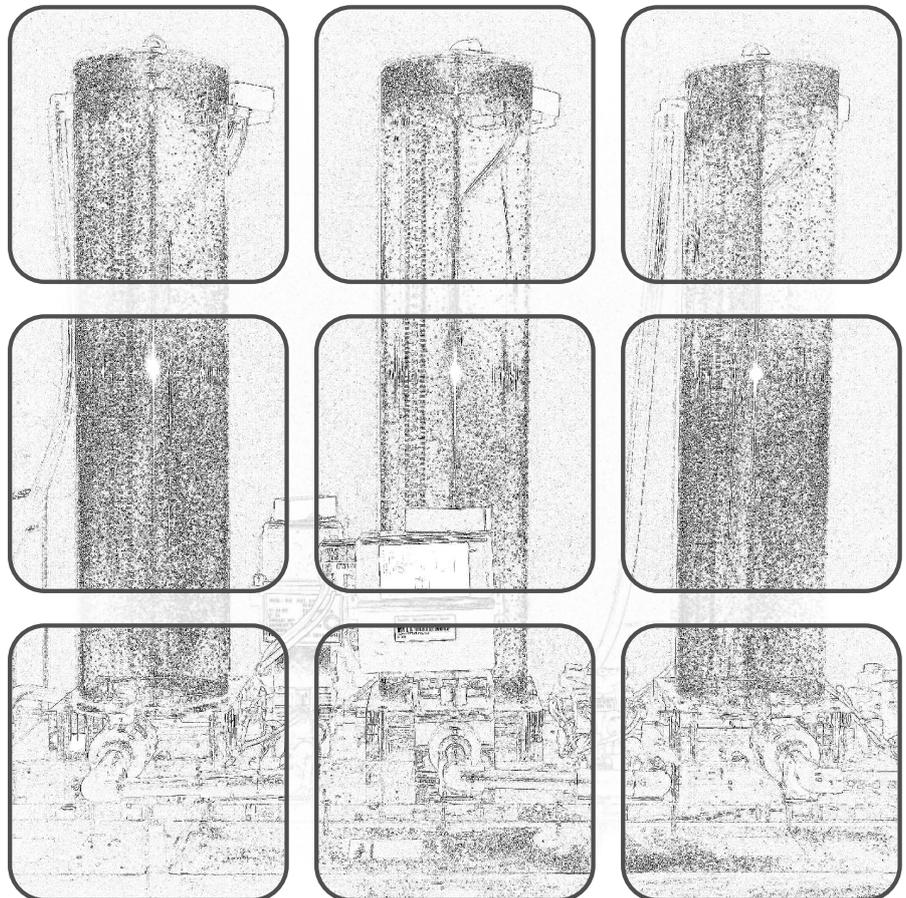


OPTIMIERUNGSBASIERTE REGELUNGSMETHODEN

Vorlesung und Übung
Sommersemester 2023

Andreas Steinböck



Optimierungsbasierte Regelungsmethoden

Vorlesung und Übung
Sommersemester 2023

Andreas Steinböck

TU Wien
Institut für Automatisierungs- und Regelungstechnik
Gruppe für komplexe dynamische Systeme

Gußhausstraße 27–29
1040 Wien
Telefon: +43 1 58801 – 37615
Internet: <https://www.acin.tuwien.ac.at>

© Institut für Automatisierungs- und Regelungstechnik, TU Wien

Inhaltsverzeichnis

3	Optimierungsbasierte Schätzung	59
3.1	Parameterschätzung für ein lineares Modell	59
3.1.1	Der reguläre Fall	59
3.1.2	Der Fall einer nicht spaltenregulären Datenmatrix	65
3.1.3	Der singuläre Fall	69
3.2	Parameterschätzung für ein nichtlineares Modell	74
3.2.1	Der reguläre Fall	76
3.2.2	Der singuläre Fall	82
3.2.3	Der kollineare Fall	83
3.2.4	Schranken für die Kovarianzmatrix des Parameterschätzfehlers . .	88
3.2.5	Normalverteilte Störung	93
3.3	Optimale Versuchsplanung	97
3.4	Literatur	105

3 Optimierungsbasierte Schätzung

3.1 Parameterschätzung für ein lineares Modell

3.1.1 Der reguläre Fall

Von einem System sind die zu einem Vektor zusammengefassten Ausgangswerte $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^m$ (z. B. aus Messungen) verfügbar. Für sie wird ein lineares Modell der Form

$$\mathbf{y} = \mathbf{S}\mathbf{p} + \mathbf{v} \quad (3.1)$$

mit unbekanntem Systemparametern $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^n$ angenommen. Hierbei ist die deterministische spaltenreguläre Matrix $\mathbf{S} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ (Datenmatrix) bekannt und \mathbf{v} ist eine stochastische Störung (Zufallszahl) mit Erwartungswert $E(\mathbf{v}) = \mathbf{0}$ und bekannter, symmetrischer, positiv definierter Kovarianzmatrix $E(\mathbf{v}\mathbf{v}^T) = \mathbf{Q} > 0$. Die Verteilung von \mathbf{v} kann beliebig und unbekannt sein. Natürlich kann sich die Abbildung (3.1) aus Messungen des Ausgangs eines linearen dynamischen Systems ergeben (siehe dazu die Beispiele 3.1 und 3.2 am Ende dieses Abschnitts). Der Vektor \mathbf{p} könnte dann neben Systemparametern auch den unbekanntem Anfangszustand des Systems enthalten.

Der nun folgende Entwurf eines optimalen Schätzers ist an [3.1] angelehnt. Alternative Herleitungen finden sich in [3.2–3.4]. Die unbekanntem Parameter \mathbf{p} sollen von einem *linearen* Schätzer der Form

$$\hat{\mathbf{p}} = \mathbf{K}\mathbf{y} \quad (3.2)$$

mit einer noch zu bestimmenden Matrix $\mathbf{K} \in \mathbb{R}^{n \times m}$ *erwartungstreu* und *mit minimaler Varianz* des Parameterschätzfehlers geschätzt werden. Es soll also

$$E(\hat{\mathbf{p}}) = \mathbf{p} \quad (3.3)$$

gelten und die Summe der Einzelvarianzen

$$\sum_{i=1}^n E((\hat{p}_i - p_i)^2) = E(\|\hat{\mathbf{p}} - \mathbf{p}\|_2^2) = \text{spur}(E((\hat{\mathbf{p}} - \mathbf{p})(\hat{\mathbf{p}} - \mathbf{p})^T)) \quad (3.4)$$

soll minimal sein. Wegen

$$E(\hat{\mathbf{p}}) = E(\mathbf{K}\mathbf{y}) = E(\mathbf{K}(\mathbf{S}\mathbf{p} + \mathbf{v})) = \mathbf{K}(\mathbf{S}\mathbf{p} + E(\mathbf{v})) = \mathbf{K}\mathbf{S}\mathbf{p} \quad (3.5)$$

muss für die Erwartungstreue des Schätzers

$$\mathbf{K}\mathbf{S} = \mathbf{E} \quad (3.6)$$

erfüllt sein. Berücksichtigt man dies in (3.4), so folgt

$$\begin{aligned} \mathbb{E}(\|\hat{\mathbf{p}} - \mathbf{p}\|_2^2) &= \mathbb{E}(\|\mathbf{K}(\mathbf{S}\mathbf{p} + \mathbf{v}) - \mathbf{p}\|_2^2) = \mathbb{E}(\|\mathbf{K}\mathbf{v}\|_2^2) = \mathbb{E}(\mathbf{v}^T \mathbf{K}^T \mathbf{K} \mathbf{v}) \\ &= \mathbb{E}(\text{spur}(\mathbf{K}\mathbf{v}\mathbf{v}^T \mathbf{K}^T)) = \text{spur}(\mathbf{K}\mathbf{Q}\mathbf{K}^T) = \sum_{i,j,k} K_{ij} Q_{jk} K_{ik} = (\mathbf{K}\mathbf{Q}) : \mathbf{K} \end{aligned} \quad (3.7)$$

mit $\mathbf{K} = [K_{ij}]$, $\mathbf{Q} = [Q_{ij}]$ und dem doppelt verjüngenden Produkt $\mathbf{A} : \mathbf{B} = \sum_{i,j} A_{ij} B_{ij}$ zweier Matrizen \mathbf{A} und \mathbf{B} . Zur Bestimmung von \mathbf{K} wird daher die Optimierungsaufgabe

$$\min_{\mathbf{K} \in \mathbb{R}^{n \times m}} (\mathbf{K}\mathbf{Q}) : \mathbf{K} \quad (3.8a)$$

$$\text{u.B.v.} \quad \mathbf{K}\mathbf{S} - \mathbf{E} = \mathbf{0} \quad (3.8b)$$

formuliert. Die zugehörige Lagrangefunktion

$$\begin{aligned} L(\mathbf{K}, \boldsymbol{\Lambda}) &= (\mathbf{K}\mathbf{Q}) : \mathbf{K} + (\mathbf{K}\mathbf{S} - \mathbf{E}) : \boldsymbol{\Lambda} \\ &= \sum_{i,j,k} K_{ij} Q_{jk} K_{ik} + \sum_{i,j,k} K_{ij} S_{jk} \Lambda_{ik} - \sum_{i,j} \delta_{ij} \Lambda_{ij} \end{aligned} \quad (3.9)$$

mit $\mathbf{S} = [S_{ij}]$, den Lagrange-Multiplikatoren $\boldsymbol{\Lambda} = [\Lambda_{ij}]$ und dem Kronecker-Symbol

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{für } i = j \\ 0 & \text{für } i \neq j \end{cases} \quad (3.10)$$

führt auf die KKT-Bedingungen (erster Ordnung)

$$\frac{\partial L(\mathbf{K}, \boldsymbol{\Lambda})}{\partial K_{ij}} = \sum_k (Q_{jk} K_{ik} + K_{ik} Q_{kj}) + \sum_k S_{jk} \Lambda_{ik} = 0 \quad \forall i, j \quad (3.11a)$$

$$\frac{\partial L(\mathbf{K}, \boldsymbol{\Lambda})}{\partial \Lambda_{ij}} = \sum_k K_{ik} S_{kj} - \delta_{ij} = 0 \quad \forall i, j. \quad (3.11b)$$

In Matrixschreibweise lauten diese

$$\frac{\partial L(\mathbf{K}, \boldsymbol{\Lambda})}{\partial \mathbf{K}} = 2\mathbf{K}\mathbf{Q} + \boldsymbol{\Lambda}\mathbf{S}^T = \mathbf{0} \quad (3.12a)$$

$$\frac{\partial L(\mathbf{K}, \boldsymbol{\Lambda})}{\partial \boldsymbol{\Lambda}} = \mathbf{K}\mathbf{S} - \mathbf{E} = \mathbf{0}. \quad (3.12b)$$

Wird (3.12a) rechtsseitig mit $\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{S}$ multipliziert, so ergibt sich unter Verwendung von (3.12b)

$$\boldsymbol{\Lambda} = -2(\mathbf{S}^T \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{S})^{-1}. \quad (3.13)$$

Nach Einsetzen in (3.12a) folgt daher

$$\mathbf{K} = (\mathbf{S}^T \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{S})^{-1} \mathbf{S}^T \mathbf{Q}^{-1}. \quad (3.14)$$

Zum Nachweis der strikten Optimalität von \mathbf{K} gemäß (3.14) muss noch gezeigt werden, dass jede andere Matrix $\tilde{\mathbf{K}}$, die $\tilde{\mathbf{K}} \neq \mathbf{K}$ und die Nebenbedingung (3.8b) erfüllt, zu einem schlechteren Kostenfunktionswert (3.8a) führt. Dieser Nachweis folgt unter Beachtung der Identitäten $(\mathbf{K}\mathbf{Q}) : \mathbf{K} = \text{spur}(\mathbf{K}\mathbf{Q}\mathbf{K}^T)$, $\tilde{\mathbf{K}}\mathbf{S} = \mathbf{E}$, $\mathbf{Q} > 0$, $\tilde{\mathbf{K}} \neq \mathbf{K}$ und $\mathbf{K}\mathbf{Q}\mathbf{K}^T = (\mathbf{S}^T\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{S})^{-1}$ aus der Ungleichung

$$\begin{aligned} 0 &< \text{spur}((\tilde{\mathbf{K}} - \mathbf{K})\mathbf{Q}(\tilde{\mathbf{K}} - \mathbf{K})^T) \\ &= \text{spur}(\tilde{\mathbf{K}}\mathbf{Q}\tilde{\mathbf{K}}^T) - 2\text{spur}(\mathbf{K}\mathbf{Q}\tilde{\mathbf{K}}^T) + \text{spur}(\mathbf{K}\mathbf{Q}\mathbf{K}^T) \\ &= \text{spur}(\tilde{\mathbf{K}}\mathbf{Q}\tilde{\mathbf{K}}^T) - 2\text{spur}((\mathbf{S}^T\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{S})^{-1}\underbrace{\mathbf{S}^T\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{Q}\tilde{\mathbf{K}}^T}_{\mathbf{E}}) + \text{spur}(\mathbf{K}\mathbf{Q}\mathbf{K}^T) \quad (3.15) \\ &= \text{spur}(\tilde{\mathbf{K}}\mathbf{Q}\tilde{\mathbf{K}}^T) - \text{spur}(\mathbf{K}\mathbf{Q}\mathbf{K}^T) . \end{aligned}$$

Der optimale lineare erwartungstreue Schätzer lautet also

$$\hat{\mathbf{p}} = (\mathbf{S}^T\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{S})^{-1}\mathbf{S}^T\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{y} . \quad (3.16)$$

Er wird auch als BLUE (best linear unbiased estimator) oder *Gauß-Markov-Schätzer* bezeichnet. Genügt \mathbf{v} außerdem einer Normalverteilung, so kann gezeigt werden, dass es im Sinne des Minimum-Varianz-Kriteriums keinen besseren (linearen oder nichtlinearen) erwartungstreuen Schätzer als (3.16) gibt [3.1, 3.5].

Mit dem Schätzer (3.16) lautet die Kovarianzmatrix des Parameterschätzfehlers

$$\mathbf{E}((\hat{\mathbf{p}} - \mathbf{p})(\hat{\mathbf{p}} - \mathbf{p})^T) = \mathbf{K}\mathbf{Q}\mathbf{K}^T = (\mathbf{S}^T\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{S})^{-1} > 0 . \quad (3.17)$$

Sie vergrößert sich also tendenziell mit wachsenden Werten für \mathbf{Q} und sie verkleinert sich tendenziell mit wachsenden Werten für \mathbf{S} und m (Anzahl der Messwerte). Ihre positive Definitheit folgt aus der Zeilenregularität von \mathbf{K} und der Regularität von \mathbf{Q} .

Aufgabe 3.1 (Gewichtete lineare Least-Squares Methode). Zeigen Sie, dass (3.16) die eindeutige Lösung $\tilde{\mathbf{p}}^*$ des quadratischen Optimierungsproblems

$$\min_{\tilde{\mathbf{p}} \in \mathbb{R}^n} (\mathbf{S}\tilde{\mathbf{p}} - \mathbf{y})^T\mathbf{Q}^{-1}(\mathbf{S}\tilde{\mathbf{p}} - \mathbf{y}) \quad (3.18)$$

ist, welche auch als *gewichtete lineare Least-Squares Methode* oder *gewichtete lineare Regression* bezeichnet wird. Berechnen Sie auch die Hessematrix der Kostenfunktion in (3.18) und vergleichen Sie diese mit der Kovarianzmatrix des Parameterschätzfehlers gemäß (3.17).

Beispiel 3.1 (Anfangszustand eines autonomen, zeitdiskreten LTI-Systems). Es soll basierend auf gemessenen Ausgangswerten \mathbf{y}_k mit $k = 0, 1, \dots, N-1$ ein BLUE Schätzer für den Anfangszustand \mathbf{x}_0 des autonomen, zeitdiskreten, linearen, zeitinvarianten Systems

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{A}\mathbf{x}_k \quad (3.19a)$$

$$\mathbf{y}_k = \mathbf{C}\mathbf{x}_k + \mathbf{v}_k \quad (3.19b)$$

entworfen werden. Die zufälligen Messstörungen \mathbf{v}_k sind durch

$$\mathbb{E}(\mathbf{v}_k) = \mathbf{0}, \quad \mathbb{E}(\mathbf{v}_k \mathbf{v}_j^T) = \mathbf{Q}_k \delta_{kj} \quad (3.20)$$

mit $\mathbf{Q}_k > 0$ charakterisiert.

Für die Zustandsfolge ergibt sich die Lösung

$$\mathbf{x}_k = \mathbf{A}^k \mathbf{x}_0, \quad (3.21)$$

so dass für den Ausgang

$$\mathbf{y}_k = \mathbf{C} \mathbf{A}^k \mathbf{x}_0 + \mathbf{v}_k \quad (3.22)$$

folgt. Werden alle gemessenen Ausgangswerte in einem Vektor assembliert, so ergibt sich

$$\underbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{y}_0 \\ \mathbf{y}_1 \\ \vdots \\ \mathbf{y}_{N-1} \end{bmatrix}}_{\mathbf{y}} = \underbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{C} \\ \mathbf{C} \mathbf{A} \\ \vdots \\ \mathbf{C} \mathbf{A}^{N-1} \end{bmatrix}}_{\mathbf{S}} \mathbf{x}_0 + \underbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{v}_0 \\ \mathbf{v}_1 \\ \vdots \\ \mathbf{v}_{N-1} \end{bmatrix}}_{\mathbf{v}}. \quad (3.23)$$

Mit $\mathbf{p} = \mathbf{x}_0$ und der Blockdiagonalmatrix

$$\mathbf{Q} = \begin{bmatrix} \mathbf{Q}_0 & & \mathbf{0} \\ & \ddots & \\ \mathbf{0} & & \mathbf{Q}_{N-1} \end{bmatrix} \quad (3.24)$$

entspricht dies natürlich genau dem linearen Modell (3.1). Der Anfangszustand \mathbf{x}_0 kann daher mit dem BLUE Schätzer (3.16) geschätzt werden, wenn \mathbf{S} spaltenregulär ist. Ob dies der Fall ist, hängt auch von N , also der Anzahl der verfügbaren Messungen ab. Einsetzen von \mathbf{S} und \mathbf{Q} in (3.16) und Ausmultiplizieren liefern

$$\hat{\mathbf{x}}_0 = \mathbf{G}^{-1} \sum_{k=0}^{N-1} (\mathbf{A}^T)^k \mathbf{C}^T \mathbf{Q}_k^{-1} \mathbf{y}_k \quad (3.25)$$

mit der Abkürzung

$$\mathbf{G} = \sum_{k=0}^{N-1} (\mathbf{A}^T)^k \mathbf{C}^T \mathbf{Q}_k^{-1} \mathbf{C} \mathbf{A}^k. \quad (3.26)$$

\mathbf{G} wird (insbesondere für $\mathbf{Q}_k = \mathbf{E}$) als *Gramsche Matrix* (observability Gramian) bezeichnet. Ihre Regularität ist eine Voraussetzung für die eindeutige Schätzbarkeit (vollständige Beobachtbarkeit) von \mathbf{x}_0 . Für die Kovarianzmatrix des Parameterschätzfehlers gilt gemäß (3.17)

$$\mathbb{E}((\hat{\mathbf{x}}_0 - \mathbf{x}_0)(\hat{\mathbf{x}}_0 - \mathbf{x}_0)^T) = \mathbf{G}^{-1} > 0. \quad (3.27)$$

Beispiel 3.2 (Anfangszustand eines autonomen, zeitkontinuierlichen LTI-Systems). Analog zu Beispiel 3.1 soll nun der zeitkontinuierliche Fall betrachtet werden. Es wird basierend auf gemessenen Ausgangswerten $\mathbf{y}(t)$ mit $t \in [0, T]$ ein BLUE Schätzer für den Anfangszustand \mathbf{x}_0 des autonomen, zeitkontinuierlichen, linearen, zeitinvarianten Systems

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{A}\mathbf{x}(t), \quad \mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0 \quad (3.28a)$$

$$\mathbf{y}(t) = \mathbf{C}\mathbf{x}(t) + \mathbf{v}(t) \quad (3.28b)$$

entworfen. Die zufälligen Messstörungen $\mathbf{v}(t)$ sind durch

$$\mathbb{E}(\mathbf{v}(t)) = \mathbf{0}, \quad \mathbb{E}(\mathbf{v}(t)\mathbf{v}^T(\tau)) = \mathbf{Q}(t)\delta(t - \tau) \quad (3.29)$$

mit $\mathbf{Q}(t) > 0$ und der Dirac Delta-Funktion $\delta(t)$ charakterisiert.

Für die Zustandstrajektorie ergibt sich die Lösung

$$\mathbf{x}(t) = \exp(\mathbf{A}t)\mathbf{x}_0, \quad (3.30)$$

so dass für den Ausgang

$$\mathbf{y}(t) = \mathbf{C}\exp(\mathbf{A}t)\mathbf{x}_0 + \mathbf{v}(t) \quad (3.31)$$

folgt.

Anders als in Beispiel 3.1 können nun nicht alle gemessenen Ausgangswerte $\mathbf{y}(t)$ mit $t \in [0, T]$ in einem gemeinsamen Vektor assembliert werden. Es wird daher analog zum finit-dimensionalen Schätzerentwurf (3.16) ein neuer linearer Schätzer für \mathbf{x}_0 entwickelt. Allgemein kann dazu die lineare Abbildung

$$\hat{\mathbf{x}}_0 = \int_0^T \mathbf{K}(t)\mathbf{y}(t) dt \quad (3.32)$$

mit der noch unbekannt Matrix $\mathbf{K}(t)$ angesetzt werden. Damit dieser Schätzer erwartungstreu ist, muss

$$\begin{aligned} \mathbb{E}(\hat{\mathbf{x}}_0) &= \mathbb{E}\left(\int_0^T \mathbf{K}(t)(\mathbf{C}\exp(\mathbf{A}t)\mathbf{x}_0 + \mathbf{v}(t)) dt\right) \\ &= \underbrace{\int_0^T \mathbf{K}(t)\mathbf{C}\exp(\mathbf{A}t) dt}_{\mathbf{E}} \mathbf{x}_0 = \mathbf{x}_0 \end{aligned} \quad (3.33)$$

erfüllt sein. Für die Kovarianzmatrix des Schätzfehlers $\hat{\mathbf{x}}_0 - \mathbf{x}_0$ gilt unter Berücksich-

tigung von (3.29) und (3.33)

$$\begin{aligned}
& \mathbb{E}((\hat{\mathbf{x}}_0 - \mathbf{x}_0)(\hat{\mathbf{x}}_0 - \mathbf{x}_0)^T) \\
&= \mathbb{E} \left(\left(\int_0^T \mathbf{K}(t)(\mathbf{C} \exp(\mathbf{A}t)\mathbf{x}_0 + \mathbf{v}(t)) dt - \mathbf{x}_0 \right) \right. \\
&\quad \left. \left(\int_0^T \mathbf{K}(\tau)(\mathbf{C} \exp(\mathbf{A}\tau)\mathbf{x}_0 + \mathbf{v}(\tau)) d\tau - \mathbf{x}_0 \right)^T \right) \\
&= \mathbb{E} \left(\int_0^T \mathbf{K}(t)\mathbf{v}(t) dt \int_0^T \mathbf{v}^T(\tau)\mathbf{K}^T(\tau) d\tau \right) \tag{3.34} \\
&= \mathbb{E} \left(\int_0^T \int_0^T \mathbf{K}(t)\mathbf{v}(t)\mathbf{v}^T(\tau)\mathbf{K}^T(\tau) d\tau dt \right) \\
&= \int_0^T \int_0^T \mathbf{K}(t) \mathbb{E}(\mathbf{v}(t)\mathbf{v}^T(\tau))\mathbf{K}^T(\tau) d\tau dt \\
&= \int_0^T \mathbf{K}(t)\mathbf{Q}(t)\mathbf{K}^T(t) dt .
\end{aligned}$$

Für die aufsummierten Einzelvarianzen der Schätzfehler $\hat{\mathbf{x}}_0 - \mathbf{x}_0$ ergibt sich damit

$$\begin{aligned}
& \mathbb{E}((\hat{\mathbf{x}}_0 - \mathbf{x}_0)^T(\hat{\mathbf{x}}_0 - \mathbf{x}_0)) = \mathbb{E}(\text{spur}((\hat{\mathbf{x}}_0 - \mathbf{x}_0)(\hat{\mathbf{x}}_0 - \mathbf{x}_0)^T)) \\
&= \int_0^T \text{spur}(\mathbf{K}(t)\mathbf{Q}(t)\mathbf{K}^T(t)) dt = \int_0^T (\mathbf{K}(t)\mathbf{Q}(t)) : \mathbf{K}(t) dt . \tag{3.35}
\end{aligned}$$

Der Schätzer soll diesen Wert minimieren. Zur Bestimmung von $\mathbf{K}(t)$ muss daher die dynamische Optimierungsaufgabe

$$\min_{\mathbf{K}(t)} \int_0^T (\mathbf{K}(t)\mathbf{Q}(t)) : \mathbf{K}(t) dt \tag{3.36a}$$

$$\text{u.B.v. } \dot{\mathbf{Z}}(t) = \mathbf{K}(t)\mathbf{C} \exp(\mathbf{A}t) \tag{3.36b}$$

$$\mathbf{Z}(0) = \mathbf{0} \tag{3.36c}$$

$$\mathbf{Z}(T) = \mathbf{E} \tag{3.36d}$$

gelöst werden, wobei die durch (3.33) definierten isoperimetrischen Beschränkungen durch das Randwertproblem (3.36b)-(3.36d) ersetzt wurden. Die zugehörige Hamiltonfunktion lautet

$$H(t, \mathbf{Z}, \mathbf{K}, \boldsymbol{\Lambda}) = (\mathbf{K}(t)\mathbf{Q}(t)) : \mathbf{K}(t) + (\mathbf{K}(t)\mathbf{C} \exp(\mathbf{A}t)) : \boldsymbol{\Lambda}(t) , \tag{3.37}$$

so dass sich die Optimalitätsbedingungen (erster Ordnung)

$$\dot{\mathbf{Z}}(t) = \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{\Lambda}} = \mathbf{K}(t)\mathbf{C} \exp(\mathbf{A}t) \quad (3.38a)$$

$$\dot{\boldsymbol{\Lambda}}(t) = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{Z}} = \mathbf{0} \quad (3.38b)$$

$$\mathbf{0} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{K}} = 2\mathbf{K}(t)\mathbf{Q}(t) + \boldsymbol{\Lambda}(t) \exp(\mathbf{A}^T t)\mathbf{C}^T \quad (3.38c)$$

ergeben. Daraus folgt

$$\boldsymbol{\Lambda}(t) = \text{konst.} = \boldsymbol{\Lambda} \quad (3.39a)$$

$$\mathbf{K}(t) = -\frac{1}{2}\boldsymbol{\Lambda} \exp(\mathbf{A}^T t)\mathbf{C}^T \mathbf{Q}^{-1}(t) \quad (3.39b)$$

Einsetzen von (3.39b) in (3.33) führt auf

$$\boldsymbol{\Lambda} = -2 \left(\int_0^T \exp(\mathbf{A}^T t)\mathbf{C}^T \mathbf{Q}^{-1}(t)\mathbf{C} \exp(\mathbf{A}t) dt \right)^{-1} \quad (3.40)$$

und schließlich den Schätzer

$$\hat{\mathbf{x}}_0 = \mathbf{G}^{-1} \int_0^T \exp(\mathbf{A}^T t)\mathbf{C}^T \mathbf{Q}^{-1}(t)\mathbf{y}(t) dt \quad (3.41)$$

mit der Abkürzung

$$\mathbf{G} = \int_0^T \exp(\mathbf{A}^T t)\mathbf{C}^T \mathbf{Q}^{-1}(t)\mathbf{C} \exp(\mathbf{A}t) dt . \quad (3.42)$$

\mathbf{G} ist (insbesondere für $\mathbf{Q}(t) = \mathbf{E}$) auch als *Gramsche Matrix* (observability Gramian) bekannt. Ihre Regularität ist eine Voraussetzung für die eindeutige Schätzbarkeit (vollständige Beobachtbarkeit) von \mathbf{x}_0 . Einsetzen von (3.39b) und (3.40) in (3.34) liefert für die Kovarianzmatrix des Schätzfehlers

$$\mathbb{E}((\hat{\mathbf{x}}_0 - \mathbf{x}_0)(\hat{\mathbf{x}}_0 - \mathbf{x}_0)^T) = \mathbf{G}^{-1} > 0 . \quad (3.43)$$

3.1.2 Der Fall einer nicht spaltenregulären Datenmatrix

Ist im Modell (3.1) die Datenmatrix $\mathbf{S} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ nicht spaltenregulär, so existiert für die unbekannt Parameter \mathbf{p} kein linearer erwartungstreuer Schätzer, da die Bedingung (3.6) nicht erfüllbar ist. In diesem Fall liegt eine *Redundanz der Parameter* \mathbf{p} im Modellansatz (3.1) vor. Diese Redundanz äußert sich dadurch, dass unterschiedliche Parameterwerte $\mathbf{p}_1 \neq \mathbf{p}_2$ zu gleichen Erwartungswerten $\mathbf{S}\mathbf{p}_1 = \mathbf{S}\mathbf{p}_2$ des Systemausgangs \mathbf{y} führen können. Es gilt dann

$$\mathbf{S}(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2) = \mathbf{0} \quad (3.44)$$

und \mathbf{p}_1 und \mathbf{p}_2 sind am Ausgang nicht unterscheidbar. Eine Möglichkeit dieses Problem zu umgehen ist eine geänderte Wahl des Modells (3.1), so dass die Datenmatrix \mathbf{S} spaltenregulär ist. Eine zweite Möglichkeit mit dem Problem umzugehen besteht darin, nicht die Werte von \mathbf{p} selbst, sondern die Werte einer linearen Abbildung $\mathbf{T}\mathbf{p}$ von \mathbf{p} mit $\mathbf{T} \in \mathbb{R}^{o \times n}$ zu schätzen. Gemäß (3.44) sind alle Parameterwerte im Kern(\mathbf{S}) der Matrix \mathbf{S} nicht unterscheidbar und daher nicht erwartungstreu schätzbar. Da $\mathbb{R}^n = \text{Kern}(\mathbf{S}) \oplus \text{Bild}(\mathbf{S}^T)$ gilt, sind im Umkehrschluss Parameterwerte genau dann erwartungstreu schätzbar, wenn sie im $\text{Bild}(\mathbf{S}^T)$ liegen. Folglich stellen die Einschränkungen

$$\text{Kern}(\mathbf{S}) \subseteq \text{Kern}(\mathbf{T}) \quad (3.45a)$$

$$\text{Bild}(\mathbf{T}^T) \subseteq \text{Bild}(\mathbf{S}^T) \quad (3.45b)$$

für die Wahl von \mathbf{T} die erwartungstreu Schätzbarkeit der Werte von $\mathbf{T}\mathbf{p}$ sicher. Im nächsten Schritt soll daher ein linearer Schätzer

$$\widehat{\mathbf{T}\mathbf{p}} = \mathbf{K}\mathbf{y} \quad (3.46)$$

für die Werte von $\mathbf{T}\mathbf{p}$ mit gegebenem \mathbf{T} gemäß (3.45) entworfen werden, der erwartungstreu ist und minimale Varianz des Schätzfehlers erreicht. Für Erwartungstreue muss wegen $E(\widehat{\mathbf{T}\mathbf{p}}) = \mathbf{K}\mathbf{S}\mathbf{p}$ die Bedingung

$$\mathbf{K}\mathbf{S} = \mathbf{T} \quad (3.47)$$

erfüllt sein. Sie kann, wie es sein muss, nur erfüllt werden, wenn (3.45b) gilt. Unter Berücksichtigung von (3.47) gilt für die Varianz des Schätzfehlers (Summe der Einzelvarianzen)

$$E(\|\widehat{\mathbf{T}\mathbf{p}} - \mathbf{T}\mathbf{p}\|_2^2) = \text{spur}(\mathbf{K}\mathbf{Q}\mathbf{K}^T) = (\mathbf{K}\mathbf{Q}) : \mathbf{K} . \quad (3.48)$$

Zur Bestimmung von \mathbf{K} ist daher die Optimierungsaufgabe

$$\min_{\mathbf{K} \in \mathbb{R}^{o \times m}} (\mathbf{K}\mathbf{Q}) : \mathbf{K} \quad (3.49a)$$

$$\text{u.B.v.} \quad \mathbf{K}\mathbf{S} - \mathbf{T} = \mathbf{0} \quad (3.49b)$$

zu lösen. Es ist zu beachten, dass hier die Nebenbedingungen (3.49b) wegen der fehlenden Spaltenregularität von \mathbf{S} nicht funktional unabhängig sind, d. h. die LICQ Bedingung ist nicht erfüllt. Folglich können Lagrange-Multiplikatoren aus den KKT-Bedingungen zwar berechnet werden, aber sie sind nicht eindeutig. Abgesehen davon kann die optimale Lösung von (3.49) analog zu Abschnitt 3.1.1 berechnet werden und lautet

$$\mathbf{K} = \mathbf{T}(\mathbf{S}^T\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{S})^\dagger\mathbf{S}^T\mathbf{Q}^{-1} , \quad (3.50)$$

wobei $(\cdot)^\dagger$ die *Pseudoinverse* einer Matrix liefert¹. Der optimale lineare erwartungstreu Schätzer lautet also

¹Die *Pseudoinverse* (Moore-Penrose-Inverse) $\mathbf{A}^\dagger \in \mathbb{R}^{n \times m}$ einer Matrix $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ist durch die Bedingungen

$$\mathbf{A}\mathbf{A}^\dagger\mathbf{A} = \mathbf{A} , \quad \mathbf{A}^\dagger\mathbf{A}\mathbf{A}^\dagger = \mathbf{A}^\dagger , \quad (\mathbf{A}\mathbf{A}^\dagger)^T = \mathbf{A}\mathbf{A}^\dagger , \quad (\mathbf{A}^\dagger\mathbf{A})^T = \mathbf{A}^\dagger\mathbf{A}$$

definiert. Die Pseudoinverse kann mit Hilfe der Singulärwertzerlegung berechnet werden. Für $m \geq n$ lautet diese

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{\Sigma}\mathbf{V}^T$$

$$\widehat{\mathbf{T}\mathbf{p}} = \mathbf{T}(\mathbf{S}^T\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{S})^\dagger\mathbf{S}^T\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{y} \quad (3.51)$$

und für die Kovarianzmatrix des Schätzfehlers gilt

$$\mathbb{E}((\widehat{\mathbf{T}\mathbf{p}} - \mathbf{T}\mathbf{p})(\widehat{\mathbf{T}\mathbf{p}} - \mathbf{T}\mathbf{p})^T) = \mathbf{K}\mathbf{Q}\mathbf{K}^T = \mathbf{T}(\mathbf{S}^T\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{S})^\dagger\mathbf{T}^T. \quad (3.52)$$

Sie ist für zeilenreguläres \mathbf{T} positiv definit.

Aufgabe 3.2. Zeigen Sie, dass der Schätzer (3.51) erwartungstreu ist und unter allen linearen erwartungstreuen Schätzern die minimale Varianz des Schätzfehlers erreicht.

Aufgabe 3.3 (Gewichtete lineare Least-Squares Methode bei nicht spaltenregulärer Datenmatrix). Zeigen Sie, dass (3.51) dem Ausdruck

$$\mathbf{T} \arg \min_{\tilde{\mathbf{p}} \in \mathbb{R}^n} (\mathbf{S}\tilde{\mathbf{p}} - \mathbf{y})^T \mathbf{Q}^{-1} (\mathbf{S}\tilde{\mathbf{p}} - \mathbf{y}) \quad (3.53)$$

entspricht, also dass $\widehat{\mathbf{T}\mathbf{p}} = \mathbf{T}\tilde{\mathbf{p}}^*$ gilt, wobei $\tilde{\mathbf{p}}^*$ die Lösung des quadratischen Optimierungsproblems in (3.53) ist. Untersuchen Sie auch die Eindeutigkeit dieser Lösung. Berechnen Sie ferner die Hessematrix zu diesem Optimierungsproblem und vergleichen Sie diese mit der Kovarianzmatrix des Schätzfehlers gemäß (3.52).

Lösung von Aufgabe 3.3. Das Optimierungsproblem in (3.53) kann in die Form

$$\min_{\tilde{\mathbf{p}} \in \mathbb{R}^n} \tilde{\mathbf{p}}^T \mathbf{S}^T \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{S} \tilde{\mathbf{p}} - 2\mathbf{y}^T \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{S} \tilde{\mathbf{p}} + \mathbf{y}^T \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{y} \quad (3.54)$$

umgeschrieben werden. Die zugehörige Hessematrix lautet daher $\mathbf{S}^T \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{S}$. Sie ist positiv semidefinit, da \mathbf{S} nicht spaltenregulär ist. Folglich kann die Lösung von (3.54) nicht eindeutig sein. Optimale Lösungen existieren aber sicher, da

$$\text{Kern}(\mathbf{S}^T \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{S}) \subseteq \text{Kern}(\mathbf{y}^T \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{S}) \quad (3.55)$$

und folglich

$$2\mathbf{y}^T \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{S} \tilde{\mathbf{p}} > 0 \quad \Rightarrow \quad \tilde{\mathbf{p}}^T \mathbf{S}^T \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{S} \tilde{\mathbf{p}} > 0 \quad (3.56)$$

mit der $m \times n$ Matrix

$$\mathbf{\Sigma} = \begin{bmatrix} \text{diag}\{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n\} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}$$

und unitären Matrizen $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{m \times m}$ und $\mathbf{V} \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Die Pseudoinverse folgt dann in der Form

$$\mathbf{A}^\dagger = \mathbf{V}\mathbf{\Sigma}^\dagger\mathbf{U}^T$$

mit der $n \times m$ Matrix

$$\mathbf{\Sigma}^\dagger = \begin{bmatrix} \text{diag}\{\sigma_1^\dagger, \sigma_2^\dagger, \dots, \sigma_n^\dagger\} & \mathbf{0} \end{bmatrix}$$

und

$$\sigma_i^\dagger = \begin{cases} 0 & \text{für } \sigma_i = 0 \\ \sigma_i^{-1} & \text{sonst.} \end{cases}$$

Analoges gilt für den Fall $m \leq n$.

gilt. Die notwendige Optimalitätsbedingung erster Ordnung für (3.54) lautet

$$2\mathbf{S}^T\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{S}\tilde{\mathbf{p}}^* - 2\mathbf{S}^T\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{y} = \mathbf{0} . \quad (3.57)$$

Sie ist auch hinreichend für ein Optimum, da die Optimierungsaufgabe (3.54) konvex ist. Es gelten nun die Beziehungen

$$\text{Kern}(\mathbf{S}) = \text{Kern}(\mathbf{S}^T\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{S}) \quad (3.58a)$$

$$\text{Bild}(\mathbf{S}^T) = \text{Bild}(\mathbf{S}^T\mathbf{Q}^{-1}) = \text{Bild}(\mathbf{S}^T\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{S}) . \quad (3.58b)$$

Aufgabe 3.4. Zeigen Sie die Gültigkeit dieser Beziehungen.

Lösung von Aufgabe 3.4. Gleichung (3.58a) und $\text{Bild}(\mathbf{S}^T) = \text{Bild}(\mathbf{S}^T\mathbf{Q}^{-1})$ folgen aus der Regularität von \mathbf{Q}^{-1} . Wegen (3.58a) und $\mathbb{R}^n = \text{Kern}(\mathbf{S}) \oplus \text{Bild}(\mathbf{S}^T) = \text{Kern}(\mathbf{S}^T\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{S}) \oplus \text{Bild}(\mathbf{S}^T\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{S})$ gilt $\text{Bild}(\mathbf{S}^T) = \text{Bild}(\mathbf{S}^T\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{S})$.

Wegen (3.58b) ist die Gleichung (3.57) (unabhängig von \mathbf{y}) konsistent, d. h. es existieren stets Lösungen $\tilde{\mathbf{p}}^*$. Jene Anteile von $\tilde{\mathbf{p}}^*$ die im $\text{Kern}(\mathbf{S})$ liegen haben keine Auswirkungen auf (3.54) und (3.57). Dies hat zwei Konsequenzen: a) Eine Lösung $\tilde{\mathbf{p}}^*$ des quadratischen Optimierungsproblems in (3.53) kann nicht eindeutig sein. b) Von Interesse ist insbesondere jener Anteil von $\tilde{\mathbf{p}}^*$ der nicht im $\text{Kern}(\mathbf{S})$ liegt.

$(\mathbf{S}^T\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{S})^\dagger\mathbf{S}^T\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{S}$ ist eine orthogonale Projektionsmatrix, welche jeden Vektor des \mathbb{R}^n in den Zeilenraum der Matrix $\mathbf{S}^T\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{S}$ projiziert. Dieser entspricht wegen der Symmetrie von $\mathbf{S}^T\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{S}$ auch ihrem Spaltenraum und damit dem $\text{Bild}(\mathbf{S}^T)$. Folglich ist $\mathbf{E} - (\mathbf{S}^T\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{S})^\dagger\mathbf{S}^T\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{S}$ eine orthogonale Projektionsmatrix, welche jeden Vektor des \mathbb{R}^n in den Orthogonalraum von $\text{Bild}(\mathbf{S}^T)$, also in den $\text{Kern}(\mathbf{S})$ projiziert. Mit diesen Projektionsmatrizen kann jede Lösung $\tilde{\mathbf{p}}^*$ von (3.57) wie folgt orthogonal zerlegt werden.

$$\tilde{\mathbf{p}}^* = \underbrace{(\mathbf{S}^T\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{S})^\dagger\mathbf{S}^T\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{S}\tilde{\mathbf{p}}^*}_{\tilde{\mathbf{p}}_1^*} + \underbrace{(\mathbf{E} - (\mathbf{S}^T\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{S})^\dagger\mathbf{S}^T\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{S})\tilde{\mathbf{p}}^*}_{\tilde{\mathbf{p}}_0^*} \quad (3.59)$$

Es gilt dann $\tilde{\mathbf{p}}_1^* \in \text{Bild}(\mathbf{S}^T)$ und $\tilde{\mathbf{p}}_0^* \in \text{Kern}(\mathbf{S}) \subseteq \text{Kern}(\mathbf{T})$. Natürlich ist $\tilde{\mathbf{p}}_1^*$ eine partikuläre Lösung von (3.57) und $\tilde{\mathbf{p}}_0^*$ eine homogene Lösung. Der Wert $\tilde{\mathbf{p}}_1^*$ ist eindeutig, da die Projektion der Optimierungsaufgabe (3.54) in das $\text{Bild}(\mathbf{S}^T)$ strikt konvex ist. Folglich ist auch der Schätzwert $\widehat{\mathbf{T}}\mathbf{p} = \mathbf{T}\tilde{\mathbf{p}}^* = \mathbf{T}\tilde{\mathbf{p}}_1^*$ eindeutig.

Aufgabe 3.5. Zeigen Sie, dass für jedes $\tilde{\mathbf{p}}^*$ welches (3.57) erfüllt, der Schätzwert $\mathbf{T}\tilde{\mathbf{p}}^*$ erwartungstreu ist und für die Kovarianzmatrix seines Schätzfehlers

$$\mathbf{E}((\mathbf{T}\tilde{\mathbf{p}}^* - \mathbf{T}\mathbf{p})(\mathbf{T}\tilde{\mathbf{p}}^* - \mathbf{T}\mathbf{p})^T) = \mathbf{T}(\mathbf{S}^T\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{S})^\dagger\mathbf{T}^T \quad (3.60)$$

gilt.

Diese Kovarianzmatrix enthält also die Pseudoinverse der Hessematrix $\mathbf{S}^T \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{S}$ aus der Optimierungsaufgabe (3.54).

Eine mögliche Lösung von (3.57) lautet

$$\tilde{\mathbf{p}}^* = (\mathbf{S}^T \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{S})^\dagger \mathbf{S}^T \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{y} . \quad (3.61)$$

Um dies zu zeigen, wird der Ausdruck (3.61) in (3.57) eingesetzt, was

$$2\mathbf{S}^T \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{S} (\mathbf{S}^T \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{S})^\dagger \mathbf{S}^T \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{y} - 2\mathbf{S}^T \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{y} = \mathbf{0} \quad (3.62)$$

liefert. Die hier auftretende orthogonale Projektionsmatrix $\mathbf{S}^T \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{S} (\mathbf{S}^T \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{S})^\dagger$ projiziert jeden Vektor des \mathbb{R}^n in den Spaltenraum der Matrix $\mathbf{S}^T \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{S}$, welcher dem $\text{Bild}(\mathbf{S}^T)$ entspricht. Aus $\mathbf{S}^T \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{y} \in \text{Bild}(\mathbf{S}^T)$ folgt daher direkt die Gültigkeit der Gleichung (3.62).

Unterzieht man den Ausdruck (3.61) einer orthogonalen Zerlegung gemäß (3.59), so zeigt sich noch

$$\tilde{\mathbf{p}}_1^* = (\mathbf{S}^T \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{S})^\dagger \mathbf{S}^T \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{S} \tilde{\mathbf{p}}^* = (\mathbf{S}^T \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{S})^\dagger \mathbf{S}^T \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{y} = \tilde{\mathbf{p}}^* \quad (3.63a)$$

$$\tilde{\mathbf{p}}_0^* = (\mathbf{E} - (\mathbf{S}^T \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{S})^\dagger \mathbf{S}^T \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{S}) \tilde{\mathbf{p}}^* = \mathbf{0} . \quad (3.63b)$$

Das heißt, für $\tilde{\mathbf{p}}^*$ gemäß (3.61) gilt bereits $\tilde{\mathbf{p}}^* \in \text{Bild}(\mathbf{S}^T)$.

3.1.3 Der singuläre Fall

In diesem Abschnitt wird im Modell (3.1) die Voraussetzung einer positiv definiten Kovarianzmatrix $\mathbf{E}(\mathbf{v}\mathbf{v}^T) = \mathbf{Q}$ aufgegeben. \mathbf{Q} muss daher nur noch positiv semidefinit sein. Ihr Rang wird mit $q = \text{rang}(\mathbf{Q})$ bezeichnet und es gilt $q < m$. Das folgende Lemma besagt, dass \mathbf{v} in diesem Fall auf einen Unterraum des \mathbb{R}^m beschränkt ist.

Lemma 3.1 (Raum der stochastischen Störung). Für eine stochastische Störung \mathbf{v} mit Erwartungswert $\mathbf{E}(\mathbf{v}) = \mathbf{0}$ und Kovarianzmatrix $\mathbf{E}(\mathbf{v}\mathbf{v}^T) = \mathbf{Q}$ gilt

$$\mathbf{v} \in \text{Bild}(\mathbf{Q}) . \quad (3.64)$$

Beweis. Die Störung \mathbf{v} wird in der Form

$$\mathbf{v} = \underbrace{\mathbf{Q}\mathbf{Q}^\dagger \mathbf{v}}_{\mathbf{v}_1} + \underbrace{(\mathbf{E} - \mathbf{Q}\mathbf{Q}^\dagger) \mathbf{v}}_{\mathbf{v}_2} \quad (3.65)$$

orthogonal zerlegt. Offensichtlich gilt

$$\mathbf{E}(\mathbf{v}_2) = \mathbf{0} . \quad (3.66)$$

Außerdem ergibt sich

$$\begin{aligned} E(\mathbf{v}_2 \mathbf{v}_2^T) &= E((\mathbf{E} - \mathbf{Q}\mathbf{Q}^\dagger) \mathbf{v} \mathbf{v}^T (\mathbf{E} - \mathbf{Q}\mathbf{Q}^\dagger)^T) \\ &= (\mathbf{E} - \mathbf{Q}\mathbf{Q}^\dagger) \mathbf{Q} (\mathbf{E} - \mathbf{Q}\mathbf{Q}^\dagger)^T \\ &= (\mathbf{Q} - \mathbf{Q}\mathbf{Q}^\dagger \mathbf{Q}) (\mathbf{E} - \mathbf{Q}\mathbf{Q}^\dagger)^T = \mathbf{0} . \end{aligned} \quad (3.67)$$

Daraus folgt $\mathbf{v}_2 = \mathbf{0}$ und somit gemäß (3.65) die Beziehung (3.64). \square

Weiterhin wird keine Spaltenregularität der Datenmatrix \mathbf{S} im Modell (3.1) gefordert. Dementsprechend gilt analog zu Abschnitt 3.1.2, dass \mathbf{p} nicht erwartungstreu geschätzt werden kann, sondern nur die Werte von $\widehat{\mathbf{T}}\mathbf{p}$ mit gegebenem $\mathbf{T} \in \mathbb{R}^{o \times n}$ welches (3.45) erfüllt. Es soll daher wieder ein Schätzer $\widehat{\mathbf{T}}\mathbf{p}$ für $\mathbf{T}\mathbf{p}$ entworfen werden.

Ursachen für eine singuläre Kovarianzmatrix

Eine Singularität von \mathbf{Q} kann beispielsweise in folgenden Fällen auftreten.

- Es existiert eine konstante Matrix $\mathbf{B} \neq \mathbf{0}$ so, dass jede Realisierung der stochastischen Störung \mathbf{v}

$$\mathbf{0} = \mathbf{B}\mathbf{v} \quad (3.68)$$

erfüllt. Praktisch kann dies folgende Ursachen haben:

- Einzelne Komponenten der stochastischen Störung \mathbf{v} sind streng Null, was beispielsweise bei störungsfreien (exakten) Messungen zutrifft.
- Einzelne Komponenten der stochastischen Störung \mathbf{v} weisen eine lineare Abhängigkeit auf, was beispielsweise bei Messungen mit perfekt korrelierten Störungen zutrifft.

Wegen (3.64) lautet eine Möglichkeit zur Berechnung einer Matrix \mathbf{B} bei bekanntem \mathbf{Q} (siehe [3.3])

$$\mathbf{B} = \mathbf{E} - \mathbf{Q}\mathbf{Q}^\dagger . \quad (3.69)$$

- Wenn die Systemparameter \mathbf{p} eine lineare Gleichung der Art

$$\mathbf{a} = \mathbf{A}\mathbf{p} \quad (3.70)$$

mit konstanten Ausdrücken \mathbf{a} und \mathbf{A} erfüllen müssen, so kann dies berücksichtigt werden, indem ein erweitertes Modell der Form

$$\underbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{y} \\ \mathbf{a} \end{bmatrix}}_{\tilde{\mathbf{y}}} = \underbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{S} \\ \mathbf{A} \end{bmatrix}}_{\tilde{\mathbf{S}}} \mathbf{p} + \underbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{v} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}}_{\tilde{\mathbf{v}}} \quad (3.71)$$

statt (3.1) verwendet wird. Die Kovarianzmatrix $E(\tilde{\mathbf{v}}\tilde{\mathbf{v}}^T) = \begin{bmatrix} \mathbf{Q} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix}$ ist singulär.

- Wenn der Systemausgang \mathbf{y} eine lineare Gleichung der Art

$$\mathbf{a} = \mathbf{A}\mathbf{y} \quad (3.72)$$

mit konstanten Ausdrücken \mathbf{a} und \mathbf{A} erfüllen muss, so gilt nach Einsetzen von

(3.1)

$$\mathbf{a} = \mathbf{A}(\mathbf{S}\mathbf{p} + \mathbf{v}) . \quad (3.73)$$

Wird der Erwartungswert dieser Gleichung berechnet und $E(\mathbf{v}) = \mathbf{0}$ berücksichtigt, so führt dies auf die Bedingung

$$\mathbf{a} = \mathbf{A}\mathbf{S}\mathbf{p} , \quad (3.74)$$

welche äquivalent zu (3.70) behandelt werden kann. Wird (3.74) von (3.73) abgezogen, so ergibt sich die weitere Bedingung

$$\mathbf{0} = \mathbf{A}\mathbf{v} , \quad (3.75)$$

welche äquivalent zu (3.68) interpretiert werden kann.

Die genannten Fälle können auch näherungsweise auftreten. Dann ist \mathbf{Q} zwar nicht streng singulär aber möglicherweise numerisch schlecht konditioniert (großes Verhältnis aus maximalem zu minimalem Eigenwert von \mathbf{Q} , d. h. $\lambda_{\max}/\lambda_{\min} \gg 1$). Auch dann kann es sinnvoll sein, einen der nachfolgend beschriebenen Schätzer zu verwenden [3.6].

Definition 3.1 (Konsistenz der Messwerte). Die Ausgangswerte (Messwerte) \mathbf{y} werden als konsistent mit dem Modell (3.1) bezeichnet, wenn sie

$$\mathbf{y} \in \text{Bild}\left(\begin{bmatrix} \mathbf{S} & \mathbf{Q} \end{bmatrix}\right) \quad (3.76)$$

erfüllen.

In den Abschnitten 3.1.1 und 3.1.2 war die Bedingung (3.76) wegen der Regularität von \mathbf{Q} trivial erfüllt, d. h. beliebige Ausgangswerte \mathbf{y} waren konsistent. Treten im aktuellen Abschnitt Ausgangswerte \mathbf{y} auf die (3.76) (signifikant) verletzen, also nicht konsistent sind, so sollte das Modell (3.1) verbessert werden. Dies kann z. B. durch eine andere Wahl von \mathbf{S} oder \mathbf{Q} erfolgen.

Schätzerentwurf

Es soll ein linearer Schätzer der Form

$$\widehat{\mathbf{T}}\mathbf{p} = \mathbf{K}\mathbf{y} \quad (3.77)$$

für $\mathbf{T}\mathbf{p}$ entworfen werden, der erwartungstreu ist und minimale Varianz des Schätzfehlers sicherstellt. Für Erwartungstreue muss wegen $E(\widehat{\mathbf{T}}\mathbf{p}) = \mathbf{K}\mathbf{S}\mathbf{p}$ wieder die Bedingung (3.47) erfüllt sein. Auch in diesem Fall gilt für die Varianz des Schätzfehlers (3.48). Zur Bestimmung von \mathbf{K} ist daher wieder die Optimierungsaufgabe

$$\min_{\mathbf{K} \in \mathbb{R}^{o \times m}} (\mathbf{K}\mathbf{Q}) : \mathbf{K} \quad (3.78a)$$

$$\text{u.B.v.} \quad \mathbf{K}\mathbf{S} - \mathbf{T} = \mathbf{0} \quad (3.78b)$$

zu lösen. Die zugehörigen KKT-Bedingungen (erster Ordnung) lauten

$$2\mathbf{K}\mathbf{Q} + \mathbf{A}\mathbf{S}^T = \mathbf{0} \quad (3.79a)$$

$$\mathbf{K}\mathbf{S} - \mathbf{T} = \mathbf{0} , \quad (3.79b)$$

bzw. in zusammengefasster Schreibweise

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K} & \mathbf{\Lambda} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2\mathbf{Q} & \mathbf{S} \\ \mathbf{S}^T & \mathbf{0} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{T} \end{bmatrix}. \quad (3.80)$$

Es existieren Lösungen für $\begin{bmatrix} \mathbf{K} & \mathbf{\Lambda} \end{bmatrix}$ sofern (3.45) erfüllt ist. Dann gilt

$$\text{Bild}\left(\begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{T} \end{bmatrix}^T\right) \subseteq \text{Bild}\left(\begin{bmatrix} 2\mathbf{Q} & \mathbf{S} \\ \mathbf{S}^T & \mathbf{0} \end{bmatrix}\right). \quad (3.81)$$

Wegen der Singularität von \mathbf{Q} kann \mathbf{K} im Allgemeinen nicht eindeutig berechnet werden. Eine mögliche Lösung von (3.80) lautet

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K} & \mathbf{\Lambda} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{T} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2\mathbf{Q} & \mathbf{S} \\ \mathbf{S}^T & \mathbf{0} \end{bmatrix}^\dagger. \quad (3.82)$$

Aufgabe 3.6. Zeigen Sie, dass (3.82) die Gleichung (3.80) erfüllt. Berücksichtigen Sie dabei (3.81).

Jede Matrix \mathbf{K} , welche (3.80) erfüllt, ist optimal im Sinne der Optimierungsaufgabe (3.78). Zum Nachweis dieser Aussage muss gezeigt werden, dass keine andere Matrix $\tilde{\mathbf{K}}$, die $\tilde{\mathbf{K}} \neq \mathbf{K}$ und die Nebenbedingung (3.78b) erfüllt, zu einem besseren Kostenfunktionswert (3.78a) führt. Dieser Nachweis folgt unter Beachtung der Identitäten $\text{spur}(\mathbf{K}\mathbf{Q}\mathbf{K}^T) = (\mathbf{K}\mathbf{Q}) : \mathbf{K}$, (3.79a), $\tilde{\mathbf{K}}\mathbf{S} = \mathbf{T} = \mathbf{K}\mathbf{S}$, $\mathbf{Q} \geq 0$ und $\tilde{\mathbf{K}} \neq \mathbf{K}$ aus der Ungleichung

$$\begin{aligned} 0 &\leq \text{spur}((\tilde{\mathbf{K}} - \mathbf{K})\mathbf{Q}(\tilde{\mathbf{K}} - \mathbf{K})^T) \\ &= \text{spur}(\tilde{\mathbf{K}}\mathbf{Q}\tilde{\mathbf{K}}^T) - 2\text{spur}(\mathbf{K}\mathbf{Q}\tilde{\mathbf{K}}^T) + \text{spur}(\mathbf{K}\mathbf{Q}\mathbf{K}^T) \\ &= \text{spur}(\tilde{\mathbf{K}}\mathbf{Q}\tilde{\mathbf{K}}^T) + \text{spur}(\mathbf{\Lambda}\mathbf{S}^T\tilde{\mathbf{K}}^T) + \text{spur}(\mathbf{K}\mathbf{Q}\mathbf{K}^T) \\ &= \text{spur}(\tilde{\mathbf{K}}\mathbf{Q}\tilde{\mathbf{K}}^T) + \text{spur}(\mathbf{\Lambda}\mathbf{T}^T) + \text{spur}(\mathbf{K}\mathbf{Q}\mathbf{K}^T) \\ &= \text{spur}(\tilde{\mathbf{K}}\mathbf{Q}\tilde{\mathbf{K}}^T) + \text{spur}(\mathbf{\Lambda}\mathbf{S}^T\mathbf{K}^T) + \text{spur}(\mathbf{K}\mathbf{Q}\mathbf{K}^T) \\ &= \text{spur}(\tilde{\mathbf{K}}\mathbf{Q}\tilde{\mathbf{K}}^T) - 2\text{spur}(\mathbf{K}\mathbf{Q}\mathbf{K}^T) + \text{spur}(\mathbf{K}\mathbf{Q}\mathbf{K}^T) \\ &= \text{spur}(\tilde{\mathbf{K}}\mathbf{Q}\tilde{\mathbf{K}}^T) - \text{spur}(\mathbf{K}\mathbf{Q}\mathbf{K}^T). \end{aligned} \quad (3.83)$$

Wegen der Singularität von \mathbf{Q} bzw. der im Allgemeinen nicht vorhandenen Eindeutigkeit von \mathbf{K} kann \mathbf{K} gemäß (3.80) nicht strikt optimal sein.

Mit einem erwartungstreuen Schätzer (3.77) lautet die Kovarianzmatrix des Parameterschätzfehlers

$$\mathbb{E}((\widehat{\mathbf{T}}_{\mathbf{p}} - \mathbf{T}_{\mathbf{p}})(\widehat{\mathbf{T}}_{\mathbf{p}} - \mathbf{T}_{\mathbf{p}})^T) = \mathbf{K}\mathbf{Q}\mathbf{K}^T \geq 0. \quad (3.84)$$

Im Falle einer regulären Kovarianzmatrix \mathbf{Q} konnte in den Aufgaben 3.1 und 3.3 mit der gewichteten linearen Least-Squares Methode jeweils eine unbeschränkte Optimierungsaufgabe formuliert werden, deren Lösung zum exakt gleichen optimalen linearen erwartungstreuen Schätzer für \mathbf{p} bzw. $\mathbf{T}_{\mathbf{p}}$ führt. Als Gewichtungsmatrix in der Optimierungsaufgabe wurde jeweils \mathbf{Q}^{-1} verwendet. Im aktuellen Fall einer singulären Kovarianzmatrix \mathbf{Q} kann keine solche unbeschränkte Optimierungsaufgabe formuliert werden.

Transformation des Modells

Als Alternative zum obigen Schätzerentwurf wird eine Transformation des Modells (3.1) vorgestellt, die ein reduziertes Modell mit regulärer Kovarianzmatrix der Störung liefert. Dies führt im Allgemeinen nicht auf einen Schätzer mit \mathbf{K} gemäß (3.82).

Im Falle einer singulären Kovarianzmatrix \mathbf{Q} enthält der Vektor \mathbf{v} der stochastischen Störung redundante Information. Um diese Redundanz noch klarer darzustellen und schließlich zu beseitigen, wird das Modell (3.1) in einen stochastischen und einen deterministischen Teil transformiert. Man wählt dazu eine reguläre Matrix $\begin{bmatrix} \mathbf{V}_1 \\ \mathbf{V}_2 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{m \times m}$ so, dass

$$\mathbf{V}_1^T \in \text{Bild}(\mathbf{Q}) \quad (3.85a)$$

$$\mathbf{V}_2^T \in \text{Kern}(\mathbf{Q}) \quad (3.85b)$$

gilt. Eine solche Matrix kann z. B. erstellt werden, indem ihre Zeilen die aus der Singulärwertzerlegung von $\mathbf{Q} = \mathbf{U} \text{diag}\{\sigma_1, \sigma_2, \dots\} \mathbf{U}^T$ folgenden Singulärvektoren enthalten, d. h. $\begin{bmatrix} \mathbf{V}_1^T & \mathbf{V}_2^T \end{bmatrix} = \mathbf{U}$. Wird das Modell (3.1) linksseitig einmal mit \mathbf{V}_1 und einmal mit \mathbf{V}_2 multipliziert, so ergibt sich das transformierte Modell

$$\mathbf{V}_1 \mathbf{y} = \mathbf{V}_1 \mathbf{S} \mathbf{p} + \mathbf{V}_1 \mathbf{v} \quad (3.86a)$$

$$\mathbf{V}_2 \mathbf{y} = \mathbf{V}_2 \mathbf{S} \mathbf{p}, \quad (3.86b)$$

wobei (3.86a) den stochastischen und (3.86b) den deterministischen Teil enthält. Die stochastische Störung $\tilde{\mathbf{v}} = \mathbf{V}_1 \mathbf{v}$ hat die Dimension q . Ihre Kovarianzmatrix lautet

$$E(\tilde{\mathbf{v}} \tilde{\mathbf{v}}^T) = E(\mathbf{V}_1 \mathbf{v} \mathbf{v}^T \mathbf{V}_1^T) = \mathbf{V}_1 \mathbf{Q} \mathbf{V}_1^T \quad (3.87)$$

und ist wegen (3.85a) regulär. Damit ist es gelungen die eingangs erwähnte Redundanz in \mathbf{v} zu beseitigen.

Bemerkung 3.1 (Beschränkte gewichtete lineare Least-Squares Methode). Es kann nun die beschränkte gewichtete lineare Least-Squares Optimierungsaufgabe

$$\widehat{\mathbf{T}}\mathbf{p} = \mathbf{T} \arg \min_{\mathbf{p} \in \mathbb{R}^n} (\mathbf{S}\tilde{\mathbf{p}} - \mathbf{y})^T \mathbf{V}_1^T (\mathbf{V}_1 \mathbf{Q} \mathbf{V}_1^T)^{-1} \mathbf{V}_1 (\mathbf{S}\tilde{\mathbf{p}} - \mathbf{y}) \quad (3.88a)$$

$$\text{u.B.v. } \mathbf{V}_2 \mathbf{y} = \mathbf{V}_2 \mathbf{S}\tilde{\mathbf{p}} \quad (3.88b)$$

formuliert und gelöst werden. Dessen Hessematrix lautet $\mathbf{S}^T \mathbf{V}_1^T (\mathbf{V}_1 \mathbf{Q} \mathbf{V}_1^T)^{-1} \mathbf{V}_1 \mathbf{S}$ und ist im Allgemeinen nur positiv semidefinit, weshalb die Lösung von (3.88) nicht eindeutig sein kann. Optimale Lösungen existieren aber sicher, was analog zur Lösung der Aufgabe 3.3 gezeigt kann. Im Weiteren wird ein alternativer Weg zum Entwurf eines Schätzers $\widehat{\mathbf{T}}\mathbf{p}$ (basierend auf bisherigen Ergebnissen und ohne ein weiteres Optimierungsproblem) beschrieben.

Um bei der Schätzung die Zwangsbedingung (3.86b) automatisch zu berücksichtigen, kann der Parametervektor \mathbf{p} in der Form

$$\mathbf{p} = (\mathbf{V}_2\mathbf{S})^\dagger\mathbf{V}_2\mathbf{y} + (\mathbf{E} - (\mathbf{V}_2\mathbf{S})^\dagger\mathbf{V}_2\mathbf{S})\tilde{\mathbf{p}} \quad (3.89)$$

mit neuen Parametern $\tilde{\mathbf{p}} \in \mathbb{R}^n$ dargestellt werden. Der erste Summand ist eine partikuläre Lösung von (3.86b), wie leicht durch Einsetzen in (3.86b) und Berücksichtigung von (3.1), Lemma 3.1 und (3.85b) gezeigt werden kann. Der zweite Summand ist eine homogene Lösung von (3.86b), was sofort durch Einsetzen in den homogenen Teil von (3.86b) gezeigt werden kann. Unter Verwendung von (3.89) kann das Modell (3.86) auf die Form

$$\underbrace{\mathbf{V}_1(\mathbf{E} - \mathbf{S}(\mathbf{V}_2\mathbf{S})^\dagger\mathbf{V}_2)\mathbf{y}}_{\tilde{\mathbf{y}}} = \underbrace{\mathbf{V}_1\mathbf{S}(\mathbf{E} - (\mathbf{V}_2\mathbf{S})^\dagger\mathbf{V}_2\mathbf{S})}_{\tilde{\mathbf{S}}}\tilde{\mathbf{p}} + \underbrace{\mathbf{V}_1\mathbf{v}}_{\tilde{\mathbf{v}}} \quad (3.90)$$

reduziert werden.

Wegen (3.85b) und $\mathbf{V}_2\mathbf{S}(\mathbf{E} - (\mathbf{V}_2\mathbf{S})^\dagger\mathbf{V}_2\mathbf{S}) = \mathbf{0}$ gilt

$$\text{Bild}(\mathbf{S}(\mathbf{E} - (\mathbf{V}_2\mathbf{S})^\dagger\mathbf{V}_2\mathbf{S})) \subseteq \text{Bild}(\mathbf{Q}) . \quad (3.91)$$

Daraus folgt gemeinsam mit (3.85a)

$$\text{Kern}(\mathbf{V}_1\mathbf{S}(\mathbf{E} - (\mathbf{V}_2\mathbf{S})^\dagger\mathbf{V}_2\mathbf{S})) = \text{Kern}(\mathbf{S}(\mathbf{E} - (\mathbf{V}_2\mathbf{S})^\dagger\mathbf{V}_2\mathbf{S})) \quad (3.92)$$

und schließlich wegen (3.45a)

$$\text{Kern}(\underbrace{\mathbf{V}_1\mathbf{S}(\mathbf{E} - (\mathbf{V}_2\mathbf{S})^\dagger\mathbf{V}_2\mathbf{S})}_{\tilde{\mathbf{S}}}) \subseteq \text{Kern}(\underbrace{\mathbf{T}(\mathbf{E} - (\mathbf{V}_2\mathbf{S})^\dagger\mathbf{V}_2\mathbf{S})}_{\tilde{\mathbf{T}}}) . \quad (3.93)$$

Damit ist sichergestellt, dass mit dem Modell (3.90) und der Methode aus Abschnitt 3.1.2 ein eindeutiger Schätzwert $\widehat{\tilde{\mathbf{T}}\tilde{\mathbf{p}}}$ für $\tilde{\mathbf{T}}\tilde{\mathbf{p}} = \mathbf{T}(\mathbf{E} - (\mathbf{V}_2\mathbf{S})^\dagger\mathbf{V}_2\mathbf{S})\tilde{\mathbf{p}}$ berechnet werden kann. Unter Verwendung von (3.89) folgt daraus schließlich der gesuchte Schätzer

$$\widehat{\mathbf{T}}\tilde{\mathbf{p}} = \mathbf{T}(\mathbf{V}_2\mathbf{S})^\dagger\mathbf{V}_2\mathbf{y} + \widehat{\tilde{\mathbf{T}}\tilde{\mathbf{p}}} . \quad (3.94)$$

3.2 Parameterschätzung für ein nichtlineares Modell

Von einem System sind die zu einem Vektor zusammengefassten Ausgangswerte $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^m$ (z. B. aus Messungen) verfügbar. Für sie wird ein nichtlineares Modell der Form

$$\mathbf{y} = \mathbf{h}(\mathbf{p}) + \mathbf{v} \quad (3.95)$$

mit unbekanntem Systemparametern $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^n$ angenommen. Hierbei ist die deterministische Abbildung $\mathbf{h} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ bekannt und \mathbf{v} ist eine stochastische Störung (Zufallszahl) mit Erwartungswert $E(\mathbf{v}) = \mathbf{0}$ und bekannter, symmetrischer, positiv semidefinierter Kovarianzmatrix $E(\mathbf{v}\mathbf{v}^\text{T}) = \mathbf{Q} \geq 0$. Die Verteilung von \mathbf{v} kann beliebig und unbekannt sein.

Es soll ein Schätzer $\hat{\mathbf{p}}$ für die unbekanntem Parameter \mathbf{p} entworfen werden. Vorbereitend dafür werden zunächst Möglichkeiten zur Berechnung der Ableitung von \mathbf{h} bezüglich \mathbf{p} vorgestellt.

Berechnung der Jacobi-Matrix $(\nabla \mathbf{h})(\mathbf{p})$

Die Berechnung der Jacobi-Matrix

$$(\nabla \mathbf{h})(\mathbf{p}) = \left(\frac{\partial \mathbf{h}}{\partial \mathbf{p}} \right)^T = \begin{bmatrix} \frac{\partial h_1}{\partial p_1} & \dots & \frac{\partial h_m}{\partial p_1} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial h_1}{\partial p_n} & \dots & \frac{\partial h_m}{\partial p_n} \end{bmatrix} \quad (3.96)$$

kann z. B. mit den im Skriptum Optimierung [3.7] erläuterten Verfahren analytisch oder näherungsweise numerisch erfolgen. Ergänzend werden hier für den Fall, dass die Abbildung $\mathbf{h}(\mathbf{p})$ die Lösung eines zeitkontinuierlichen oder zeitdiskreten dynamischen Systems beinhaltet, mögliche Berechnungswege für $(\nabla \mathbf{h})(\mathbf{p})$ vorgestellt.

- Setzt sich $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^m$ aus den zu diskreten Zeitpunkten t_k mit $k = 0, \dots, N-1$ aufgenommenen Messungen $\bar{\mathbf{y}}(t_k)$ eines Systemausgangs zusammen und wird das System durch das *zeitkontinuierliche dynamische Modell*

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{f}(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{p}) \quad t \geq t_0 \quad (3.97a)$$

$$\mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0(\mathbf{p}) \quad (3.97b)$$

$$\bar{\mathbf{y}}(t) = \bar{\mathbf{h}}(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{p}) + \bar{\mathbf{v}}(t) \quad t \geq t_0 \quad (3.97c)$$

beschrieben, so gilt

$$\mathbf{y} = \left[\bar{\mathbf{y}}^T(t_0) \quad \dots \quad \bar{\mathbf{y}}^T(t_{N-1}) \right]^T \quad (3.98a)$$

$$\mathbf{h}(\mathbf{p}) = \left[\bar{\mathbf{h}}^T(t_0, \mathbf{x}(t_0), \mathbf{p}) \quad \dots \quad \bar{\mathbf{h}}^T(t_{N-1}, \mathbf{x}(t_{N-1}), \mathbf{p}) \right]^T. \quad (3.98b)$$

Nach Berechnung der Zustandstrajektorie $\mathbf{x}(t)$ kann die Sensitivität

$$\mathbf{X}(t) := \frac{d\mathbf{x}(t)}{d\mathbf{p}} \quad (3.99)$$

von $\mathbf{x}(t)$ bezüglich \mathbf{p} durch Lösung der Anfangswertaufgabe (Sensitivitätsdifferentialgleichung)

$$\dot{\mathbf{X}}(t) = \frac{\partial \mathbf{f}(t, \mathbf{x}, \mathbf{p})}{\partial \mathbf{x}} \Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}(t)} \mathbf{X}(t) + \frac{\partial \mathbf{f}(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} \quad t \geq t_0 \quad (3.100a)$$

$$\mathbf{X}(t_0) = \frac{d\mathbf{x}_0(\mathbf{p})}{d\mathbf{p}} \quad (3.100b)$$

ermittelt werden. Damit kann die Ableitung

$$\frac{d\bar{\mathbf{h}}(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{p})}{d\mathbf{p}} = \frac{\partial \bar{\mathbf{h}}(t, \mathbf{x}, \mathbf{p})}{\partial \mathbf{x}} \Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}(t)} \mathbf{X}(t) + \frac{\partial \bar{\mathbf{h}}(t, \mathbf{x}(t), \mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} \quad (3.101)$$

zu den Messzeitpunkten $t = t_k$ ausgewertet und zur Jacobi-Matrix

$$(\nabla \mathbf{h})(\mathbf{p}) = \left[\left(\frac{d\bar{\mathbf{h}}(t_0, \mathbf{x}(t_0), \mathbf{p})}{d\mathbf{p}} \right)^T \quad \dots \quad \left(\frac{d\bar{\mathbf{h}}(t_{N-1}, \mathbf{x}(t_{N-1}), \mathbf{p})}{d\mathbf{p}} \right)^T \right] \quad (3.102)$$

assembliert werden. Für eine speichereffiziente Implementierung sollten die Integration von (3.97a) und (3.100a) und die Assemblierung von (3.102) synchron durchgeführt werden. Dann kann auf eine Speicherung der Trajektorien $\mathbf{x}(t)$ und $\mathbf{X}(t)$ verzichtet werden.

- Setzt sich $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^m$ aus den zeitdiskreten Messungen $\bar{\mathbf{y}}_k$ mit $k = 0, \dots, N-1$ eines Systemausgangs zusammen und wird das System durch das *zeitdiskrete dynamische Modell*

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{f}_k(\mathbf{x}_k, \mathbf{p}) \quad k \geq 0 \quad (3.103a)$$

$$\mathbf{x}_0 = \mathbf{x}_0(\mathbf{p}) \quad (3.103b)$$

$$\bar{\mathbf{y}}_k = \bar{\mathbf{h}}_k(\mathbf{x}_k, \mathbf{p}) + \bar{\mathbf{v}}_k \quad k \geq 0 \quad (3.103c)$$

beschrieben, so gilt

$$\mathbf{y} = [\bar{\mathbf{y}}_0^T \quad \dots \quad \bar{\mathbf{y}}_{N-1}^T]^T \quad (3.104a)$$

$$\mathbf{h}(\mathbf{p}) = [\bar{\mathbf{h}}_0^T(\mathbf{x}_0, \mathbf{p}) \quad \dots \quad \bar{\mathbf{h}}_{N-1}^T(\mathbf{x}_{N-1}, \mathbf{p})]^T. \quad (3.104b)$$

In diesem Fall kann $(\nabla \mathbf{h})(\mathbf{p})$ direkt durch Nachdifferenzieren (Anwendung der Kettenregel) berechnet werden. Zur übersichtlichen Darstellung kann (analog zum zeitkontinuierlichen Fall) auch hier die Sensitivität

$$\mathbf{X}_k := \frac{d\mathbf{x}_k}{d\mathbf{p}} \quad (3.105)$$

definiert und mittels der Differenzgleichung

$$\mathbf{X}_{k+1} = \frac{\partial \mathbf{f}_k(\mathbf{x}_k, \mathbf{p})}{\partial \mathbf{x}_k} \mathbf{X}_k + \frac{\partial \mathbf{f}_k(\mathbf{x}_k, \mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} \quad k \geq 0 \quad (3.106a)$$

$$\mathbf{X}_0 = \frac{d\mathbf{x}_0(\mathbf{p})}{d\mathbf{p}} \quad (3.106b)$$

berechnet werden. Damit kann die Ableitung

$$\frac{d\bar{\mathbf{h}}_k(\mathbf{x}_k, \mathbf{p})}{d\mathbf{p}} = \frac{\partial \bar{\mathbf{h}}_k(\mathbf{x}_k, \mathbf{p})}{\partial \mathbf{x}_k} \mathbf{X}_k + \frac{\partial \bar{\mathbf{h}}_{N-1}(\mathbf{x}_{N-1}, \mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} \quad (3.107)$$

ausgewertet und zur Jacobi-Matrix

$$(\nabla \mathbf{h})(\mathbf{p}) = \left[\left(\frac{d\bar{\mathbf{h}}_0(\mathbf{x}_0, \mathbf{p})}{d\mathbf{p}} \right)^T \quad \dots \quad \left(\frac{d\bar{\mathbf{h}}_{N-1}(\mathbf{x}_{N-1}, \mathbf{p})}{d\mathbf{p}} \right)^T \right] \quad (3.108)$$

assembliert werden.

3.2.1 Der reguläre Fall

Für das Modell (3.95) mit einer bekannten, symmetrischen, positiv definiten Kovarianzmatrix $E(\mathbf{v}\mathbf{v}^T) = \mathbf{Q} > 0$ soll nun ein Schätzer

$$\hat{\mathbf{p}} = \mathbf{k}(\mathbf{y}) \quad (3.109)$$

für die unbekannt Parameter \mathbf{p} entworfen werden. Ohne weitere Kenntnisse über die Verteilung von \mathbf{v} kann hier wegen der Nichtlinearität der Funktion \mathbf{h} im Allgemeinen kein Schätzer $\mathbf{k}(\cdot)$ konstruiert werden, der stochastische Eigenschaften wie Erwartungstreue

$$\mathbb{E}(\hat{\mathbf{p}}) = \mathbb{E}(\mathbf{k}(\mathbf{h}(\mathbf{p}) + \mathbf{v})) = \mathbf{p} \quad (3.110)$$

und minimale Varianz des Parameterschätzfehlers

$$\min_{\mathbf{k}(\cdot)} \mathbb{E}(\|\hat{\mathbf{p}} - \mathbf{p}\|_2^2) = \mathbb{E}(\|\mathbf{k}(\mathbf{h}(\mathbf{p}) + \mathbf{v}) - \mathbf{p}\|_2^2) \quad (3.111)$$

sicherstellt. Selbst wenn die Verteilung von \mathbf{v} bekannt ist, ist die Konstruktion eines solchen Schätzers aus zumindest zwei Gründen eine schwierige Aufgabe: a) Die durch (3.110) beschränkte Optimierungsaufgabe (3.111) ist infinit-dimensional. b) In (3.110) und (3.111) sind Erwartungswerte von nichtlinear transformierten Zufallsgrößen zu berechnen (siehe z. B. [3.8–3.10]). Wahrscheinlichkeitstheoretische Überlegungen dazu werden in Abschnitt 3.2.4 angestellt. Ohne diese Überlegungen kann zunächst ein Schätzer mit Hilfe der gewichteten Least-Squares Methode entworfen werden.

Für das lineare Modell (3.1) hat sich in Aufgabe 3.1 gezeigt, dass die gewichtete lineare Least-Squares Methode den gleichen erwartungstreuen linearen Schätzer liefert wie die Minimierung der Varianz des Parameterschätzfehlers. Für das nichtlineare Modell (3.95) gilt dieser Zusammenhang im Allgemeinen nicht. Basierend auf den Ergebnissen der Aufgabe 3.1 erscheint es aber sinnvoll, hier die gewichtete nichtlineare Least-Squares Optimierungsaufgabe

$$\hat{\mathbf{p}} = \mathbf{k}(\mathbf{y}) = \arg \min_{\tilde{\mathbf{p}} \in \mathbb{R}^n} (\mathbf{h}(\tilde{\mathbf{p}}) - \mathbf{y})^T \mathbf{W} (\mathbf{h}(\tilde{\mathbf{p}}) - \mathbf{y}) \quad (3.112)$$

mit der Gewichtungsmatrix $\mathbf{W} = \mathbf{Q}^{-1} \geq 0$ zu lösen. Grundsätzlich muss \mathbf{W} symmetrisch und positiv semidefinit sein.

Die Optimierungsaufgabe (3.112) kann z. B. iterativ mit der Newton-Methode oder der Gauss-Newton-Methode gelöst werden (siehe [3.7]). Ein Iterationsschritt der Gauss-Newton-Methode lautet

$$\tilde{\mathbf{p}}_{k+1} = \tilde{\mathbf{p}}_k - \left((\nabla \mathbf{h})(\tilde{\mathbf{p}}_k) \mathbf{W} (\nabla \mathbf{h})^T(\tilde{\mathbf{p}}_k) \right)^{-1} (\nabla \mathbf{h})(\tilde{\mathbf{p}}_k) \mathbf{W} (\mathbf{h}(\tilde{\mathbf{p}}_k) - \mathbf{y}) . \quad (3.113)$$

Damit die Matrix $(\nabla \mathbf{h})(\tilde{\mathbf{p}}_k) \mathbf{W} (\nabla \mathbf{h})^T(\tilde{\mathbf{p}}_k)$ invertierbar ist, muss $(\nabla \mathbf{h})(\tilde{\mathbf{p}}_k)$ zeilenregulär sein.

Für den Spezialfall $\mathbf{h}(\mathbf{p}) = \mathbf{S}\mathbf{p}$, d. h. bei einem linearen Modell, liefern die Newton-Methode und die Gauss-Newton-Methode identische Iterationsvorschriften und konvergieren in einem Schritt. Es liegt also dann eine analytische Lösung vor und es gilt $(\nabla \mathbf{h})(\mathbf{p}) = \mathbf{S}^T$, womit sich (3.113) zum Schätzer (3.16) vereinfacht.

Es zeigt sich also, dass ein lineares Modell erhebliche Vorteile gegenüber einem nichtlinearen Modell besitzt. Nachfolgend wird eine Möglichkeit gezeigt, wie diese Vorteile zumindest teilweise genutzt werden können, wenn manche der zu schätzenden Parameter linear auftreten.

Separierung in linear und nichtlinear auftretende Parameter

Häufig kann ein nichtlineares Modell (3.95) in der Form

$$\mathbf{y} = \mathbf{h}_0(\mathbf{p}_{\text{nonlin}}) + \mathbf{H}(\mathbf{p}_{\text{nonlin}})\mathbf{p}_{\text{lin}} + \mathbf{v} \quad (3.114)$$

dargestellt werden, d. h. mit separierten linearen Parametern \mathbf{p}_{lin} und nichtlinearen Parametern $\mathbf{p}_{\text{nonlin}}$, welche im Vektor $\mathbf{p} = \begin{bmatrix} \mathbf{p}_{\text{nonlin}}^T & \mathbf{p}_{\text{lin}}^T \end{bmatrix}^T$ zusammengefasst werden. Damit lautet die Optimierungsaufgabe in (3.112)

$$\min_{\tilde{\mathbf{p}} \in \mathbb{R}^n} (\mathbf{h}_0(\tilde{\mathbf{p}}_{\text{nonlin}}) + \mathbf{H}(\tilde{\mathbf{p}}_{\text{nonlin}})\tilde{\mathbf{p}}_{\text{lin}} - \mathbf{y})^T \mathbf{W} (\mathbf{h}_0(\tilde{\mathbf{p}}_{\text{nonlin}}) + \mathbf{H}(\tilde{\mathbf{p}}_{\text{nonlin}})\tilde{\mathbf{p}}_{\text{lin}} - \mathbf{y}) . \quad (3.115)$$

Analog zu Abschnitt 3.1.1 lautet der BLUE Schätzer für \mathbf{p}_{lin} daher

$$\hat{\mathbf{p}}_{\text{lin}} = \left(\mathbf{H}^T(\tilde{\mathbf{p}}_{\text{nonlin}}) \mathbf{W} \mathbf{H}(\tilde{\mathbf{p}}_{\text{nonlin}}) \right)^{-1} \mathbf{H}^T(\tilde{\mathbf{p}}_{\text{nonlin}}) \mathbf{W} (\mathbf{y} - \mathbf{h}_0(\tilde{\mathbf{p}}_{\text{nonlin}})) . \quad (3.116)$$

Einsetzen dieser Lösung in (3.115) liefert die nichtlineare Optimierungsaufgabe

$$\min_{\tilde{\mathbf{p}}_{\text{nonlin}}} (\mathbf{h}_0(\tilde{\mathbf{p}}_{\text{nonlin}}) - \mathbf{y})^T \left(\mathbf{W} - \mathbf{W} \mathbf{H}(\tilde{\mathbf{p}}_{\text{nonlin}}) \left(\mathbf{H}^T(\tilde{\mathbf{p}}_{\text{nonlin}}) \mathbf{W} \mathbf{H}(\tilde{\mathbf{p}}_{\text{nonlin}}) \right)^{-1} \mathbf{H}^T(\tilde{\mathbf{p}}_{\text{nonlin}}) \mathbf{W} \right) (\mathbf{h}_0(\tilde{\mathbf{p}}_{\text{nonlin}}) - \mathbf{y}) , \quad (3.117)$$

welche aufgrund ihrer reduzierten Dimension häufig mit geringerem Rechenaufwand als (3.115) gelöst werden kann. Rückeinsetzen der Lösung $\hat{\mathbf{p}}_{\text{nonlin}}$ aus (3.117) in (3.116) liefert den Wert $\hat{\mathbf{p}}_{\text{lin}}$.

Transformation auf lineares Modell

In seltenen Fällen kann ein (lokaler) Diffeomorphismus (bijektive, stetig differenzierbare Abbildung, deren Umkehrabbildung auch stetig differenzierbar ist) $\mathbf{p} = \mathbf{g}(\mathbf{p}_{\text{lin}})$ so gefunden werden, dass

$$\mathbf{h}(\mathbf{g}(\mathbf{p}_{\text{lin}})) = \mathbf{S}\mathbf{p}_{\text{lin}} \quad (3.118)$$

gilt. Dann kann das nichtlineare Modell (3.95) auf die lineare Form

$$\mathbf{y} = \mathbf{S}\mathbf{p}_{\text{lin}} + \mathbf{v} \quad (3.119)$$

vereinfacht werden. Gelingt dies nicht, so kann möglicherweise zumindest ein (lokaler) Diffeomorphismus $\mathbf{p} = \mathbf{g}(\mathbf{p}_{\text{nonlin}}, \mathbf{p}_{\text{lin}})$ gefunden werden, mit dem sich das nichtlineare Modell (3.95) auf die separierbare Form (3.114) vereinfachen lässt.

Beispiel 3.3 (Schätzung unbekannter harmonischer Signale). Ein skalares Ausgangssignal wird gemessen, mit einer Periodendauer von 1 s abgetastet und im Vektor $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^m$ zusammengefasst, d. h. $\mathbf{y} = [y_k]_{k=0, \dots, m-1}$. Diese Messwerte beinhalten eine stochastische Störung \mathbf{v} mit Erwartungswert $E(\mathbf{v}) = \mathbf{0}$ und symmetrischer, positiv definierter Kovarianzmatrix $E(\mathbf{v}\mathbf{v}^T) = q\mathbf{E} \geq \mathbf{0}$, wobei $q > 0$ unbekannt ist. Die Messwerte sind in Abbildung 3.1 dargestellt.

Bemerkung 3.2. Die in Abbildung 3.1 gezeigten Werte wurden algorithmisch generiert. Dabei wurde zum eigentlichen Signal eine im Intervall $[-2.5, 2.5]$ gleichverteilte zufällige Störung addiert. Das Signal-Rausch-Verhältnis beträgt etwa 0 dB.

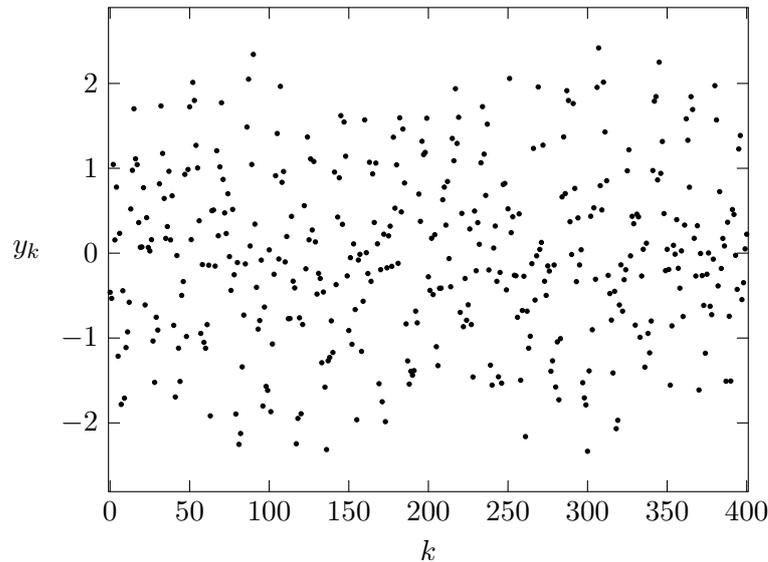


Abbildung 3.1: Messwerte.

Es ist bekannt, dass das ungestörte Ausgangssignal durch Addition zweier harmonischer Signale entstand. Es sollen alle Parameter (Amplitude, Frequenz und Phase) dieser harmonischen Signale geschätzt werden. Es kann daher das Modell

$$y_k = A_1 \cos(2\pi f_1 k + \varphi_1) + A_2 \cos(2\pi f_2 k + \varphi_2) + v_k \quad (3.120)$$

verwendet werden. Von den zu schätzenden Größen $\mathbf{p} = [A_1 \ A_2 \ \varphi_1 \ \varphi_2 \ f_1 \ f_2]^T$ treten hier nur A_1 und A_2 in linearer Form auf. Eine Transformation auf ein lineares Modell ist nicht möglich. Mit dem lokalen Diffeomorphismus

$$\mathbf{p} = \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \\ \varphi_1 \\ \varphi_2 \\ f_1 \\ f_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{p_{\text{lin},1}^2 + p_{\text{lin},2}^2} \\ \sqrt{p_{\text{lin},3}^2 + p_{\text{lin},4}^2} \\ \arctan\left(\frac{-p_{\text{lin},2}}{p_{\text{lin},1}}\right) \\ \arctan\left(\frac{-p_{\text{lin},4}}{p_{\text{lin},3}}\right) \\ p_{\text{nonlin},1} \\ p_{\text{nonlin},2} \end{bmatrix}, \quad (3.121a)$$

dessen Umkehrabbildung

$$\begin{bmatrix} \mathbf{p}_{\text{nlín}} \\ \mathbf{p}_{\text{lín}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} p_{\text{nlín},1} \\ p_{\text{nlín},2} \\ p_{\text{lín},1} \\ p_{\text{lín},2} \\ p_{\text{lín},3} \\ p_{\text{lín},4} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ A_1 \cos(\varphi_1) \\ -A_1 \sin(\varphi_1) \\ A_2 \cos(\varphi_2) \\ -A_2 \sin(\varphi_2) \end{bmatrix} \quad (3.121\text{b})$$

lautet, kann das Modell aber zumindest in die separierbare Form

$$\begin{aligned} y_k = & p_{\text{lín},1} \cos(2\pi p_{\text{nlín},1}k) + p_{\text{lín},2} \sin(2\pi p_{\text{nlín},1}k) \\ & + p_{\text{lín},3} \cos(2\pi p_{\text{nlín},2}k) + p_{\text{lín},4} \sin(2\pi p_{\text{nlín},2}k) + v_k \end{aligned} \quad (3.122)$$

und somit die Darstellung (3.114) mit

$$\mathbf{h}_0(\mathbf{p}_{\text{nlín}}) = \mathbf{0} \quad (3.123\text{a})$$

$$\mathbf{H}(\mathbf{p}_{\text{nlín}}) = \begin{bmatrix} \mathbf{H}_0(\mathbf{p}_{\text{nlín}}) \\ \mathbf{H}_1(\mathbf{p}_{\text{nlín}}) \\ \vdots \\ \mathbf{H}_{m-1}(\mathbf{p}_{\text{nlín}}) \end{bmatrix} \quad (3.123\text{b})$$

$$\mathbf{H}_k(\mathbf{p}_{\text{nlín}}) = \begin{bmatrix} \cos(2\pi p_{\text{nlín},1}k) & \sin(2\pi p_{\text{nlín},1}k) & \cos(2\pi p_{\text{nlín},2}k) & \sin(2\pi p_{\text{nlín},2}k) \end{bmatrix} \quad (3.123\text{c})$$

transformiert werden. In der Optimierungsaufgabe (3.115) kann $\mathbf{W} = \mathbf{E}/q$ verwendet werden, wobei der unbekannte Parameter q in der Lösung

$$\hat{\mathbf{p}}_{\text{lín}} = \left(\mathbf{H}^T(\tilde{\mathbf{p}}_{\text{nlín}}) \mathbf{H}(\tilde{\mathbf{p}}_{\text{nlín}}) \right)^{-1} \mathbf{H}^T(\tilde{\mathbf{p}}_{\text{nlín}}) \mathbf{y} , \quad (3.124)$$

vgl. (3.116), durch Kürzung wegfällt. Die Optimierungsaufgabe (3.117) vereinfacht sich wegen (3.123a) zu

$$\min_{\tilde{\mathbf{p}}_{\text{nlín}}} \frac{1}{q} \mathbf{y}^T \left(\underbrace{\mathbf{E} - \mathbf{H}(\tilde{\mathbf{p}}_{\text{nlín}}) \left(\mathbf{H}^T(\tilde{\mathbf{p}}_{\text{nlín}}) \mathbf{H}(\tilde{\mathbf{p}}_{\text{nlín}}) \right)^{-1} \mathbf{H}^T(\tilde{\mathbf{p}}_{\text{nlín}})}_{J(\tilde{\mathbf{p}}_{\text{nlín}})} \right) \mathbf{y} , \quad (3.125)$$

wobei ohne Einfluss auf die Lösung $q = 1$ verwendet werden kann. Natürlich könnte in (3.125) auch der konstante Term $\mathbf{y}^T \mathbf{y}/q$ fortgelassen werden. Für die Messwerte aus Abbildung 3.1 ist $J(\mathbf{p}_{\text{nlín}})$ in Abbildung 3.2 dargestellt. Da die Parameter f_1 und f_2 in J symmetrisch auftreten, reicht es den dargestellten Bereich $f_1 \geq f_2$ zu betrachten. Die Optimierungsaufgabe (3.125) hat in diesem Bereich ein eindeutiges

Minimum (siehe Abbildung 3.2) und kann numerisch, z. B. mit der MATLAB-Funktion `fminunc`, gelöst werden. Anschließend wird $\hat{\mathbf{p}}_{\text{lin}}$ gemäß (3.124) berechnet.

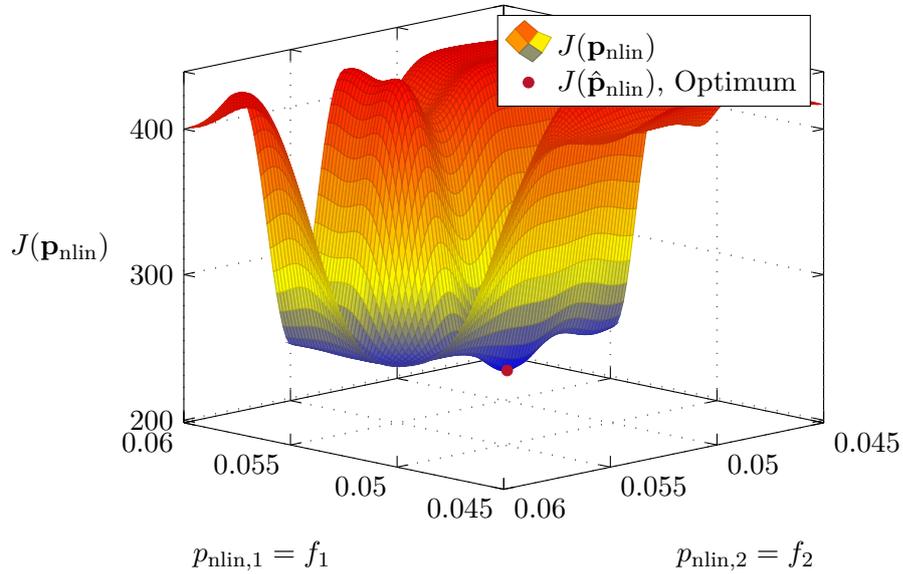


Abbildung 3.2: Kostenfunktion.

Parameter	Wahrer Wert	Geschätzter Wert
A_1	1	0.962
A_2	0.3	0.320
φ_1	0.5	0.508
φ_2	-2.5	-2.402
f_1	0.055 Hz	0.055 02 Hz
f_2	0.05 Hz	0.049 82 Hz

Tabelle 3.1: Wahre und geschätzte Parameterwerte.

Die so geschätzten Parameterwerte sind in Tabelle 3.1 mit jenen verglichen, die zur Generierung der Werte y_k verwendet wurden. Abbildung 3.3 zeigt die Messwerte und den geschätzten Verlauf des unverrauschten Signals.

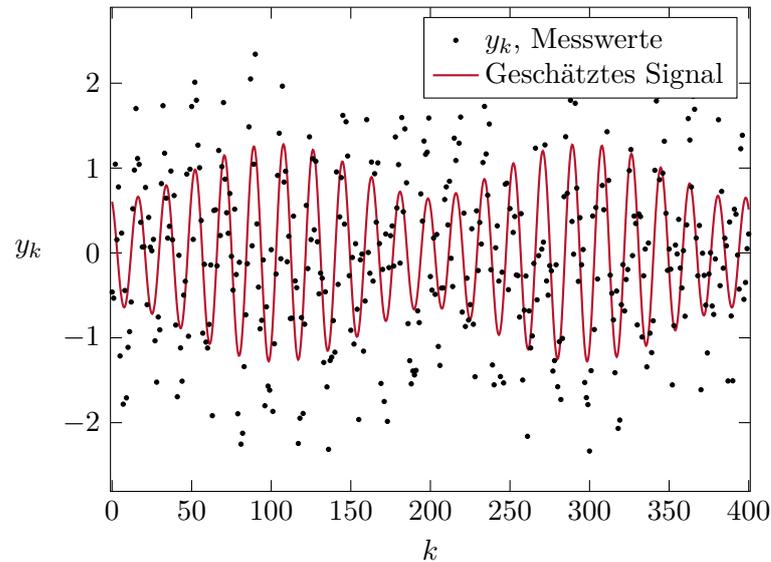


Abbildung 3.3: Messwerte und geschätzter Verlauf des unverrauschten Signals.

Bemerkung 3.3. Ohne die Transformation (3.121) wäre die Schätzaufgabe nur schwer lösbar, da in einem 4-dimensionalen Suchraum (mit zahlreichen lokalen Minima) für die nichtlinear auftretenden Parameter φ_1 , φ_2 , f_1 und f_2 nach einem globalen Optimum gesucht werden müsste.

3.2.2 Der singuläre Fall

Ist \mathbf{Q} singulär, so kann dies analoge Ursachen haben wie jene, die im Abschnitt 3.1.3 für den linearen Fall angegeben wurden. Ist \mathbf{Q} singulär, so kann in der Least-Squares Optimierungsaufgabe (3.112) die Gewichtungsmatrix $\mathbf{W} = (\mathbf{Q} + \varepsilon \mathbf{E})^{-1}$ mit einem geeigneten Parameter $\varepsilon > 0$ verwendet werden.

Alternativ dazu kann (analog zu Abschnitt 3.1.3) das Modell (3.95) so transformiert werden, dass sich ein reduziertes Modell mit regulärer Kovarianzmatrix der Störung ergibt.

Man wählt eine reguläre Matrix $\begin{bmatrix} \mathbf{V}_1 \\ \mathbf{V}_2 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{m \times m}$ so, dass

$$\mathbf{V}_1^T \in \text{Bild}(\mathbf{Q}) \quad (3.126a)$$

$$\mathbf{V}_2^T \in \text{Kern}(\mathbf{Q}) \quad (3.126b)$$

erfüllt sind. Wird das Modell (3.95) linksseitig einmal mit \mathbf{V}_1 und einmal mit \mathbf{V}_2 multipliziert, so ergibt sich das transformierte Modell

$$\mathbf{V}_1 \mathbf{y} = \mathbf{V}_1 \mathbf{h}(\mathbf{p}) + \mathbf{V}_1 \mathbf{v} \quad (3.127a)$$

$$\mathbf{V}_2 \mathbf{y} = \mathbf{V}_2 \mathbf{h}(\mathbf{p}), \quad (3.127b)$$

wobei (3.127a) den stochastischen und (3.127b) den deterministischen Teil des Modells enthält. Die Kovarianzmatrix der stochastischen Störung $\mathbf{V}_1 \mathbf{v}$ lautet

$$E(\mathbf{V}_1 \mathbf{v} \mathbf{v}^T \mathbf{V}_1^T) = \mathbf{V}_1 \mathbf{Q} \mathbf{V}_1^T \quad (3.128)$$

und ist wegen (3.126a) regulär. Damit kann nun (analog zu Bemerkung 3.1) die beschränkte gewichtete nichtlineare Least-Squares Optimierungsaufgabe

$$\hat{\mathbf{p}} = \mathbf{k}(\mathbf{y}) = \arg \min_{\tilde{\mathbf{p}} \in \mathbb{R}^n} (\mathbf{h}(\tilde{\mathbf{p}}) - \mathbf{y})^T \mathbf{W} (\mathbf{h}(\tilde{\mathbf{p}}) - \mathbf{y}) \quad (3.129a)$$

$$\text{u.B.v. } \mathbf{V}_2 \mathbf{y} = \mathbf{V}_2 \mathbf{h}(\tilde{\mathbf{p}}) \quad (3.129b)$$

mit der Gewichtungsmatrix $\mathbf{W} = \mathbf{V}_1^T (\mathbf{V}_1 \mathbf{Q} \mathbf{V}_1^T)^{-1} \mathbf{V}_1 \geq 0$ formuliert und gelöst werden.

3.2.3 Der kollineare Fall

Ähnlich zu Abschnitt 3.1.2 für ein lineares Modell, ist die Schätzung von \mathbf{p} im Modell (3.95) nicht eindeutig oder nur unzuverlässig möglich, wenn unterschiedliche Parameterwerte $\mathbf{p}_1 \neq \mathbf{p}_2$ zu gleichen Erwartungswerten $\mathbf{h}(\mathbf{p}_1) = \mathbf{h}(\mathbf{p}_2)$ oder ähnlichen Erwartungswerten $\mathbf{h}(\mathbf{p}_1) \approx \mathbf{h}(\mathbf{p}_2)$ des Systemausgangs \mathbf{y} führen können.

Sensitivitätsmatrix

Zur Beurteilung, ob dieses Problem vorliegt, kann die *Sensitivitätsmatrix*

$$\mathbf{S}(\mathbf{p}) = (\nabla \mathbf{h})^T(\mathbf{p}) \quad (3.130)$$

verwendet werden. Aus einer Taylorreihenentwicklung am Punkt \mathbf{p}_1 folgt

$$\mathbf{h}(\mathbf{p}_2) = \mathbf{h}(\mathbf{p}_1) + \mathbf{S}(\mathbf{p}_1)(\mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1) + \mathcal{O}(\|\mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1\|_2^2). \quad (3.131)$$

Damit nun (bei Vernachlässigung des Restterms in (3.131)) für $\mathbf{p}_1 \neq \mathbf{p}_2$ jedenfalls $\mathbf{h}(\mathbf{p}_1) \neq \mathbf{h}(\mathbf{p}_2)$, oder äquivalent $\|\mathbf{h}(\mathbf{p}_1) - \mathbf{h}(\mathbf{p}_2)\|_2 \neq 0$ gilt, muss $\mathbf{S}(\mathbf{p}_1)$ spaltenregulär sein, d. h. $\text{rang}(\mathbf{S}(\mathbf{p}_1)) = n$. Selbst wenn $\mathbf{S}(\mathbf{p}_1)$ spaltenregulär ist, besteht noch immer die Gefahr von ähnlichen Erwartungswerten $\mathbf{h}(\mathbf{p}_1) \approx \mathbf{h}(\mathbf{p}_2)$ ($\|\mathbf{h}(\mathbf{p}_1) - \mathbf{h}(\mathbf{p}_2)\|_2 \approx 0$) selbst bei signifikant unterschiedlichen Werten $\mathbf{p}_1 \neq \mathbf{p}_2$. Dieser Fall tritt genau dann ein, wenn aus den Spalten von $\mathbf{S}(\mathbf{p})$ eine Linearkombination ähnlich dem Vektor $\mathbf{0}$ gebildet werden kann, und wird als *Kollinearität* der Spalten von $\mathbf{S}(\mathbf{p})$ bezeichnet [3.11]. Für ein nichtlineares Modell hängt die Kollinearitätseigenschaft im Allgemeinen auch von den Parameterwerten \mathbf{p} ab. Für eine kompaktere Notation wird fortan \mathbf{p} nicht mehr explizit als Argument angegeben, d. h. $\mathbf{S} = \mathbf{S}(\mathbf{p})$.

Prüfung auf Kollinearität

Um eine mögliche Kollinearität einer Matrix \mathbf{S} quantitativ zu bewerten, werden zunächst die Spalten $\mathbf{S}_j = \partial \mathbf{h} / \partial p_j$ von $\mathbf{S} = [S_{ij}] = [\partial h_i / \partial p_j]$ mit $j = 1, \dots, n$ normiert, so dass sich

$$\tilde{\mathbf{S}} = [\tilde{S}_{ij}] = \left[\frac{S_{ij}}{\|\mathbf{S}_j\|_2} \right] = \mathbf{S} \operatorname{diag}\{\|\mathbf{S}_1\|_2, \|\mathbf{S}_2\|_2, \dots, \|\mathbf{S}_n\|_2\}^{-1} \quad (3.132)$$

ergibt. Hierbei wird davon ausgegangen, dass \mathbf{S} keine Nullspalten enthält. Der in [3.12] vorgeschlagene Wert

$$\rho = \min_{\mathbf{r} \in \mathbb{R}^n} \left(\frac{\|\tilde{\mathbf{S}}\mathbf{r}\|_2}{\|\mathbf{r}\|_2} \right) = \min_{\substack{\mathbf{r} \in \mathbb{R}^n, \\ \|\mathbf{r}\|_2=1}} \|\tilde{\mathbf{S}}\mathbf{r}\|_2 = \sqrt{\lambda_{\min}(\tilde{\mathbf{S}}^T\tilde{\mathbf{S}})} \in [0, 1] \quad (3.133)$$

verkleinert sich mit zunehmender Kollinearität der Spalten \mathbf{S}_j von \mathbf{S} . Die Funktion $\lambda_{\min}(\cdot)$ liefert den kleinsten Eigenwert einer symmetrischen Matrix. Die übergebene Matrix $\tilde{\mathbf{S}}^T\tilde{\mathbf{S}}$ ist symmetrisch und positiv semi-definit. Ihre Einträge sind auf das Intervall $[-1, 1]$ beschränkt und enthalten die sogenannten *Kosinus-Ähnlichkeiten* (siehe [3.13]) der Spalten \mathbf{S}_j . Alle Einträge in der Hauptdiagonale von $\tilde{\mathbf{S}}^T\tilde{\mathbf{S}}$ haben folglich den Wert 1.

Perfekte Kollinearität tritt im Fall $\rho = 0$, also $\operatorname{rang}(\mathbf{S}) < n$ auf. Im Gegensatz dazu gilt $\rho = 1$ bei bestmöglicher Unabhängigkeit (Orthogonalität) der Spalten \mathbf{S}_j . In (3.133) wird die Matrix $\tilde{\mathbf{S}}$ mit normierten Spalten (und nicht \mathbf{S}) verwendet, um eine gute Interpretierbarkeit und Vergleichbarkeit verschiedener Werte ρ zu ermöglichen.

Gemäß [3.12] kann der Wert ρ wie folgt interpretiert werden: Ein Änderung an den Messwerten \mathbf{y} bzw. an den Erwartungswerten $\mathbf{h}(\mathbf{p})$, die durch eine Änderung eines Parameters p_j hervorgerufen wird, kann (in linearer Näherung) bis auf einen Anteil ρ durch eine Änderung der übrigen Parameter p_k mit $k \neq j$ kompensiert werden. Der Kehrwert von ρ wird in der Literatur auch als *Kollinearitätsindex* bezeichnet [3.12, 3.14]. Es gilt natürlich $1/\rho \geq 1$. Übersteigt $1/\rho$ einen bestimmten Schwellwert, so geht man von Kollinearität und daher schlechter Schätzbarkeit der Parameter \mathbf{p} aus. In [3.12] wird dieser Schwellwert für $1/\rho$ beispielsweise mit 20 angegeben.

$$\frac{1}{\rho} = \frac{1}{\sqrt{\lambda_{\min}(\tilde{\mathbf{S}}^T\tilde{\mathbf{S}})}} > 20 \quad \Rightarrow \quad \text{Kollinearität} \quad (3.134)$$

Für nichtlineare Modelle hängen die Werte für \mathbf{S} , $\tilde{\mathbf{S}}$ und ρ im Allgemeinen von \mathbf{p} ab. Für festgelegte Werte \mathbf{p} kann eine Prüfung auf Kollinearität vorab, d. h. vor Aufnahme von Messwerten \mathbf{y} und vor einer Berechnung eines Schätzwertes $\hat{\mathbf{p}}$, durchgeführt werden.

Es soll nun die Gültigkeit von (3.133) gezeigt werden. Wegen der Symmetrie der positiv semidefiniten Matrix $\tilde{\mathbf{S}}^T\tilde{\mathbf{S}}$ existiert eine orthogonale $n \times n$ Matrix \mathbf{V} so, dass

$$\mathbf{V}^T\tilde{\mathbf{S}}^T\tilde{\mathbf{S}}\mathbf{V} = \operatorname{diag}\{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n\} \quad (3.135)$$

mit den Eigenwerten $\lambda_j \geq 0$ von $\tilde{\mathbf{S}}^T\tilde{\mathbf{S}}$ gilt². Die Spalten von \mathbf{V} sind also normierte

²Wenn

$$\tilde{\mathbf{S}} = \mathbf{U}\mathbf{\Sigma}\mathbf{V}^T$$

der Singulärwertzerlegung von $\tilde{\mathbf{S}}$ mit $m \geq n$, der $m \times n$ Matrix

$$\mathbf{\Sigma} = \begin{bmatrix} \operatorname{diag}\{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n\} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}$$

und unitären Matrizen $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{m \times m}$ und $\mathbf{V} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ entspricht, so gilt

$$\mathbf{V}^T\tilde{\mathbf{S}}^T\tilde{\mathbf{S}}\mathbf{V} = \mathbf{\Sigma}^T\mathbf{U}^T\mathbf{U}\mathbf{\Sigma} = \mathbf{\Sigma}^T\mathbf{\Sigma} = \operatorname{diag}\{\sigma_1^2, \sigma_2^2, \dots, \sigma_n^2\} = \operatorname{diag}\{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n\}.$$

Eigenvektoren von $\tilde{\mathbf{S}}^T \tilde{\mathbf{S}}$. Es folgt nun mit $\mathbf{r} = \mathbf{Vz}$

$$\|\tilde{\mathbf{S}}\mathbf{r}\|_2 = \sqrt{\mathbf{r}^T \tilde{\mathbf{S}}^T \tilde{\mathbf{S}} \mathbf{r}} = \sqrt{\mathbf{z}^T \mathbf{V}^T \tilde{\mathbf{S}}^T \tilde{\mathbf{S}} \mathbf{V} \mathbf{z}} = \sqrt{\sum_{j=1}^n \lambda_j z_j^2}. \quad (3.136)$$

Wegen $\|\mathbf{r}\|_2 = \|\mathbf{Vz}\|_2 = \|\mathbf{z}\|_2$ liefert die Minimierung von (3.136) schließlich den zu beweisenden Zusammenhang

$$\min_{\substack{\mathbf{r} \in \mathbb{R}^n, \\ \|\mathbf{r}\|_2=1}} \|\tilde{\mathbf{S}}\mathbf{r}\|_2 = \min_{\substack{\mathbf{z} \in \mathbb{R}^n, \\ \|\mathbf{z}\|_2=1}} \sqrt{\sum_{j=1}^n \lambda_j z_j^2} = \sqrt{\lambda_{\min}(\tilde{\mathbf{S}}^T \tilde{\mathbf{S}})}. \quad (3.137)$$

Aufgabe 3.7 (Bestmögliche Unabhängigkeit). Zeigen Sie, dass im Fall $\rho = 1$ für die Eigenwerte der Matrix $\tilde{\mathbf{S}}^T \tilde{\mathbf{S}}$

$$\lambda_j = 1 \quad \forall j = 1, \dots, n \quad (3.138)$$

gilt und die Spalten der Matrix \mathbf{S} orthogonal sind. Besonders einfach ist dieser Beweis zu führen, wenn Sie zunächst zeigen, dass alle Einträge in der Hauptdiagonale von $\tilde{\mathbf{S}}^T \tilde{\mathbf{S}}$ stets den Wert 1 haben und somit $\text{spur}(\tilde{\mathbf{S}}^T \tilde{\mathbf{S}}) = n$ gilt.

Abhilfe bei Kollinearität

Eine Möglichkeit Kollinearität zu vermeiden oder zu beseitigen ist eine *geänderte Wahl des Modells* (3.95), so dass der Kollinearitätsindex

$$\frac{1}{\rho} \leq 20 \quad (3.139)$$

erfüllt. Eine zweite Möglichkeit mit dem Problem umzugehen besteht darin, nicht die Werte von \mathbf{p} selbst, sondern die Werte eines *transformierten (reduzierten) Parametervektors* $\bar{\mathbf{p}}$ zu schätzen. Konkret soll

$$\mathbf{p} = \mathbf{t}(\bar{\mathbf{p}}) \quad (3.140)$$

mit einer injektiven Abbildung $\mathbf{t} : \mathbb{R}^o \rightarrow \mathbb{R}^n$ gelten. Eine Voraussetzung für die eindeutige Schätzbarkeit von $\bar{\mathbf{p}}$ ist natürlich die Zeilenregularität von $(\nabla \mathbf{t})(\bar{\mathbf{p}})$. Die Abbildung $\mathbf{t}(\cdot)$ wird nun so gewählt, dass die Kollinearität der neuen Sensitivitätsmatrix

$$\bar{\mathbf{S}}(\bar{\mathbf{p}}) = \mathbf{S}(\mathbf{p})|_{\mathbf{p}=\mathbf{t}(\bar{\mathbf{p}})} (\nabla \mathbf{t})^T(\bar{\mathbf{p}}) \quad (3.141)$$

z. B. im Sinne von (3.133) geringer ausfällt als jene der ursprünglichen Sensitivitätsmatrix $\mathbf{S}(\mathbf{p})$ gemäß (3.130). Klarerweise sollte daher

$$(\nabla \mathbf{t})^T(\bar{\mathbf{p}}) \notin \text{Kern}(\mathbf{S}(\mathbf{p})|_{\mathbf{p}=\mathbf{t}(\bar{\mathbf{p}})}) \quad (3.142)$$

gelten. Ist $\mathbf{S}(\mathbf{p})$ zwar spaltenregulär aber kollinear, so sollte analog gelten, dass sich die Spalten von $\text{diag}\{\|\mathbf{S}_1\|_2, \|\mathbf{S}_2\|_2, \dots, \|\mathbf{S}_n\|_2\}(\nabla \mathbf{t})^T(\bar{\mathbf{p}})$ möglichst *nicht* entlang von jenen Richtungen erstrecken, welche durch die zu kleinen Eigenwerten λ_j von $\tilde{\mathbf{S}}^T \tilde{\mathbf{S}}$ gehörenden Eigenvektoren aus \mathbf{V} aufgespannt werden. Als *kleine* Eigenwerte sind gemäß (3.134) jene zu verstehen, für die $1/\sqrt{\lambda_j} > 20$ gilt.

Beispiel 3.4 (Vermeidung einer singulären Sensitivitätsmatrix durch Transformation).

Die Abbildung

$$\mathbf{h}(\mathbf{p}) = \mathbf{a}p_1 + \mathbf{b}\frac{p_2}{p_3} \quad (3.143)$$

mit festen, orthogonalen Vektoren \mathbf{a} und \mathbf{b} besitzt die Sensitivitätsmatrix

$$\mathbf{S}(\mathbf{p}) = (\nabla \mathbf{h})^T(\mathbf{p}) = \begin{bmatrix} \mathbf{a} & \mathbf{b}\frac{1}{p_3} & -\mathbf{b}\frac{p_2}{p_3^2} \end{bmatrix}, \quad (3.144)$$

welche jedenfalls singulär ist. Dies zeigt sich auch im Wert $\rho = 0$ gemäß (3.133). Augenscheinlich können hier die Parameter p_2 und p_3 nicht unabhängig voneinander geschätzt werden.

Es gilt nun

$$\text{diag}\{\|\mathbf{S}_1\|_2, \|\mathbf{S}_2\|_2, \|\mathbf{S}_3\|_2\} = \text{diag}\left\{\|\mathbf{a}\|_2, \frac{\|\mathbf{b}\|_2}{|p_3|}, \frac{\|\mathbf{b}\|_2|p_2|}{p_3^2}\right\} \quad (3.145a)$$

$$\tilde{\mathbf{S}} = \begin{bmatrix} \mathbf{a} & \mathbf{b}|p_3| & -\mathbf{b}p_2 \\ \|\mathbf{a}\|_2 & \|\mathbf{b}\|_2|p_3| & -\|\mathbf{b}\|_2|p_2| \end{bmatrix} \quad (3.145b)$$

$$\tilde{\mathbf{S}}^T \tilde{\mathbf{S}} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -\frac{|p_3|p_2}{p_3|p_2|} \\ 0 & -\frac{|p_3|p_2}{p_3|p_2|} & 1 \end{bmatrix} \quad (3.145c)$$

$$\text{diag}\{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3\} = \text{diag}\{1, 2, 0\} \quad (3.145d)$$

$$\mathbf{V} = \begin{bmatrix} \mathbf{v}_1 & \mathbf{v}_2 & \mathbf{v}_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{|p_3|p_2}{\sqrt{2}p_3|p_2|} & \frac{|p_3|p_2}{\sqrt{2}p_3|p_2|} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}. \quad (3.145e)$$

Folglich sollte $o \leq 2$ gelten und die Abbildung $\mathbf{t}(\bar{\mathbf{p}})$ sollte so gewählt werden, dass die Spalten von $\text{diag}\{\|\mathbf{S}_1\|_2, \|\mathbf{S}_2\|_2, \|\mathbf{S}_3\|_2\}(\nabla \mathbf{t})^T(\bar{\mathbf{p}})$ nicht parallel zu \mathbf{v}_3 verlaufen. Eine mögliche Wahl, die dies erfüllt, lautet

$$\mathbf{p} = \mathbf{t}(\bar{\mathbf{p}}) = \begin{bmatrix} \bar{p}_1 \\ \bar{p}_2 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (3.146)$$

Mit dieser Wahl gilt

$$\mathbf{h}(\mathbf{t}(\bar{\mathbf{p}})) = \mathbf{a}\bar{p}_1 + \mathbf{b}\bar{p}_2 \quad (3.147a)$$

$$\bar{\mathbf{S}}(\bar{\mathbf{p}}) = \begin{bmatrix} \mathbf{a} & \mathbf{b} \end{bmatrix} \quad (3.147b)$$

$$\tilde{\mathbf{S}} = \begin{bmatrix} \mathbf{a} & \mathbf{b} \\ \|\mathbf{a}\|_2 & \|\mathbf{b}\|_2 \end{bmatrix} \quad (3.147c)$$

$$\tilde{\mathbf{S}}^T \tilde{\mathbf{S}} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (3.147d)$$

und folglich $\rho = 1$. Die Spalten von $\bar{\mathbf{S}}$ sind also bestmöglich unabhängig und eine Schätzung von $\bar{\mathbf{p}} = \begin{bmatrix} \bar{p}_1 & \bar{p}_2 \end{bmatrix}^T$ kann zuverlässig erfolgen.

Beispiel 3.5 (Vermeidung einer kollinearen Sensitivitätsmatrix durch Transformation).

Für ein lineares Modell (3.1) mit $n = 3$ ist die Sensitivitätsmatrix

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} 3.77 & 1.12 & 2.96 \\ -0.55 & -6.13 & -11.09 \\ -2.68 & 1.64 & 3.30 \\ -1.36 & -6.45 & -13.36 \\ 6.13 & 9.67 & 19.95 \end{bmatrix} \quad (3.148)$$

bekannt. Im Falle einer Kollinearität soll eine Abbildung (3.140) gesucht werden, welche die Kollinearität beseitigt.

Zunächst werden

$$\tilde{\mathbf{S}} = \begin{bmatrix} 0.4822 & 0.0843 & 0.1104 \\ -0.0703 & -0.4612 & -0.4135 \\ -0.3428 & 0.1234 & 0.1231 \\ -0.1740 & -0.4853 & -0.4982 \\ 0.7841 & 0.7276 & 0.7439 \end{bmatrix} \quad (3.149a)$$

$$\tilde{\mathbf{S}}^T \tilde{\mathbf{S}} = \begin{bmatrix} 1 & 0.6857 & 0.7107 \\ 0.6857 & 1 & 0.9983 \\ 0.7107 & 0.9983 & 1 \end{bmatrix} \quad (3.149b)$$

$$\text{diag}\{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3\} = \text{diag}\{0.0011, 0.3937, 2.6052\} \quad (3.149c)$$

$$\mathbf{V} = \begin{bmatrix} \mathbf{v}_1 & \mathbf{v}_2 & \mathbf{v}_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.00331 & 0.8512 & 0.5238 \\ 0.6948 & -0.3967 & 0.5999 \\ -0.7184 & -0.3437 & 0.6048 \end{bmatrix} \quad (3.149d)$$

$$\rho = 0.0333, \quad \frac{1}{\rho} = 29.99 > 20. \quad (3.149e)$$

berechnet. Es liegt also eine deutliche Kollinearität vor. Aus dem zu $\lambda_{\min}(\tilde{\mathbf{S}}^T \tilde{\mathbf{S}}) = \lambda_1$ gehörigen Eigenvektor \mathbf{v}_1 ist zu erkennen, dass diese Kollinearität vor allem zwischen der zweiten und dritten Spalte der Matrix \mathbf{S} vorliegt.

Da nur der Eigenwert λ_1 die Ungleichung $1/\lambda_1 > 20$ erfüllt, sollte $o \leq 2$ gewählt werden. Da es sich außerdem um ein lineares Modell handelt, reicht hier die Verwendung einer linearen Abbildung

$$\mathbf{p} = \mathbf{t}(\bar{\mathbf{p}}) = \bar{\mathbf{T}}\bar{\mathbf{p}}. \quad (3.150)$$

Es muss also eine $n \times o$ Matrix $\bar{\mathbf{T}}$ gewählt werden. Die bestmögliche Wahl für $\bar{\mathbf{T}}$ im Sinne einer geringen verbleibenden Kollinearität ergibt sich aus der Gleichung

$$\begin{bmatrix} \mathbf{v}_2 & \mathbf{v}_3 \end{bmatrix} = \text{diag}\{\|\mathbf{S}_1\|_2, \|\mathbf{S}_2\|_2, \|\mathbf{S}_3\|_2\} \bar{\mathbf{T}} \quad (3.151)$$

in der Form

$$\bar{\mathbf{T}} = \begin{bmatrix} 0.1089 & 0.0670 \\ -0.0298 & 0.0451 \\ -0.0128 & 0.0226 \end{bmatrix}. \quad (3.152)$$

Daraus folgen

$$\bar{\mathbf{S}} = \mathbf{S}\bar{\mathbf{T}} = \begin{bmatrix} 0.3391 & 0.3699 \\ 0.2652 & -0.5636 \\ -0.3830 & -0.0311 \\ 0.2157 & -0.6836 \\ 0.1230 & 1.2971 \end{bmatrix} \quad (3.153a)$$

$$\bar{\mathbf{S}}^T \bar{\mathbf{S}} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (3.153b)$$

und schließlich $\rho = 1$. Die Spalten von $\bar{\mathbf{S}}$ sind also bestmöglich unabhängig und eine Schätzung von $\bar{\mathbf{p}} = [\bar{p}_1 \quad \bar{p}_2]^T$ kann zuverlässig erfolgen. Wird der Schätzwert für $\bar{\mathbf{p}}$ gemäß Abschnitt 3.1.1 berechnet so stimmt er mit dem Schätzwert $\widehat{\mathbf{T}}\mathbf{p}$ aus Abschnitt 3.1.2 überein, wenn $\mathbf{T} = \bar{\mathbf{T}}^\dagger$ gilt.

3.2.4 Schranken für die Kovarianzmatrix des Parameterschätzfehlers

In diesem Abschnitt werden mit Hilfe der *Wahrscheinlichkeitstheorie* weitere Überlegungen zur Erwartungstreue von Schätzern und zur Kovarianzmatrix des Schätzfehlers angestellt. Insbesondere werden Schranken für diese Kovarianzmatrix berechnet.

Es sei $P_{\mathbf{z}}(\mathbf{z})$ die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (Verteilungsdichtefunktion) einer stetigen Zufallsvariable \mathbf{z} . Dementsprechend gilt $P_{\mathbf{v}}(\mathbf{v})$ für die zufällige Störung \mathbf{v} im Modell (3.95). Natürlich sind auch der Ausgangswert \mathbf{y} und der Schätzwert $\hat{\mathbf{p}}$ gemäß (3.109) Zufallsgrößen und es gilt

$$P_{\mathbf{y}}(\mathbf{y}; \mathbf{p}) = P_{\mathbf{v}}(\mathbf{y} - \mathbf{h}(\mathbf{p})) . \quad (3.154)$$

Die Schreibweise $P_{\mathbf{y}}(\mathbf{y}; \mathbf{p})$ signalisiert, dass die Verteilung von \mathbf{y} von der deterministischen Größe \mathbf{p} abhängt. Die Bedingung für Erwartungstreue kann damit in der Form

$$\mathbb{E}(\hat{\mathbf{p}}) = \int \mathbf{k}(\mathbf{y}) P_{\mathbf{y}}(\mathbf{y}; \mathbf{p}) d\mathbf{y} = \mathbb{E}(\mathbf{k}(\mathbf{h}(\mathbf{p}) + \mathbf{v})) = \int \mathbf{k}(\mathbf{h}(\mathbf{p}) + \mathbf{v}) P_{\mathbf{v}}(\mathbf{v}) d\mathbf{v} = \mathbf{p} \quad (3.155)$$

angeschrieben werden³.

Satz 3.1 (Näherungsweise Schranke für die Kovarianzmatrix des Schätzfehlers). Für die Kovarianzmatrix eines erwartungstreuen Schätzers $\hat{\mathbf{p}} = \mathbf{k}(\mathbf{y})$ für die Parameter \mathbf{p} im nichtlinearen Modell (3.95) gilt näherungsweise (Fehler $\int \mathcal{O}(\|\mathbf{v}\|_2^3) P_{\mathbf{v}}(\mathbf{v}) d\mathbf{v}$)

$$\mathbb{E}((\hat{\mathbf{p}} - \mathbf{p})(\hat{\mathbf{p}} - \mathbf{p})^T) \approx (\nabla \mathbf{k})^T(\mathbf{h}(\mathbf{p})) \mathbf{Q} (\nabla \mathbf{k})(\mathbf{h}(\mathbf{p})) \geq (\mathbf{S}^T(\mathbf{p}) \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{S}(\mathbf{p}))^{-1} , \quad (3.156)$$

wobei das Größer-Gleich-Zeichen so zu verstehen ist, dass die Matrix $(\nabla \mathbf{k})^T(\mathbf{h}(\mathbf{p})) \mathbf{Q} (\nabla \mathbf{k})(\mathbf{h}(\mathbf{p})) - (\mathbf{S}^T(\mathbf{p}) \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{S}(\mathbf{p}))^{-1}$ positiv semidefinit ist.

Der nachfolgende Beweis ist an [3.6] angelehnt.

Beweis. Die Taylorreihenentwicklung von $\mathbf{k}(\cdot)$ am Punkt $\mathbf{h}(\mathbf{p})$ lautet

$$\hat{\mathbf{p}} = \mathbf{k}(\mathbf{h}(\mathbf{p}) + \mathbf{v}) = \mathbf{k}(\mathbf{h}(\mathbf{p})) + (\nabla \mathbf{k})^T(\mathbf{h}(\mathbf{p})) \mathbf{v} + \mathcal{O}(\|\mathbf{v}\|_2^2) . \quad (3.157)$$

Einsetzen in (3.155) liefert unter Berücksichtigung von $\int P_{\mathbf{v}}(\mathbf{v}) d\mathbf{v} = 1$ und $\mathbb{E}(\mathbf{v}) = \mathbf{0}$

$$\begin{aligned} & \int \mathbf{k}(\mathbf{h}(\mathbf{p}) + \mathbf{v}) P_{\mathbf{v}}(\mathbf{v}) d\mathbf{v} \\ &= \int \left(\mathbf{k}(\mathbf{h}(\mathbf{p})) + (\nabla \mathbf{k})^T(\mathbf{h}(\mathbf{p})) \mathbf{v} + \mathcal{O}(\|\mathbf{v}\|_2^2) \right) P_{\mathbf{v}}(\mathbf{v}) d\mathbf{v} \\ &= \mathbf{k}(\mathbf{h}(\mathbf{p})) + \int \mathcal{O}(\|\mathbf{v}\|_2^2) P_{\mathbf{v}}(\mathbf{v}) d\mathbf{v} = \mathbf{p} . \end{aligned} \quad (3.158)$$

In guter Näherung kann daher für Erwartungstreue

$$\mathbf{k}(\mathbf{h}(\mathbf{p})) \approx \mathbf{p} \quad (3.159)$$

gefordert werden, so dass sich aus (3.157) für den Schätzfehler

$$\hat{\mathbf{p}} - \mathbf{p} = (\nabla \mathbf{k})^T(\mathbf{h}(\mathbf{p})) \mathbf{v} + \mathcal{O}(\|\mathbf{v}\|_2^2) \quad (3.160)$$

³Das Symbol \int in (3.155) ist als Mehrfachintegral über den Ereignisraum der jeweiligen Zufallsvariable zu verstehen.

und in weiterer Folge für dessen Kovarianzmatrix

$$\begin{aligned} E((\hat{\mathbf{p}} - \mathbf{p})(\hat{\mathbf{p}} - \mathbf{p})^T) \\ = (\nabla \mathbf{k})^T(\mathbf{h}(\mathbf{p})) \underbrace{E(\mathbf{v}\mathbf{v}^T)}_{\mathbf{Q}} (\nabla \mathbf{k})(\mathbf{h}(\mathbf{p})) + \int \mathcal{O}(\|\mathbf{v}\|_2^3) P_{\mathbf{v}}(\mathbf{v}) \, d\mathbf{v} \end{aligned} \quad (3.161)$$

ergibt. Damit ist der erste Teil von (3.156) gezeigt.

Die Ableitung von (3.159) nach \mathbf{p} lautet

$$(\nabla \mathbf{k})^T(\mathbf{h}(\mathbf{p}))(\nabla \mathbf{h})^T(\mathbf{p}) = (\nabla \mathbf{k})^T(\mathbf{h}(\mathbf{p}))\mathbf{S} \approx \mathbf{E}. \quad (3.162)$$

Hierbei wird für eine kompaktere Notation \mathbf{p} nicht explizit als Argument von \mathbf{S} angegeben, d. h. $\mathbf{S} = \mathbf{S}(\mathbf{p})$. Durch Ausmultiplizieren kann leicht die folgende Identität bewiesen werden.

$$\begin{aligned} \mathbf{Q} - \mathbf{S}(\mathbf{S}^T \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{S})^{-1} \mathbf{S}^T \\ = \left(\mathbf{Q} - \mathbf{S}(\mathbf{S}^T \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{S})^{-1} \mathbf{S}^T \right) \mathbf{Q}^{-1} \left(\mathbf{Q} - \mathbf{S}(\mathbf{S}^T \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{S})^{-1} \mathbf{S}^T \right) \end{aligned} \quad (3.163)$$

Aus ihr folgt

$$\mathbf{Q} - \mathbf{S}(\mathbf{S}^T \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{S})^{-1} \mathbf{S}^T \geq 0 \quad (3.164)$$

und nach links- und rechtsseitiger Multiplikation mit $(\nabla \mathbf{k})^T(\mathbf{h}(\mathbf{p}))$ bzw. $(\nabla \mathbf{k})(\mathbf{h}(\mathbf{p}))$ unter Berücksichtigung von (3.162) schließlich

$$(\nabla \mathbf{k})^T(\mathbf{h}(\mathbf{p}))\mathbf{Q}(\nabla \mathbf{k})(\mathbf{h}(\mathbf{p})) - (\mathbf{S}^T \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{S})^{-1} \geq 0. \quad (3.165)$$

Damit ist auch der zweite Teil von (3.156) gezeigt. \square

Aufgabe 3.8. Zeigen Sie, dass Satz 3.1 im Falle eines linearen erwartungstreuen Schätzers $\hat{\mathbf{p}} = \mathbf{K}\mathbf{y}$ nicht nur näherungsweise sondern exakt gilt.

Vorbereitend auf den nächsten Satz, der eine rigorosere Schranke für die Kovarianzmatrix eines erwartungstreuen Schätzers formuliert, werden zwei Maße für den *Informationsgehalt* der Zufallsgröße \mathbf{y} bezüglich \mathbf{p} definiert. Weiterführende Informationen dazu sind auch in [3.6, 3.15] zu finden.

Definition 3.2 (Score-Funktion). Wird eine Zufallsvariable \mathbf{y} durch Parameter \mathbf{p} beeinflusst und ist $P_{\mathbf{y}}(\mathbf{y}; \mathbf{p})$ deren Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion, so gilt für die Score-Funktion

$$\mathbf{s} = \left(\frac{\partial \ln(P_{\mathbf{y}}(\mathbf{y}; \mathbf{p}))}{\partial \mathbf{p}} \right)^T = \frac{1}{P_{\mathbf{y}}(\mathbf{y}; \mathbf{p})} \left(\frac{\partial P_{\mathbf{y}}(\mathbf{y}; \mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} \right)^T. \quad (3.166)$$

Die Score-Funktion hängt von \mathbf{y} und \mathbf{p} ab. Sie entspricht der Ableitung der sogenannten *Log-Likelihood-Funktion* $\ln(P_{\mathbf{y}}(\mathbf{y}; \mathbf{p}))$ nach \mathbf{p} , d. h. sie beschreibt die (lokale) Sensitivität von $\ln(P_{\mathbf{y}}(\mathbf{y}; \mathbf{p}))$ bezüglich \mathbf{p} . Klarerweise beeinflusst diese Sensitivität die Genauigkeit mit der \mathbf{p} basierend auf einer Realisierung der Zufallsvariable \mathbf{y} geschätzt werden kann.

Für den Erwartungswert der Score-Funktion gilt

$$\begin{aligned}
 \mathbf{E}(\mathbf{s}) &= \int \left(\frac{\partial \ln(P_{\mathbf{y}}(\mathbf{y}; \mathbf{p}))}{\partial \mathbf{p}} \right)^{\mathbf{T}} P_{\mathbf{y}}(\mathbf{y}; \mathbf{p}) \, d\mathbf{y} \\
 &= \int \frac{1}{P_{\mathbf{y}}(\mathbf{y}; \mathbf{p})} \left(\frac{\partial P_{\mathbf{y}}(\mathbf{y}; \mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} \right)^{\mathbf{T}} P_{\mathbf{y}}(\mathbf{y}; \mathbf{p}) \, d\mathbf{y} \\
 &= \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \int P_{\mathbf{y}}(\mathbf{y}; \mathbf{p}) \, d\mathbf{y} \right)^{\mathbf{T}} = \left(\frac{\partial 1}{\partial \mathbf{p}} \right)^{\mathbf{T}} = \mathbf{0} .
 \end{aligned} \tag{3.167}$$

Hier wurde davon ausgegangen, dass die Integration über \mathbf{y} und die Ableitung nach \mathbf{p} in ihrer Reihenfolge vertauscht werden dürfen. Dies ist erfüllt, wenn der Ereignisraum von \mathbf{y} (Integrationsgebiet) unbeschränkt ist oder sein Rand nicht von \mathbf{p} abhängt.

Definition 3.3 (Fisher-Informationsmatrix). Die Kovarianzmatrix der Score-Funktion

$$\begin{aligned}
 \mathbf{I}(\mathbf{p}) = \mathbf{E}(\mathbf{s}\mathbf{s}^{\mathbf{T}}) &= \mathbf{E} \left(\left(\frac{\partial \ln(P_{\mathbf{y}}(\mathbf{y}; \mathbf{p}))}{\partial \mathbf{p}} \right)^{\mathbf{T}} \frac{\partial \ln(P_{\mathbf{y}}(\mathbf{y}; \mathbf{p}))}{\partial \mathbf{p}} \right) \\
 &= -\mathbf{E} \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \left(\frac{\partial \ln(P_{\mathbf{y}}(\mathbf{y}; \mathbf{p}))}{\partial \mathbf{p}} \right)^{\mathbf{T}} \right)
 \end{aligned} \tag{3.168}$$

wird als Fisher-Informationsmatrix bezeichnet. Sie existiert, wenn die Score-Funktion für alle Werte \mathbf{y} mit $P_{\mathbf{y}}(\mathbf{y}; \mathbf{p}) > 0$ existiert und finit ist.

Dass auch die Fisher-Informationsmatrix ein Maß für den Informationsgehalt der Zufallsgröße \mathbf{y} bezüglich \mathbf{p} ist, wird anhand der zweiten Zeile von (3.168) klar, welche den Erwartungswert der negativen Krümmungen der Log-Likelihood-Funktion $\ln(P_{\mathbf{y}}(\mathbf{y}; \mathbf{p}))$ bezüglich \mathbf{p} enthält. Je größer die Werte der Fisher-Informationsmatrix sind, desto spitzer ist die Log-Likelihood-Funktion $\ln(P_{\mathbf{y}}(\mathbf{y}; \mathbf{p}))$ bezüglich \mathbf{p} . Um die Gültigkeit der zweiten Zeile von (3.168) zu zeigen, wird (3.167) nach \mathbf{p} abgeleitet

$$\begin{aligned}
 \mathbf{0} &= \frac{d\mathbf{E}(\mathbf{s})}{d\mathbf{p}} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \left(\int \left(\frac{\partial \ln(P_{\mathbf{y}}(\mathbf{y}; \mathbf{p}))}{\partial \mathbf{p}} \right)^{\mathbf{T}} P_{\mathbf{y}}(\mathbf{y}; \mathbf{p}) \, d\mathbf{y} \right) \\
 &= \int \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \left(\frac{\partial \ln(P_{\mathbf{y}}(\mathbf{y}; \mathbf{p}))}{\partial \mathbf{p}} \right)^{\mathbf{T}} P_{\mathbf{y}}(\mathbf{y}; \mathbf{p}) \, d\mathbf{y} + \int \left(\frac{\partial \ln(P_{\mathbf{y}}(\mathbf{y}; \mathbf{p}))}{\partial \mathbf{p}} \right)^{\mathbf{T}} \frac{\partial P_{\mathbf{y}}(\mathbf{y}; \mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} \, d\mathbf{y} \\
 &= \mathbf{E} \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \left(\frac{\partial \ln(P_{\mathbf{y}}(\mathbf{y}; \mathbf{p}))}{\partial \mathbf{p}} \right)^{\mathbf{T}} \right) \\
 &\quad + \int \left(\frac{\partial \ln(P_{\mathbf{y}}(\mathbf{y}; \mathbf{p}))}{\partial \mathbf{p}} \right)^{\mathbf{T}} \frac{\partial \ln(P_{\mathbf{y}}(\mathbf{y}; \mathbf{p}))}{\partial \mathbf{p}} P_{\mathbf{y}}(\mathbf{y}; \mathbf{p}) \, d\mathbf{y} .
 \end{aligned} \tag{3.169}$$

Hier wurde wieder davon ausgegangen, dass die Integration über \mathbf{y} und die Ableitung nach \mathbf{p} in ihrer Reihenfolge vertauscht werden dürfen.

Satz 3.2 (Cramér-Rao-Schranke). Es sei $\hat{\mathbf{p}} = \mathbf{k}(\mathbf{y})$ ein erwartungstreuer Schätzer für die Parameter \mathbf{p} im nichtlinearen Modell (3.95) und es seien die folgenden Regularitätsbedingungen erfüllt.

- a) Die Fisher-Informationsmatrix existiert und ist positiv definit.
 b) Die Integration über \mathbf{y} und die Ableitung nach \mathbf{p} dürfen in ihrer Reihenfolge vertauscht werden

Dann ist die Kovarianzmatrix des Schätzfehlers in der Form

$$\mathbf{E}((\hat{\mathbf{p}} - \mathbf{p})(\hat{\mathbf{p}} - \mathbf{p})^T) \geq \mathbf{I}^{-1}(\mathbf{p}) \quad (3.170)$$

nach unten beschränkt, wobei das Größer-Gleich-Zeichen so zu verstehen ist, dass $\mathbf{E}((\hat{\mathbf{p}} - \mathbf{p})(\hat{\mathbf{p}} - \mathbf{p})^T) - \mathbf{I}^{-1}(\mathbf{p})$ eine positiv semidefinite Matrix ist.

Der nachfolgende Beweis ist an [3.6] angelehnt. Dort wird zusätzlich eine Erweiterung der Cramér-Rao-Schranke für nicht erwartungstreue Schätzer vorgestellt.

Beweis. Die Ableitung der Bedingung (3.155) für Erwartungstreue des Schätzers nach \mathbf{p} liefert

$$\begin{aligned} \int \mathbf{k}(\mathbf{y}) \frac{\partial P_{\mathbf{y}}(\mathbf{y}; \mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} d\mathbf{y} &= \int \mathbf{k}(\mathbf{y}) \frac{1}{P_{\mathbf{y}}(\mathbf{y}; \mathbf{p})} \frac{\partial P_{\mathbf{y}}(\mathbf{y}; \mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} P_{\mathbf{y}}(\mathbf{y}; \mathbf{p}) d\mathbf{y} \\ &= \mathbf{E}(\hat{\mathbf{p}} \mathbf{s}^T) = \mathbf{E} . \end{aligned} \quad (3.171)$$

Wird davon der aus (3.167) folgende Ausdruck

$$\mathbf{p} \mathbf{E}(\mathbf{s}^T) = \mathbf{E}(\mathbf{p} \mathbf{s}^T) = \mathbf{0} \quad (3.172)$$

abgezogen, so ergibt sich

$$\mathbf{E}((\hat{\mathbf{p}} - \mathbf{p}) \mathbf{s}^T) = \mathbf{E} . \quad (3.173)$$

Die Matrix

$$\mathbf{E} \left(\begin{bmatrix} \hat{\mathbf{p}} - \mathbf{p} \\ \mathbf{s} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} (\hat{\mathbf{p}} - \mathbf{p})^T & \mathbf{s}^T \end{bmatrix} \right) = \begin{bmatrix} \mathbf{E}((\hat{\mathbf{p}} - \mathbf{p})(\hat{\mathbf{p}} - \mathbf{p})^T) & \mathbf{E} \\ \mathbf{E} & \mathbf{I}(\mathbf{p}) \end{bmatrix} \geq 0 \quad (3.174)$$

ist natürlich positiv semidefinit, wobei hier (3.173) verwendet wurde. Die positive Semidefinitheit von (3.174) ändert sich nicht, wenn der Ausdruck links- und rechtsseitig mit einer beliebigen Matrix und ihrer Transponierten multipliziert wird. Im Speziellen gilt

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \mathbf{E} & -\mathbf{I}^{-1}(\mathbf{p}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{E}((\hat{\mathbf{p}} - \mathbf{p})(\hat{\mathbf{p}} - \mathbf{p})^T) & \mathbf{E} \\ \mathbf{E} & \mathbf{I}(\mathbf{p}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{E} \\ -\mathbf{I}^{-1}(\mathbf{p}) \end{bmatrix} \\ = \mathbf{E}((\hat{\mathbf{p}} - \mathbf{p})(\hat{\mathbf{p}} - \mathbf{p})^T) - \mathbf{I}^{-1}(\mathbf{p}) \geq 0 . \end{aligned} \quad (3.175)$$

□

Ist die Fisher-Informationsmatrix zwar regulär aber numerisch schlecht konditioniert (großes Verhältnis aus maximalem zu minimalem Eigenwert von $\mathbf{I}(\mathbf{p})$, d. h. $\lambda_{\max}/\lambda_{\min} \gg 1$), so kann die Cramér-Rao-Schranke gemäß (3.170) sehr große Werte annehmen. Die Para-

meterwerte \mathbf{p} sind dann nicht zuverlässig schätzbar [3.14]. Es ist in diesem Zusammenhang zu beachten, dass die Eigenwerte der Fisher-Informationsmatrix auch von den gewählten Einheiten der Parameter \mathbf{p} abhängen.

Ein erwartungstreuer Schätzer wird als *effizient* bezeichnet, wenn seine Fehlerkovarianzmatrix die Cramér-Rao-Schranke gemäß Satz 3.2 erreicht, wenn also

$$\mathbf{E}((\hat{\mathbf{p}} - \mathbf{p})(\hat{\mathbf{p}} - \mathbf{p})^T) = \mathbf{I}^{-1}(\mathbf{p}) \quad (3.176)$$

gilt [3.16]. Bedingungen für die Existenz eines effizienten Schätzers werden z. B. in [3.15] angegeben. Jeder effiziente Schätzer ist erwartungstreu und minimiert die aufsummierten Einzelvarianzen der Schätzfehler. Umgekehrt muss nicht jeder Schätzer, der erwartungstreu ist und die aufsummierten Einzelvarianzen der Schätzfehler minimiert, effizient sein.

3.2.5 Normalverteilte Störung

In diesem Abschnitt wird kurz der Fall betrachtet, dass die Störung $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^m$ im Modell (3.95) normalverteilt ist mit dem Erwartungswert $\mathbf{0}$ und der Kovarianzmatrix $\mathbf{Q} \geq 0$, d. h. $\mathbf{v} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{Q})$.

Definition 3.4 (Normalverteilung). Zufallsvariablen $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^m$ genügen einer *Normalverteilung* mit dem Erwartungswert $\boldsymbol{\mu}$ und der Kovarianzmatrix $\boldsymbol{\Sigma} \geq 0$, wenn für ihre Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion

$$P_{\mathbf{z}}(\mathbf{z}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^m \det(\boldsymbol{\Sigma})}} \exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{z} - \boldsymbol{\mu})^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{z} - \boldsymbol{\mu})\right) \quad (3.177)$$

gilt. Dafür wird die abgekürzte Notation $\mathbf{z} \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ verwendet.

Satz 3.3 (Affine Transformation einer normalverteilten Zufallsvariable). Wird eine normalverteilte Zufallsvariable $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^m$ mit $\mathbf{z} \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ einer affinen Transformation

$$\mathbf{x} = \mathbf{A}\mathbf{z} + \mathbf{b} \quad (3.178)$$

mit zeilenregulärer Matrix $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times m}$ und $n \leq m$ unterzogen, so ist die resultierende Zufallsvariable $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ normalverteilt mit dem Erwartungswert $\mathbf{A}\boldsymbol{\mu} + \mathbf{b}$ und der Kovarianzmatrix $\mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{A}^T$, d. h.

$$\mathbf{x} \sim \mathcal{N}(\mathbf{A}\boldsymbol{\mu} + \mathbf{b}, \mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{A}^T) . \quad (3.179)$$

Ein Beweis dieses Satzes findet sich z. B. in [3.17, 3.18].

Aufgabe 3.9. Zeigen Sie, dass im Satz 3.3 die Beziehungen $\mathbf{E}(\mathbf{x}) = \mathbf{A}\boldsymbol{\mu} + \mathbf{b}$ und $\mathbf{E}((\mathbf{x} - \mathbf{E}(\mathbf{x}))(\mathbf{x} - \mathbf{E}(\mathbf{x}))^T) = \mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{A}^T$ gelten.

Beispiel 3.6 (Cramér-Rao-Schranke bei normalverteilter Störung). Für die Störung \mathbf{v} im Modell (3.95) gilt $\mathbf{v} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{Q})$ und es liegt der reguläre Fall vor (positiv definite Kovarianzmatrix \mathbf{Q} , spaltenreguläre Sensitivitätsmatrix $\mathbf{S}(\mathbf{p}) = (\nabla \mathbf{h})^T(\mathbf{p})$). Es soll

die Cramér-Rao-Schranke für erwartungstreue Schätzer $\hat{\mathbf{p}}$ von \mathbf{p} berechnet werden.

Aus $\mathbf{v} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{Q})$ folgt mit dem Modell (3.95) und dem Satz 3.3

$$\mathbf{y} \sim \mathcal{N}(\mathbf{h}(\mathbf{p}), \mathbf{Q}) \quad (3.180)$$

und somit für die zugehörige Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion

$$P_{\mathbf{y}}(\mathbf{y}; \mathbf{p}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^m \det(\mathbf{Q})}} \exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{y} - \mathbf{h}(\mathbf{p}))^T \mathbf{Q}^{-1}(\mathbf{y} - \mathbf{h}(\mathbf{p}))\right) \quad (3.181)$$

sowie für die Log-Likelihoodfunktion

$$\ln(P_{\mathbf{y}}(\mathbf{y}; \mathbf{p})) = -\frac{1}{2} \ln((2\pi)^m \det(\mathbf{Q})) - \frac{1}{2}(\mathbf{y} - \mathbf{h}(\mathbf{p}))^T \mathbf{Q}^{-1}(\mathbf{y} - \mathbf{h}(\mathbf{p})) . \quad (3.182)$$

Weiters ergibt sich für die Score-Funktion

$$\mathbf{s} = \left(\frac{\partial \ln(P_{\mathbf{y}}(\mathbf{y}; \mathbf{p}))}{\partial \mathbf{p}} \right)^T = (\nabla \mathbf{h})(\mathbf{p}) \mathbf{Q}^{-1}(\mathbf{y} - \mathbf{h}(\mathbf{p})) = \mathbf{S}^T(\mathbf{p}) \mathbf{Q}^{-1}(\mathbf{y} - \mathbf{h}(\mathbf{p})) \quad (3.183)$$

und für die Fisher-Informationsmatrix

$$\mathbf{I}(\mathbf{p}) = \mathbf{S}^T(\mathbf{p}) \mathbf{Q}^{-1} \underbrace{\mathbb{E}\left((\mathbf{y} - \mathbf{h}(\mathbf{p}))(\mathbf{y} - \mathbf{h}(\mathbf{p}))^T\right)}_{\mathbf{Q}} \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{S}(\mathbf{p}) = \mathbf{S}^T(\mathbf{p}) \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{S}(\mathbf{p}) , \quad (3.184)$$

woraus die Cramér-Rao-Schranke

$$\mathbb{E}((\hat{\mathbf{p}} - \mathbf{p})(\hat{\mathbf{p}} - \mathbf{p})^T) \geq (\mathbf{S}^T(\mathbf{p}) \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{S}(\mathbf{p}))^{-1} \quad (3.185)$$

folgt. Sie stimmt also in diesem Fall mit der näherungsweise Schranke gemäß Satz 3.1 überein. Ein Vergleich mit (3.17) zeigt, dass der BLUE Schätzer (3.16) im Falle eines linearen Modells die Cramér-Rao-Schranke erreicht, d. h. er ist effizient.

Bemerkung 3.4. Basierend auf den Ergebnissen dieses Beispiels wird klar, dass die in den Beispielen 3.1 und 3.2 berechneten Gramschen Matrizen \mathbf{G} im Falle von normalverteilten Messstörungen \mathbf{v}_k bzw. $\mathbf{v}(t)$ gleich der Fisher-Informationsmatrix $\mathbf{I}(\mathbf{x}_0)$ sind und dass die in diesen Beispielen berechneten BLUE Schätzer für den Anfangszustand \mathbf{x}_0 die Cramér-Rao-Schranke erreichen, d. h. effizient sind.

Verteilung eines linearen Schätzers

Es soll nun geklärt werden, welche statistische Verteilung ein linearer Schätzer $\hat{\mathbf{p}} = \mathbf{K}\mathbf{y}$ für \mathbf{p} bei normalverteilter Störung \mathbf{v} besitzt. Aus $\mathbf{v} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{Q})$ folgt mit dem nichtlinearen Modell (3.95) wieder

$$\mathbf{y} \sim \mathcal{N}(\mathbf{h}(\mathbf{p}), \mathbf{Q}) . \quad (3.186)$$

Die Anwendung des Satzes 3.3 auf den linearen Schätzer $\hat{\mathbf{p}} = \mathbf{K}\mathbf{y}$ zeigt, dass $\hat{\mathbf{p}}$ normalverteilt mit dem Erwartungswert $\mathbf{K}\mathbf{h}(\mathbf{p})$ und der Kovarianzmatrix $\mathbf{K}\mathbf{Q}\mathbf{K}^T$ ist, d. h.

$$\hat{\mathbf{p}} \sim \mathcal{N}(\mathbf{K}\mathbf{h}(\mathbf{p}), \mathbf{K}\mathbf{Q}\mathbf{K}^T). \quad (3.187)$$

Speziell ergibt sich im Falle des linearen Modells (3.1), also für $\mathbf{h}(\mathbf{p}) = \mathbf{S}\mathbf{p}$, und bei Verwendung der zeilenregulären Matrix $\mathbf{K} = (\mathbf{S}^T\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{S})^{-1}\mathbf{S}^T\mathbf{Q}^{-1}$ (BLUE Schätzer gemäß (3.16))

$$\hat{\mathbf{p}} \sim \mathcal{N}(\mathbf{p}, (\mathbf{S}^T\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{S})^{-1}) \quad (3.188)$$

(siehe dazu auch (3.17)).

Vertrauensbereich für die zu schätzenden Parameter

Bislang wurden verschiedene Möglichkeiten der Konstruktion eines Schätzers $\hat{\mathbf{p}}$ für die unbekannt Systemparameter $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^n$ vorgestellt. In der Regel weicht $\hat{\mathbf{p}}$ vom wahren Wert \mathbf{p} ab. Es kann daher nützlich sein, alternativ (oder in Ergänzung) zu einem Schätzer $\hat{\mathbf{p}}$ ein (möglichst eingeschränktes) Gebiet $K(\mathbf{y})$ im Parameterraum \mathbb{R}^n anzugeben, von dem behauptet werden kann, dass es die unbekannt Systemparameter \mathbf{p} mit vorgegebener Wahrscheinlichkeit enthält. Ein solches Gebiet wird mit der nachfolgenden Definition angegeben.

Definition 3.5. Ein Gebiet $K(\mathbf{y}) \subseteq \mathbb{R}^n$ in Abhängigkeit der zufälligen Ausgangswerte \mathbf{y} wird als *Vertrauensbereich* (Konfidenzbereich) für die zu schätzenden Parameter \mathbf{p} mit dem Niveau $1 - \alpha$ bezeichnet, wenn die Wahrscheinlichkeit, dass $K(\mathbf{y})$ den Punkt \mathbf{p} enthält, (unabhängig von den konkreten Werten \mathbf{p}) die Bedingung

$$P(\mathbf{p} \in K(\mathbf{y})) \geq 1 - \alpha \quad (3.189)$$

erfüllt. Der Wert $\alpha \in [0, 1]$ wird als *Irrtumswahrscheinlichkeit* bezeichnet.

Für eine detailliertere Definition wird auf [3.18, 3.19] verwiesen. Praktisch wird die Irrtumswahrscheinlichkeit α häufig im einstelligen Prozentbereich gewählt. Für ein gegebenes Niveau $1 - \alpha$ ist das Gebiet $K(\mathbf{y})$ nicht eindeutig, da verschiedene Berechnungsvorschriften $K(\mathbf{y})$ die Bedingung (3.189) erfüllen können. Während $\hat{\mathbf{p}}$ eine *Punktschätzung* für die unbekannt Parameter \mathbf{p} realisiert, kann $K(\mathbf{y})$ als *Bereichsschätzung* für \mathbf{p} mit Irrtumswahrscheinlichkeit α verstanden werden. Es sei betont, dass \mathbf{p} eine *deterministische* Größe und $K(\mathbf{y})$ ein *zufälliges* Gebiet ist.

Für den Fall einer normalverteilten Störung $\mathbf{v} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{Q})$ wird nun angelehnt an [3.20] eine konkrete Berechnungsvorschrift für einen Vertrauensbereich $K(\mathbf{y})$ angegeben.

Definition 3.6 (Mahalanobis-Distanz). Gilt für Zufallsvariablen $\mathbf{z} \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ mit $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^n$, so wird die Größe

$$d(\mathbf{z}, \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}) = \sqrt{(\mathbf{z} - \boldsymbol{\mu})^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\mathbf{z} - \boldsymbol{\mu})} \quad (3.190)$$

(vgl. den Exponenten in (3.177)) als *Mahalanobis-Distanz* bezeichnet und ihr Quadrat $d^2(\mathbf{z}, \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ genügt der sogenannten χ_n^2 -Verteilung mit n Freiheitsgraden⁴.

Es sei $\chi_n^2(\alpha)$ das α -Quantil der χ_n^2 -Verteilung, d. h. es gilt $P(x \leq \chi_n^2(\alpha)) = \alpha$. Definitionen der χ_n^2 -Verteilung, ihrer Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion und ihrer Verteilungsfunktion sind z. B. in [3.18, 3.19] zu finden.

Gemäß (3.187) genügt ein linearer erwartungstreuer Schätzer $\hat{\mathbf{p}} = \mathbf{K}\mathbf{y}$ der Normalverteilung

$$\hat{\mathbf{p}} \sim \mathcal{N}(\mathbf{p}, \mathbf{K}\mathbf{Q}\mathbf{K}^T). \quad (3.191)$$

Folglich ist die Mahalanobis-Distanz

$$d(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{p}, \mathbf{K}\mathbf{Q}\mathbf{K}^T), \quad (3.192)$$

welche natürlich ebenfalls eine Zufallszahl ist, ein skalares Maß für den Schätzfehler $\hat{\mathbf{p}} - \mathbf{p}$. Im Parameterraum \mathbb{R}^n bilden alle Punkte $\tilde{\mathbf{p}}$ mit einer Mahalanobis-Distanz $d(\tilde{\mathbf{p}}, \mathbf{p}, \mathbf{K}\mathbf{Q}\mathbf{K}^T) \leq \bar{d}$ ein Hyperellipsoid mit dem Mittelpunkt \mathbf{p} . Für eine bestimmte Distanz $\bar{d} \in [0, \infty)$ lässt sich diese Punktmenge sofort in der Form

$$\left\{ \tilde{\mathbf{p}} \in \mathbb{R}^n \mid \sqrt{(\tilde{\mathbf{p}} - \mathbf{p})^T (\mathbf{K}\mathbf{Q}\mathbf{K}^T)^{-1} (\tilde{\mathbf{p}} - \mathbf{p})} \leq \bar{d} \right\} \quad (3.193)$$

angeben. Die Wahrscheinlichkeit, dass $\hat{\mathbf{p}}$ in dieser Menge liegt, entspricht der Wahrscheinlichkeit, dass $d(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{p}, \mathbf{K}\mathbf{Q}\mathbf{K}^T) \leq \bar{d}$ gilt⁵. Da nun $d^2(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{p}, \mathbf{K}\mathbf{Q}\mathbf{K}^T) = d^2(\mathbf{p}, \hat{\mathbf{p}}, \mathbf{K}\mathbf{Q}\mathbf{K}^T) \sim \chi_n^2$ gilt, stellt die Menge

$$K(\mathbf{y}) = \left\{ \tilde{\mathbf{p}} \in \mathbb{R}^m \mid (\mathbf{K}\mathbf{y} - \tilde{\mathbf{p}})^T (\mathbf{K}\mathbf{Q}\mathbf{K}^T)^{-1} (\mathbf{K}\mathbf{y} - \tilde{\mathbf{p}}) \leq \chi_n^2(1 - \alpha) \right\} \quad (3.194)$$

einen Vertrauensbereich für \mathbf{p} mit dem Niveau $1 - \alpha$ dar. Diese Menge definiert im Parameterraum ein Hyperellipsoid mit dem Mittelpunkt $\mathbf{K}\mathbf{y}$. Für den Fall $n = 2$ veranschaulicht Abbildung 3.4 den Vertrauensbereich für \mathbf{p} anhand von zwei Realisierungen der Zufallsvariablen \mathbf{y} .

Wird im Falle des linearen Modells (3.1), d. h. $\mathbf{h}(\mathbf{p}) = \mathbf{S}\mathbf{p}$, die zeilenreguläre Matrix $\mathbf{K} = (\mathbf{S}^T \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{S})^{-1} \mathbf{S}^T \mathbf{Q}^{-1}$ verwendet (BLUE Schätzer gemäß (3.16)), so vereinfacht sich (3.194) zu

$$K(\mathbf{y}) = \left\{ \tilde{\mathbf{p}} \in \mathbb{R}^m \mid (\mathbf{K}\mathbf{y} - \tilde{\mathbf{p}})^T (\mathbf{S}^T \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{S}) (\mathbf{K}\mathbf{y} - \tilde{\mathbf{p}}) \leq \chi_m^2(1 - \alpha) \right\}. \quad (3.195)$$

⁴Um dies zu sehen, kann \mathbf{z} unter Berücksichtigung von Satz 3.3 auf die standardnormalverteilten Zufallsvariablen

$$\mathbf{Q}^{-1/2}(\mathbf{z} - \boldsymbol{\mu}) \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{E})$$

transformiert werden. Die Zufallsvariable $d^2(\mathbf{z}, \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ entspricht folglich den aufsummierten Quadraten von n unabhängigen standardnormalverteilten Zufallsvariablen und ist auf dem Intervall $[0, \infty)$ definiert. Eine solche Summe genügt per Definition der χ_n^2 -Verteilung mit n Freiheitsgraden und ihr Erwartungswert ist n .

⁵Klarerweise gilt auf der durch $d(\tilde{\mathbf{p}}, \mathbf{p}, \mathbf{K}\mathbf{Q}\mathbf{K}^T) = \bar{d}$ definierten Oberfläche, dass die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion $P_{\tilde{\mathbf{p}}}(\tilde{\mathbf{p}})$ konstant ist.

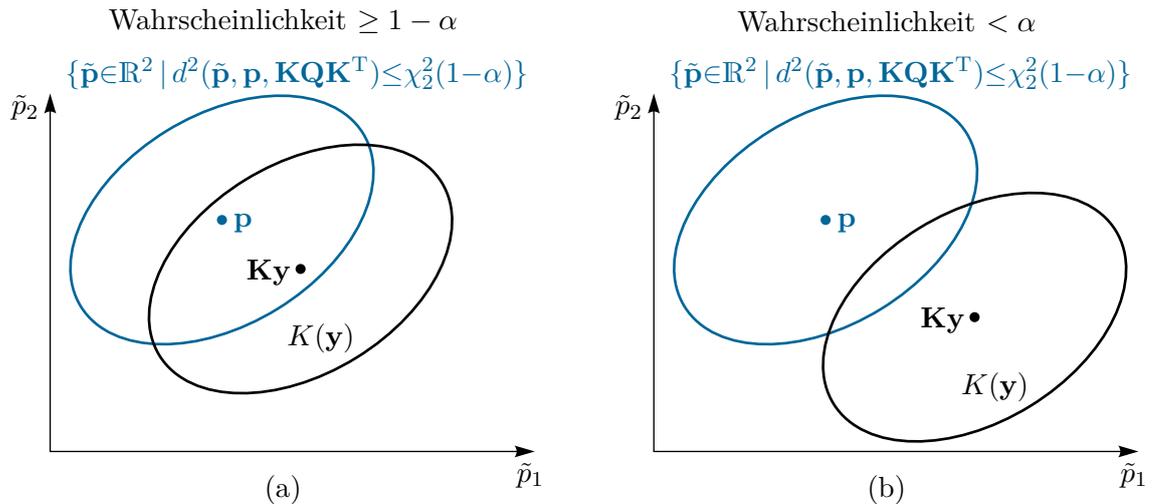


Abbildung 3.4: Vertrauensbereich für $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^2$ mit dem Niveau $1 - \alpha$, (a) korrekte Bereichsschätzung: $\mathbf{p} \in K(\mathbf{y})$, (b) Irrtum: $\mathbf{p} \notin K(\mathbf{y})$.

3.3 Optimale Versuchsplanung

Die beim Entwurf eines Schätzers für Systemparameter $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^n$ erreichbare Schätzgüte hängt erheblich von den verfügbaren Ausgangswerten $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^m$ und deren Messgenauigkeit ab. Die *optimale Versuchsplanung* (englisch: *optimal design of experiments*) [3.21–3.23] verfolgt nun das Ziel, die Beschaffung von Ausgangswerten (im Versuch oder im laufenden Betrieb eines Systems) so zu planen, dass die erreichbare Schätzgüte maximiert wird. Diese Planungsaufgabe kann z. B. folgende Entwurfsfreiheitsgrade umfassen:

- Auswahl von physikalischen Messgrößen
- Zeiträume und Zeitpunkte von Messungen
- Type, Präzision, Anzahl und örtliche Positionierung von Sensoren
- Aufbau, Funktion, Konfiguration und Größe des Systems bzw. Versuchs
- Anregung und Betriebszustand des Systems (Anfangsbedingungen, Randbedingungen, Eingangstrajektorie)

Natürlich wird die erreichbare Schätzgüte auch von der Wahl des Modells (siehe (3.1) oder (3.95)) und der Auswahl an zu schätzenden Systemparametern \mathbf{p} beeinflusst. Alle weiteren nicht in \mathbf{p} enthaltenen Systemparameter müssen anderweitig festgelegt werden, z. B. basierend auf Vorwissen, speziellen Messungen, Datenblättern, Literatur, etc.

Als Beurteilungskriterium für die erreichbare Schätzgüte wird meist eine untere Schranke \mathbf{R}^{-1} für die Kovarianzmatrix des Parameterschätzfehlers $E((\hat{\mathbf{p}} - \mathbf{p})(\hat{\mathbf{p}} - \mathbf{p})^T)$ in der Form

$$E((\hat{\mathbf{p}} - \mathbf{p})(\hat{\mathbf{p}} - \mathbf{p})^T) \geq \mathbf{R}^{-1} \quad (3.196)$$

oder eine daraus abgeleitete skalare Funktion $r(\mathbf{R})$ herangezogen. Konkret wird bei der Planung die (nichtlineare) Optimierungsaufgabe

$$\min r(\mathbf{R}) \quad (3.197)$$

formuliert und gelöst. Das Lösen von (3.197) kann numerisch anspruchsvoll sein.

Welche Matrix?

Für \mathbf{R} kann gemäß den Sätzen 3.1 und 3.2

$$\mathbf{R} = \mathbf{S}^T(\mathbf{p})\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{S}(\mathbf{p}) \quad (3.198a)$$

oder

$$\mathbf{R} = \mathbf{I}(\mathbf{p}) \quad (3.198b)$$

verwendet werden.

Für die Wahl (3.198b) spricht, dass es sich bei $\mathbf{I}^{-1}(\mathbf{p})$ um eine rigorose Schranke handelt. Die Berechnung der Fisher-Informationsmatrix setzt jedoch die Kenntnis der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion $P_{\mathbf{y}}(\mathbf{y}; \mathbf{p})$ voraus.

Die Wahl (3.198a) kann wie folgt motiviert werden:

- $\mathbf{S}^T(\mathbf{p})\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{S}(\mathbf{p})$ kann einfach und ohne Kenntnis von Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen berechnet werden.
- Für ein lineares Modell (3.1) und den BLUE Schätzer (3.16) entspricht $(\mathbf{S}^T\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{S})^{-1}$ exakt der Kovarianzmatrix des Parameterschätzfehlers (siehe (3.17)). Im Optimierungsproblem der dazu korrespondierenden gewichteten linearen Least-Squares Methode (siehe Aufgabe 3.1) entspricht $\mathbf{S}^T\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{S}$ der Hessematrix der Kostenfunktion.
- In der gewichteten nichtlinearen Least-Squares Optimierungsaufgabe (3.112) mit der Gewichtungsmatrix $\mathbf{W} = \mathbf{Q}^{-1}$ entspricht $\mathbf{S}^T(\mathbf{p})\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{S}(\mathbf{p})$ der Gauss-Newton Approximation der Hessematrix der Kostenfunktion.
- Wie in Beispiel 3.6 gezeigt, gilt bei normalverteilter Störung für die Fisher-Informationsmatrix $\mathbf{I}(\mathbf{p}) = \mathbf{S}^T(\mathbf{p})\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{S}(\mathbf{p})$, d. h. (3.198a) und (3.198b) sind identisch.
- Wie in Abschnitt 3.2.5 gezeigt, gilt bei einem linearen Modell (3.1) mit normalverteilter Störung und Verwendung des BLUE Schätzers (3.16) für den Schätzwert $\hat{\mathbf{p}} \sim \mathcal{N}(\mathbf{p}, (\mathbf{S}^T\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{S})^{-1})$ und es kann für \mathbf{p} der Vertrauensbereich

$$K(\mathbf{y}) = \left\{ \tilde{\mathbf{p}} \in \mathbb{R}^m \mid (\mathbf{K}\mathbf{y} - \tilde{\mathbf{p}})^T (\mathbf{S}^T\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{S}) (\mathbf{K}\mathbf{y} - \tilde{\mathbf{p}}) \leq \chi_m^2(1 - \alpha) \right\}. \quad (3.199)$$

mit dem Niveau $1 - \alpha$ angegeben werden. $K(\mathbf{y})$ definiert im Parameterraum \mathbb{R}^n ein Hyperellipsoid, dessen Größe, Form und Orientierung ausschließlich durch $\mathbf{S}^T\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{S}$ festgelegt sind. Natürlich soll dieses Hyperellipsoid möglichst klein sein.

Alternativ zu (3.198) kann \mathbf{R} im Sinne einer Minimierung der in Abschnitt 3.2.3 besprochenen Kollinearität (allerdings ohne direkten Bezug zur Kovarianzmatrix des Schätzfehlers) in der Form

$$\mathbf{R} = \tilde{\mathbf{S}}^T \tilde{\mathbf{S}} \quad (3.200)$$

mit (dem zumeist von \mathbf{p} abhängigen) $\tilde{\mathbf{S}}$ gemäß (3.132) gewählt werden. Diese Wahl hat gegenüber (3.198) den Vorteil, dass \mathbf{R} hier nicht mehr von den Einheiten bzw. der Skalierung der Parameter \mathbf{p} abhängt.

Die Berechnung von \mathbf{R} kann *ohne* Kenntnis der Ausgangswerte \mathbf{y} erfolgen, also bereits vorab. Bei dieser Berechnung werden jedoch (im Allgemeinen) die *unbekannten* (zu schätzenden) Systemparameter \mathbf{p} benötigt. Ein gängiger Ausweg aus diesem Dilemma ist hier die Verwendung von Schätzwerten für \mathbf{p} anstatt der wahren Werten \mathbf{p} . Die Optimierungsaufgabe (3.197) und ihre Lösung sind daher nur lokal in der Nähe der verwendeten Parameterwerte gültig [3.21]. Gegebenenfalls sind die optimale Versuchsplanung und die Schätzung von \mathbf{p} iterativ zu wiederholen.

Es soll noch kurz die Bedeutung der *Eigenwerte* und *Eigenvektoren* der Matrix \mathbf{R} diskutiert werden. Die Matrix \mathbf{R} und ihre Inverse \mathbf{R}^{-1} sind symmetrisch und somit diagonalisierbar. Folglich sind ihre Eigenvektoren orthogonal. Es seien λ_i mit $i = 1, \dots, n$ die Eigenwerte der Matrix \mathbf{R} . Somit sind $1/\lambda_i$ die Eigenwerte der Matrix \mathbf{R}^{-1} . Die implizite Gleichung

$$\mathbf{p}^T \mathbf{R} \mathbf{p} = c^2 \quad (3.201)$$

definiert im Parameterraum \mathbb{R}^n ein Hyperellipsoid, dessen Halbachsen die Längen $c/\sqrt{\lambda_i}$ aufweisen und entlang der zugehörigen Eigenvektoren von \mathbf{R} ausgerichtet sind. Die Interpretation von Hyperellipsoiden (für verschiedene Werte c) im Sinne der Kovarianzmatrix des Schätzfehlers bzw. eines Vertrauensbereiches für \mathbf{p} folgt direkt aus den vorangegangenen Überlegungen. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit kann $c = 1$ gesetzt werden, so dass für die weitere geometrische Interpretation das durch

$$\mathbf{p}^T \mathbf{R} \mathbf{p} = 1 \quad (3.202)$$

bestimmte Ellipsoid herausgegriffen wird.

Welches Beurteilungskriterium?

Je nach Wahl der Funktion $r(\mathbf{R})$ in der Optimierungsaufgabe (3.197) können nun folgende Beurteilungskriterien zur optimalen Versuchsplanung unterschieden werden. Weitere Beurteilungskriterien und Details zu den nachfolgend angegebenen Funktionen sind z. B. in [3.14, 3.21, 3.23] zu finden.

- **A-Optimalität:** Es wird die Funktion

$$r(\mathbf{R}) = \text{spur}(\mathbf{R}^{-1}) = \sum_{i=1}^n \frac{1}{\lambda_i} \quad (3.203)$$

minimiert, wobei λ_i die Eigenwerte der Matrix \mathbf{R} sind. Damit wird versucht, die Summe (oder gleichwertig das arithmetische Mittel, A steht für average) der Einzelvarianzen der Parameterschätzfehler (siehe z. B. (3.4)) zu minimieren. Geometrisch kann dies so gedeutet werden, dass die pythagoreische Summe der Halbachsenlängen des in (3.202) definierten Hyperellipsoids minimiert wird. Dies entspricht einer

Minimierung der Diagonalenlänge jenes kleinstmöglichen Hyperquaders der das Hyperellipsoid umschreibt und dessen Kanten parallel zu den Achsen des Hyperellipsoids sind.

- **D-Optimalität:** Es wird die Funktion

$$r(\mathbf{R}) = \det(\mathbf{R}^{-1}) = \frac{1}{\det(\mathbf{R})} = \prod_{i=1}^n \frac{1}{\lambda_i} \quad (3.204)$$

minimiert. Die Determinante einer Kovarianzmatrix wird als *generalisierte Varianz* bezeichnet. Die D-Optimalität (D steht für Determinante) versucht daher die generalisierte Varianz des Parameterschätzfehlers zu minimieren. Geometrisch kann dies so gedeutet werden, dass der Rauminhalt des in (3.202) definierten Hyperellipsoids minimiert wird. Dies entspricht einer Minimierung des Rauminhalts jenes kleinstmöglichen Hyperquaders der das Hyperellipsoid umschreibt und dessen Kanten parallel zu den Achsen des Hyperellipsoids sind. Die D-Optimalität hat den Nachteil, dass sie gute (kleine) Werte für $r(\mathbf{R})$ liefert sobald die Länge einer Halbachse des Hyperellipsoids klein wird. Die übrigen Halbachsenlängen können weiterhin groß sein und damit eine hohe Varianz von Parameterschätzfehlern erlauben.

- **E-Optimalität:** Es wird die Funktion

$$r(\mathbf{R}) = \max_i \frac{1}{\lambda_i} = \frac{1}{\min_i \lambda_i} \quad (3.205)$$

minimiert. Damit wird versucht, die größtmögliche (E steht für extreme) Varianz des Parameterschätzfehlers (entspricht der Varianz der am unzuverlässigsten schätzbaren Linearkombination $\mathbf{t}^T \mathbf{p}$ mit $\|\mathbf{t}\|_2 = 1$) zu minimieren. Geometrisch kann dies so gedeutet werden, dass die Länge der längsten Halbachse des in (3.202) definierten Hyperellipsoids minimiert wird. Wird $\mathbf{R} = \tilde{\mathbf{S}}^T \tilde{\mathbf{S}}$ verwendet, so entspricht die E-Optimalität einer Maximierung der Größe $1/\rho$ aus (3.134).

- **Erweiterte E-Optimalität:** Es wird die Funktion

$$r(\mathbf{R}) = \frac{\max_i \lambda_i}{\min_i \lambda_i} \quad (3.206)$$

minimiert⁶. Dies entspricht dem Verhältnis aus maximalem zu minimalem Eigenwert der Matrix \mathbf{R} und wird spektrale Konditionszahl von \mathbf{R} genannt [3.24]. Damit wird versucht, die Varianzen aller Parameterschätzfehler möglichst aneinander anzugleichen. Geometrisch kann dies so gedeutet werden, dass das in (3.202) definierte Hyperellipsoid möglichst zu einer Kugel wird. Es ist zu beachten, dass hierbei keine Rücksicht auf Ausmaß der Varianzen bzw. die Größe der Kugel genommen wird. Bei der Verwendung von $\mathbf{R} = \tilde{\mathbf{S}}^T \tilde{\mathbf{S}}$ ist dies unkritisch, da $\tilde{\mathbf{S}}$ die normierten Spalten von \mathbf{S} enthält.

⁶Natürlich gilt dann $r(\mathbf{R}) = r(\mathbf{R}^{-1})$.

Beispiel 3.7 (Optimale Anordnung von Sensoren). Ein Diffusionsprozess führt zu einem stationären Konzentrationsprofil $u(x)$ im Bereich $x \in [0, 1]$, welches durch das Zweipunkttrandwertproblem

$$0 = \frac{d^2}{dx^2}u(x) + 6p_1x + 2p_2 \quad x \in [0, 1] \quad (3.207a)$$

mit homogenen Randbedingungen

$$x(0) = x(1) = 0 \quad (3.207b)$$

definiert ist. Es sollen die Positionen x_1, \dots, x_m von m Sensoren für die Größen $u(x_1), \dots, u(x_m)$ so optimiert werden, dass aus den Messwerten bestmöglich die unbekanntem Modellparameter $\mathbf{p} = [p_1 \ p_2]^T$ geschätzt werden können. Die Sensoren sind identisch und ihre Messwerte werden von statistisch unabhängigen Störungen v_1, \dots, v_m mit Erwartungswert 0 verfälscht.

Die Lösung von (3.207) lautet

$$u(x) = \begin{bmatrix} x(1-x)(1+x) & x(1-x) \end{bmatrix} \mathbf{p}, \quad (3.208)$$

so dass sich die Ausgangswerte

$$\mathbf{y} = \mathbf{S}\mathbf{p} + \mathbf{v} \quad (3.209a)$$

mit

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} x_1(1-x_1)(1+x_1) & x_1(1-x_1) \\ \vdots & \vdots \\ x_m(1-x_m)(1+x_m) & x_m(1-x_m) \end{bmatrix} \quad (3.209b)$$

ergeben. Da es sich um identische Sensoren handelt und auf sie statistisch unabhängige Störungen wirken, erscheint die Annahme $E(\mathbf{v}\mathbf{v}^T) = \sigma^2\mathbf{E}$ mit einer beliebigen unbekanntem Varianz σ^2 gerechtfertigt. Daher wird

$$\mathbf{R} = \mathbf{S}^T\mathbf{S} \quad (3.210)$$

in der Optimierungsaufgabe

$$\min_{\mathbf{x} \in [0,1]^m} r(\mathbf{R}) \quad (3.211)$$

(siehe (3.197)) zur optimalen Anordnung der Sensoren verwendet.

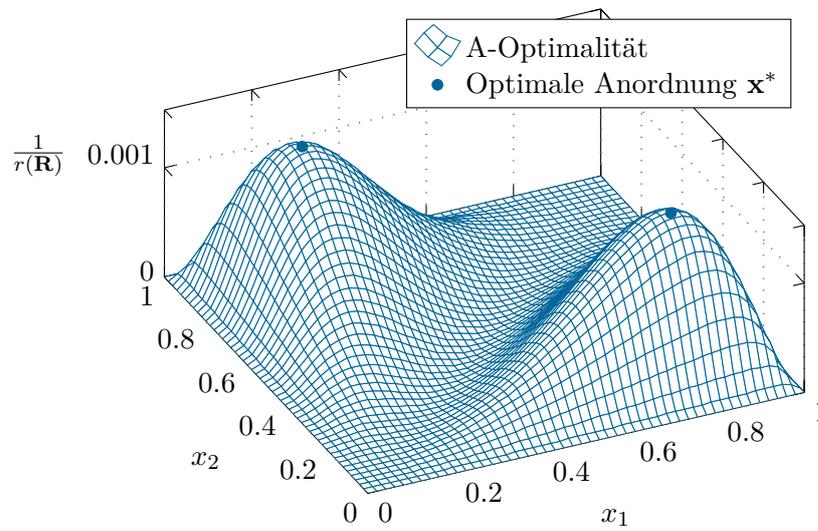


Abbildung 3.5: Kehrwert der Beurteilungsfunktion $r(\mathbf{R})$ für A-Optimalität und $m = 2$ Sensoren.

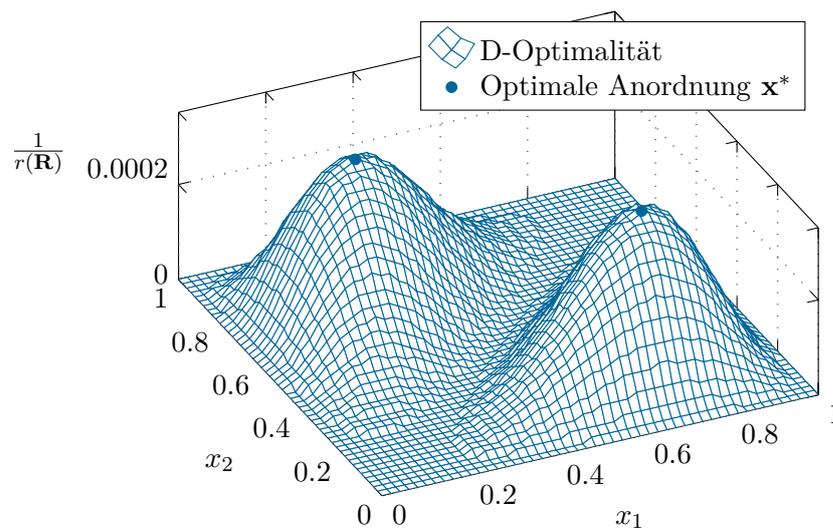


Abbildung 3.6: Kehrwert der Beurteilungsfunktion $r(\mathbf{R})$ für D-Optimalität und $m = 2$ Sensoren.

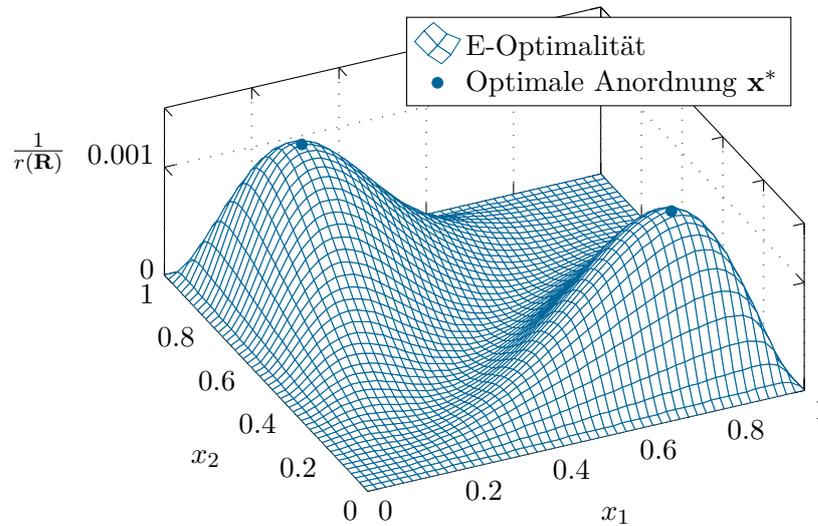


Abbildung 3.7: Kehrwert der Beurteilungsfunktion $r(\mathbf{R})$ für E-Optimalität und $m = 2$ Sensoren.

Für $m = 2$ Sensoren und Verwendung der Kriterien A-, D- und E-Optimalität sind die Werte $r(\mathbf{R})$ in den Abbildungen 3.5 bis 3.7 gezeigt. Konkret sind hier für übersichtlichere Zahlenwerte die (zu maximierenden) Kehrwerte $1/r(\mathbf{R})$ dargestellt. Wenn im Fall $m = 2$ zumindest ein Sensor an einem der Ränder 0 oder 1 positioniert ist, so ist \mathbf{S} nicht spaltenregulär und es gilt $1/r(\mathbf{R}) \rightarrow 0$.

Die Optimierungsaufgabe (3.211) kann numerisch, z. B. mit der MATLAB-Funktion `fmincon`, gelöst werden. Die daraus folgenden (global) optimalen Positionen der Sensoren sind in Tabelle 3.2 angegeben. Für $m > 2$ existieren in der Regel weitere lokale Optima.

Anzahl an Sensoren m	Optimale Sensorpositionen \mathbf{x}^*		
	A-Optimalität	D-Optimalität	E-Optimalität
2	0.221 46	0.276 39	0.220 84
	0.797 60	0.723 61	0.798 51
3	0.196 39	0.276 39	0.195 63
	0.196 39	0.276 39	0.195 63
	0.772 96	0.723 61	0.773 79
4	0.221 46	0.276 39	0.220 84
	0.221 46	0.276 39	0.220 84
	0.797 60	0.723 61	0.798 51
	0.797 60	0.723 61	0.798 51
5	0.207 02	0.276 39	0.206 32
	0.207 02	0.276 39	0.206 32
	0.207 02	0.276 39	0.206 32
	0.782 89	0.723 61	0.783 76
	0.782 89	0.723 61	0.783 76

Tabelle 3.2: Optimale Sensorpositionen.

Werden in diesem Beispiel $m > 2$ Sensoren verwendet, so werden stets alle Sensoren auf nur zwei verschiedene optimale Positionen aufgeteilt. Für gerade Werte m sind das stets die selben Positionen. Daraus folgt als bevorzugte Versuchsvariante die Verwendung von zwei Sensoren und deren wiederholtes Auslesen.

Für dieses Beispiel liefern A- und E-Optimalität sehr ähnliche Ergebnisse. Die D-Optimalität führt unabhängig von m immer zu den selben optimalen Sensorpositionen. Für dieses Beispiel sollte weder die erweiterte E-Optimalität noch die Matrix $\mathbf{R} = \tilde{\mathbf{S}}^T \tilde{\mathbf{S}}$ verwendet werden, da sich damit optimale Sensorpositionen beliebig nahe an den Rändern 0 und 1 ergeben. Je näher Sensoren an diesen Rändern platziert werden, desto kleiner ist die Sensitivität ihrer Messwerte bezüglich \mathbf{p} . Folglich ist eine Schätzung von \mathbf{p} basierend auf diesen Messwerten mit größeren Fehlern (Varianzen) verbunden. Die Absolutwerte dieser Sensitivitäten spielen in der erweiterten E-Optimalität aufgrund der Verhältnisbildung in (3.206) keine Rolle. Ebenso spielen sie in $\tilde{\mathbf{S}}$ keine Rolle, da $\tilde{\mathbf{S}}$ die normierten Spalten von \mathbf{S} enthält.

3.4 Literatur

- [3.1] S. Kay, *Fundamentals of Statistical Signal Processing: Estimation Theory*. New Jersey: Prentice-Hall, 1993, Bd. 1.
- [3.2] C. Byrne, *Signal Processing: A Mathematical Approach*, 2. Aufl. Boca Raton: CRC Press, 2015.
- [3.3] D. Sengupta und S. Jammalamadaka, *Linear Models: An Integrated Approach* (Series on Multivariate Analysis). New Jersey: World Scientific, 2003, Bd. 6.
- [3.4] W. Kemmetmüller, *Skriptum zur VO Regelungssysteme 1 (WS 2022/2023)*, Institut für Automatisierungs- und Regelungstechnik, TU Wien, 2022. Adresse: <https://www.acin.tuwien.ac.at/master/regelungssysteme-1/>.
- [3.5] Y. Eldar und A. Oppenheim, „Covariance shaping least-squares estimation,“ *IEEE Transactions on Signal Processing*, Jg. 51, Nr. 3, S. 686–697, März 2003.
- [3.6] T. Söderström und P. Stoica, *System Identification*. New York: Prentice Hall, 1989.
- [3.7] A. Steinböck, *Skriptum zur VU Optimierung (WS 2022/2023)*, Institut für Automatisierungs- und Regelungstechnik, TU Wien, 2022. Adresse: <https://www.acin.tuwien.ac.at/master/optimierung/>.
- [3.8] S. Kay, *Intuitive Probability and Random Processes using MATLAB*, 1. Aufl. New York: Springer, 2005.
- [3.9] D. Montgomery und G. Runger, *Applied Statistics and Probability for Engineers*, 7. Aufl. New York: John Wiley & Sons, 2018.
- [3.10] K. Ramachandran und C. Tsokos, *Mathematical Statistics with Applications*. Amsterdam: Academic Press, 2009.
- [3.11] D. Belsley, E. Kuh und R. Welsch, *Regression Diagnostics: Identifying Influential Data and Sources of Collinearity*. Hoboken: John Wiley & Sons, 2004.
- [3.12] R. Brun, P. Reichert und H. Künsch, „Practical identifiability analysis of large environmental simulation models,“ *Water Resources Research*, Jg. 37, Nr. 4, S. 1015–1030, 2001.
- [3.13] P. Tan, M. Steinbach, A. Karpatne und V. Kumar, *Introduction to Data Mining*, 2. Aufl. New York: Pearson, 2019.
- [3.14] K. McLean und K. McAuley, „Mathematical modelling of chemical processes—Obtaining the best model predictions and parameter estimates using identifiability and estimability procedures,“ *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, Jg. 90, Nr. 2, S. 351–366, 2012.
- [3.15] F. Hlawatsch, *Skriptum zur VO Parameter Estimation Methods (SS 2023)*, Institute of Telecommunications, TU Wien, 2023.
- [3.16] J. Norton, *An Introduction to Identification*. London: Academic Press, 1988.
- [3.17] Y. Tong, *The Multivariate Normal Distribution* (Springer Series in Statistics). New York: Springer, 1990.

-
- [3.18] H. Georgii, *Stochastik - Einführung in die Wahrscheinlichkeitstheorie und Statistik*, 5. Aufl. Berlin: De Gruyter, 2015.
- [3.19] K. Wichmann, *Auswertung von Messdaten - Statistische Methoden für Geo- und Ingenieurwissenschaften*. München: Oldenbourg, 2007.
- [3.20] B. Wang, W. Shi und Z. Miao, „Confidence analysis of standard deviational ellipse and its extension into higher dimensional Euclidean space,“ *PLOS ONE*, Jg. 10, Nr. 3, e0118537, 2015.
- [3.21] A. Emery und A. Nenarokomov, „Optimal experiment design,“ *Measurement Science and Technology*, Jg. 9, Nr. 6, S. 864–876, Juni 1998.
- [3.22] F. Pukelsheim, *Optimal Design of Experiments* (Classics in Applied Mathematics). SIAM - Society for Industrial und Applied Mathematics, 2006.
- [3.23] A. Atkinson, A. Donev und R. Tobias, *Optimum Experimental Designs with SAS* (Oxford Statistical Science Series). Oxford: Oxford University Press, 2007.
- [3.24] G. Golub und C. Van Loan, *Matrix Computations* (Johns Hopkins Studies in the Mathematical Sciences), 4. Aufl. Baltimore: Johns Hopkins University Press, 2013.