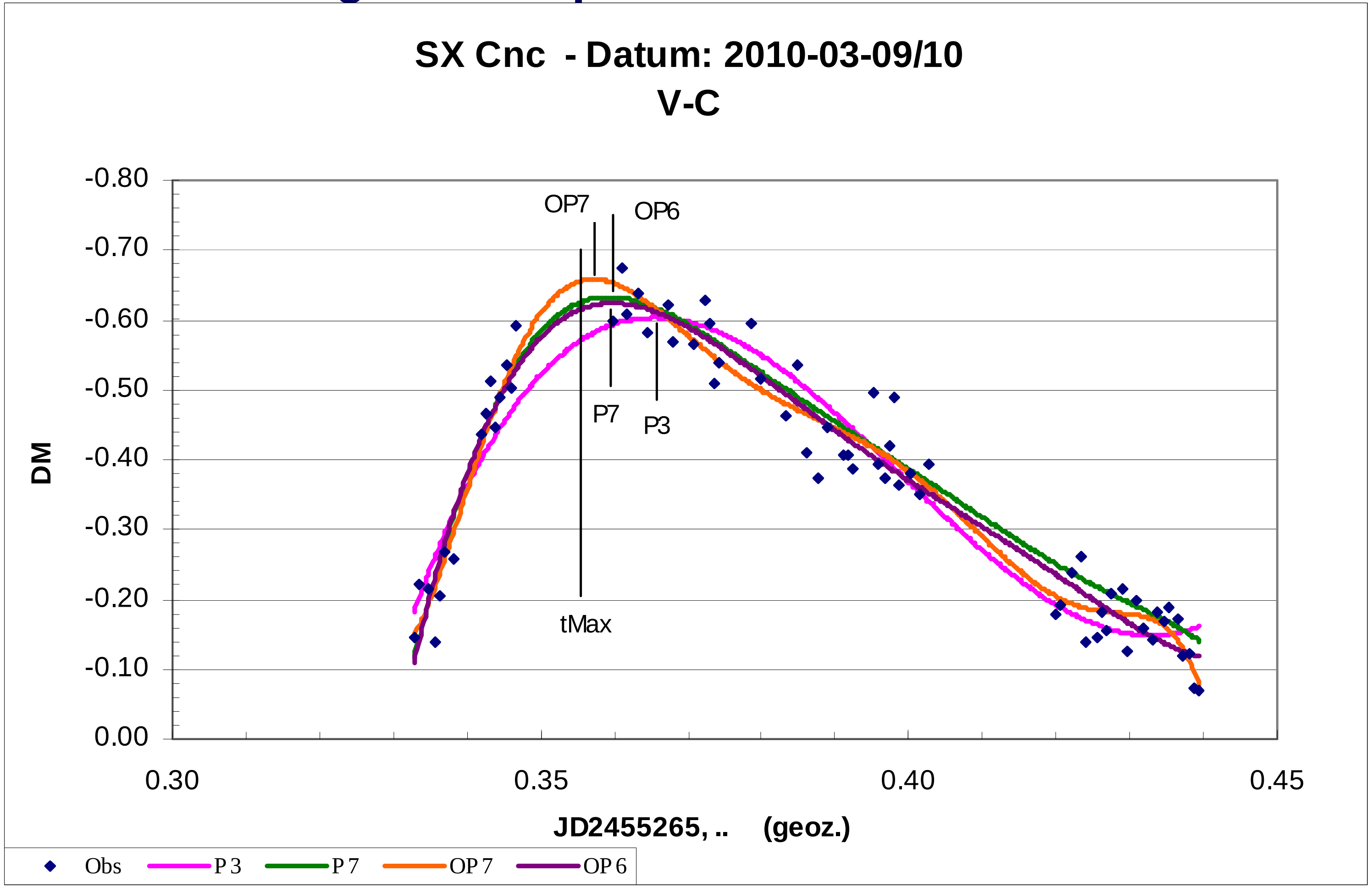
Berechnung der Extremwerte

| I | Deg | Z[I] | Y[Z[I]] | NITER |
|---|---|---|---|---|
| 3 | 2 | 0.3749 | -0.520 | 0 |
| 4 | 3 | 0.3654 | -0.604 | 4 |
| 5 | 4 | 0.3610 | -0.624 | 4 |
| 6 | 5 | 0.3599 | -0.620 | 3 |
| 7 | 6 | 0.3598 | -0.624 | 2 |
| 8 | 7 | 0.3572 | -0.658 | 4 |
| 9 | 8 | 0.3571 | -0.658 | 2 |
| 10 | 9 | 0.3562 | -0.638 | 3 |
| 11 | 10 | 0.3579 | -0.623 | 4 |
| 12 | 11 | 0.3565 | -0.627 | 4 |
| 13 | 12 | 0.3542 | -0.630 | 5 |

**Beispiele**

# Graphische Darstellung der Beispiele

- P3 liegt deutlich neben den Daten
- P7 und OP6 sind sehr ähnlich, verlassen aber sehr früh den Datenbereich vor der Beobachtungslücke
- OP7 stellt den oberen Liku-Teil harmonischer dar, zeigt aber bereits deutlichen „Wellenschlag“ im abfallenden Bereich
- Gemeldete Maxi-mumzeit: .3552
- Geschätzter Fehler ±0.003



# Agenda

- Die Methode der kleinsten Quadrate
- Anwendung auf Polynome / Besonderheiten
- Anwendung auf orthogonale Polynome
- Fazit
- Beispiele
- **Literaturempfehlung**

## Literaturempfehlung

Siegmund Brandt, „Datenanalyse“, BI Wissenschaftsverlag

Volker Blobel / Erich Lohrmann,
„Statistische und numerische Methoden der Datenanalyse“,
Teubner Studienbücher