



Zur Bestimmung und Anwendung von Kalibrier- und Korrektionsfunktionen

Hubert Schmidt

Es wird diskutiert, ob die Anbringung von Korrekturen an unabhängigen Messwerten Korrelationen zwischen den korrigierenden Messwerten begründen kann.

1 Einleitung

Das Ziel jeder Kalibrierung ist die Bestimmung der funktionalen Abhängigkeit zwischen den Kalibrier-Messwerten y_i und den Kalibrier-Sollwerten x_i mit $i \in \{1, \dots, n\}$ (nachfolgend „Kalibrierdaten“ genannt), um spätere, anderweitig ermittelte Messwerte y_t mit $t \in \{1, \dots, m\}$ korrigieren zu können. In der Praxis werden jedoch häufig zunächst die Kalibrierabweichungen k_i zwischen den Messwerten und den Sollwerten

$$k_i = y_i - x_i \quad (1)$$

gebildet und die funktionale Abhängigkeit (Kalibrierfunktion) wird dann zwischen den Kalibrierabweichungen k_i und den Sollwerten x_i bestimmt. Mit der Kalibrierfunktion werden anschließend für die anderweitigen Messwerte y_t Korrektionswerte \hat{k}_t bestimmt und die Messwerte berichtigt:

$$\hat{x}_t = y_t - \hat{k}_t \quad \text{mit} \quad \hat{x}_t = \text{berichtigter Messwert} \quad (2)$$

Den Messwerten y_t lassen sich a priori-Varianzen σ_t zuordnen. Für die einzelnen Korrektionswerte \hat{k}_t können Varianzschätzwerte $\hat{\sigma}_{\hat{k}_t}$ berechnet werden, sodass mit Gl. (2) die Anwendung des Varianz/Kovarianzfortpflanzungsgesetzes begründet scheint. Würden alle Korrektionschätzwerte im Vektor $\hat{\mathbf{k}}_t$ zusammengefasst berechnet, ergäbe sich eine Kovarianzmatrix $\hat{\Sigma}_{\hat{\mathbf{k}}_t}$, mit der sich sogar Korrelationen zwischen den berichtigten Messwerten nachweisen ließen.

Nachfolgend wird dargelegt, dass diese Schlussfolgerungen bezüglich Gl. (2) nicht zutreffend sind. Dazu werden zunächst die Voraussetzungen zur Anwendung des Varianz/Kovarianzfortpflanzungsgesetzes rekapituliert und im weiteren Verlauf die Berechnung von korrigierten Messwerten und ihrer Varianzschätzwerte mit Hilfe eines Prognosemodells dargelegt.

2 Varianz/Kovarianzfortpflanzungsgesetz

Das „Varianz/Kovarianzfortpflanzungsgesetz“ der Ausgleichsrechnung wird in der mathematischen Statistik als „Kovarianzmatrix linearer Transformationen von Zufallsvariablen“ bezeichnet, z. B. BENNING (2002, Kap. 3.5.1 und Gl. (3.77)).

Mit dem Zufallsvektor \mathbf{x} und einer (p,q) -Matrix \mathbf{A} sowie einem $(q,1)$ -Vektor \mathbf{b} von Konstanten ergibt sich durch lineare Transformation den $(q,1)$ -Zufallsvektor

$$\mathbf{y} = \mathbf{A}\mathbf{x} + \mathbf{b}, \quad (3)$$

für dessen Kovarianzmatrix gilt

$$\Sigma_{\mathbf{y}} = \mathbf{A}\Sigma_{\mathbf{x}}\mathbf{A}' \quad (4)$$

Mit der Kovarianzmatrix $\Sigma_{\mathbf{x}}$, welche die **a priori**-Varianzen $\sigma_{x_i}^2$ und -Kovarianzen $\sigma_{x_i x_j}$ der im Vektor \mathbf{x} zusammengefassten Messgrößen enthält, ergibt sich die Kovarianzmatrix $\Sigma_{\mathbf{y}}$ der im Vektor \mathbf{y} zusammengefassten Zufallsvariablen, ebenfalls mit **a priori**-Varianzen $\sigma_{y_i}^2$ und -Kovarianzen $\sigma_{y_i y_j}$.

Dies verdeutlicht, dass auf Gl. (2) das Varianz/Kovarianzfortpflanzungsgesetz nicht anwendbar ist, da in Gl. (2) lediglich den zu berichtigten Messwerten y_t a priori-Varianzen $\sigma_{y_t}^2$ zugewiesen werden können. Die **gemischte Addition** der a priori-Varianzen $\sigma_{y_t}^2$ einerseits und der Varianzschätzwerte $\hat{\sigma}_{\hat{k}_t}^2$ der Korrektion \hat{k}_t andererseits ist in Gl. (4) **nicht definiert**. Dem mit Gl. (4) definierten Kovarianzfortpflanzungsgesetz liegt die Theorie der Faltung von Normalverteilungen (mit a priori-Varianzen σ_i^2) zugrunde, aus denen sich wiederum eine Normalverteilung (mit a priori-Varianz σ^2) ergibt. Bei der gemischten Addition einer a priori-Varianz σ^2 einerseits und eines Varianzschätzwertes $\hat{\sigma}^2$ andererseits liegt jedoch die Faltung einer Normalverteilung mit einer t-Verteilung zugrunde, sodass die Faltungsverteilung nicht normalverteilt sein kann.

Fazit:

Die Berechnung berichtigter Messwerte nach Gl. (2) lässt sich nicht dem Bereich der linearen Transformation von Zufallsvariablen zuordnen, sondern stellt ein Schätz- bzw. Prognoseproblem dar, welches mit den Methoden der induktiven Statistik zu lösen ist.

3 Berechnung von Kalibrier- und Korrektionsfunktionen

3.1 Direkte und iterative Berechnung von Regressionsfunktionen

Die Bestimmung der funktionalen Abhängigkeit (Regressions- bzw. Kalibrierfunktion) erfolgt zwischen den Kalibrier-Messwerten y_i und den Kalibrier-Sollwerten x_i . Nicht die nach Gl. (1) berechneten Kalibrierabweichungen k_i , sondern die y_i stellen die originären Messwerte dar. Die Kalibrierabweichungen k_i sind lediglich gekürzte Beobachtungen, wie sie bei iterativen Ausgleichungen nach Gauß-Newton verwendet werden, siehe z. B. BENNING (2002, Kap. 5.1.2).

Die im Beobachtungsvektor \mathbf{y} zusammengefassten Messwerte y_i sind unkorreliert, d. h. nur die Elemente auf der Hauptdiagonale ihrer Kovarianzmatrix $\Sigma_{\mathbf{y}}$ sind ungleich Null. Die a priori-Varianzen sind entweder gleich ($\Sigma_{\mathbf{y}} = \sigma^2 \mathbf{I}$, Homoskedastizität) oder unterschiedlich groß ($\Sigma_{\mathbf{y}} = \sigma^2 \mathbf{P}^{-1}$, Heteroskedastizität).

3.2 Direkte Regressionsberechnung

3.2.1 Berechnung der Kalibrierfunktion

Der Sachverhalt sei am Beispiel der Bestimmung der Additionsfunktion eines Distanzmessers verdeutlicht, für den sich auf einer Prüfstrecke mit den Sollwerten x_i die Messwerte y_i ergeben. Zur vereinfachten Schreibweise seien die Messwerte y_i (ohne Einschränkung der Allgemeinheit) als gleichgenau vorausgesetzt, so dass im Gauß-Markoff-Modell gilt:

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\beta + \mathbf{e} \quad \text{mit} \quad E(\mathbf{e}) = \mathbf{0}, \quad \Sigma = \sigma^2 \mathbf{I} \quad (5)$$

$$E(\mathbf{y}) = \mathbf{X}\beta \quad \text{mit} \quad \Sigma_{\mathbf{y}} = \sigma^2 \mathbf{I}$$

\mathbf{y} : beobachtbare Zufallsvariablen Y_i
 \mathbf{X} : beobachtbare vorgegebene (deterministische) Variablen
 β : fester unbekannter Parametervektor
 \mathbf{e} : nicht beobachtbare Zufallsvariablen e_i
 Aus den Kalibrierdaten folgt die geschätzte Kalibrierfunktion

$$\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{X}\hat{\beta}. \quad (6)$$

In BENNING (2002, Beispiel 5.6) ist die Bestimmung der Additionskorrektur eines Distanzmessinstruments erläutert. Die Messwerte dieses Beispiels sind in Tabelle 1 auszugsweise wiedergegeben.

Wählt man zur Bestimmung der Additionskorrektur eines Distanzmessinstruments beispielsweise das funktionale Modell

Tab. 1: Kalibrierwerte eines Distanzmessers, (BENNING 2002, Beispiel 5.6)

Istwerte y_i [m]	Sollwerte x_i [m]	Kalibrierabweichungen k_i [mm]
$y_1 = 219,9369$	$x_1 = 219,9336$	$k_1 = y_1 - x_1 = 3,3$
$y_2 = 259,9454$	$x_2 = 259,9427$	$k_2 = y_2 - x_2 = 2,7$
$y_3 = 329,8369$	$x_3 = 329,8393$	$k_3 = y_3 - x_3 = 2,4$
\vdots	\vdots	\vdots

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 \cdot \sqrt{x_i} + \beta_2 \cdot x_i + e_i, \quad (7)$$

ergeben sich mit den oben genannten Messwerten die Parameterschätzwerte

$$\hat{\beta}_0 = -0,00264, \quad \hat{\beta}_1 = 0,000575, \quad \hat{\beta}_2 = 0,999988 \quad (8)$$

und somit die Kalibrierfunktion

$$\hat{y}(x_i)[m] = -0,00264 + 0,000575 \cdot \sqrt{x_i} + 0,999988 \cdot x_i. \quad (9)$$

Mit dem Schätzwert der Residuenvarianz $\hat{\sigma}^2 = 0,65 \text{ mm}^2$ folgt die geschätzte Kovarianzmatrix der Parameterschätzwerte

$$\hat{\Sigma}_{\hat{\beta}} = \hat{\sigma}^2 (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} = \begin{pmatrix} 0,98572 & - & 0,13299 & 0,00408 \\ - & 0,13299 & 0,01916 & - & 0,00061 \\ 0,00408 & - & 0,00061 & 0,00002 \end{pmatrix} [\text{mm}^2] \quad (10)$$

und damit weiter die geschätzte Kovarianzmatrix der Beobachtungsschätzwerte

$$\hat{\Sigma}_{\hat{\mathbf{y}}} = \mathbf{X}\hat{\Sigma}_{\hat{\beta}}\mathbf{X}' = \begin{pmatrix} 0,0325 & 0,0319 & 0,0273 & \dots \\ 0,0319 & 0,0325 & 0,0298 & \dots \\ 0,0273 & 0,0298 & 0,0314 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} [\text{mm}^2]. \quad (11)$$

Mit der geschätzten Korrelationsmatrix der Beobachtungsschätzwerte

$$\hat{\mathbf{R}}_{\hat{\mathbf{y}}} = \begin{pmatrix} \hat{\sigma}_{ij} \\ \hat{\sigma}_i \cdot \hat{\sigma}_j \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0,982 & 0,854 & \dots \\ 0,982 & 1 & 0,933 & \dots \\ 0,854 & 0,933 & 1 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (12)$$

werden die Abhängigkeiten der Schätzwerte \hat{y}_i der **an der Ausgleichung beteiligten** (unkorrelierten) Messwerte y_i beschrieben.

Zu beachten ist, dass die Gl. (6), (11) und (12) **ausschließlich an den Stützstellen** x_i , aus denen die Koeffizientenmatrix \mathbf{X} gebildet wird, **definiert** sind. Mit Gl. (11) und (12) lassen sich Kovarianzen und Korrelationen späterer Beobachtungen y_i nicht begründen, da diese an der Ausgleichung nicht beteiligt sind.

Zur Berichtigung dieser späteren Messungen y_i geht man von der **Annahme der Gültigkeit** von Gl. (6) auch für diese Messungen aus. Die Annahme muss begründet sein, d. h. die Messbedingungen müssen denen der Kalibriermessungen entsprechen. Ein funktionaler Zusammenhang zwischen den Kalibrierdaten und späteren Messungen ist nicht definiert. Man benutzt lediglich die geschätzte Kalibrierfunktion, um eine Aussage bezüglich unabhängiger Messwerte y_i zu machen, was in der Statistik als **Prognose individueller Einzelwerte** bezeichnet wird. Auf die Prognosetheorie wird in Kap. 4 eingegangen.

3.2.2 Berechnung der Korrektionsfunktion

a) Umkehrfunktion

In Gl. (9) sind die Schätzwerte $\hat{y}(x_i)$ als Funktion der bekannten Sollwerte x_i angegeben. Da mit Hilfe der späteren Messwerte y_i die berichtigten Messwerte $\hat{x}(y_i)$ ermittelt werden sollen, stellt die Umkehrfunktion von Gl. (9) die Korrektionsfunktion dar, d.h. die Kalibrierfunktion wird orthogonal an der Diagonalen $y = x$ des xy -Koordinatensystems gespiegelt (Vertauschung der x - und der y -Achse):

$$\begin{aligned}
 y &= \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 \cdot \sqrt{x} + \hat{\beta}_2 \cdot x \\
 \Leftrightarrow \hat{\beta}_2 \cdot \left(x + \frac{\hat{\beta}_1}{\hat{\beta}_2} \cdot \sqrt{x} \right) &= y - \hat{\beta}_0 \\
 \Leftrightarrow x + \frac{\hat{\beta}_1}{\hat{\beta}_2} \cdot \sqrt{x} + \left(\frac{\hat{\beta}_1}{2 \hat{\beta}_2} \right)^2 &= \frac{y - \hat{\beta}_0}{\hat{\beta}_2} + \left(\frac{\hat{\beta}_1}{2 \hat{\beta}_2} \right)^2 \quad (13) \\
 \Leftrightarrow \left(\sqrt{x} + \frac{\hat{\beta}_1}{2 \hat{\beta}_2} \right)^2 &= \frac{y - \hat{\beta}_0}{\hat{\beta}_2} + \left(\frac{\hat{\beta}_1}{2 \hat{\beta}_2} \right)^2 \\
 \Leftrightarrow \sqrt{x} &= -\frac{\hat{\beta}_1}{2 \hat{\beta}_2} \pm \sqrt{\frac{4 \hat{\beta}_2 \cdot (y - \hat{\beta}_0) + \hat{\beta}_1^2}{(2 \hat{\beta}_2)^2}}
 \end{aligned}$$

Korrektionsfunktion:

$$\hat{x}(y_i) = \left(\frac{-\hat{\beta}_1 + \sqrt{4 \hat{\beta}_2 \cdot (y_i - \hat{\beta}_0) + \hat{\beta}_1^2}}{2 \hat{\beta}_2} \right)^2 \quad (14)$$

b) Näherungsformel

Neben dieser strengen Herleitung der Korrektionsfunktion lässt sich auch eine Näherungsformel angeben, wenn man:

- die Differenz zwischen dem mit der Kalibriergleichung (9) an der Stelle x_i berechneten Wert $\hat{y}(x_i)$ und dem Wert x_i
- der Differenz zwischen dem mit der Kalibriergleichung (9) an der Stelle y_i berechneten Wert $\hat{y}(y_i)$ und dem Messwert y_i

als genähert gleich auffasst (Abb. 1).

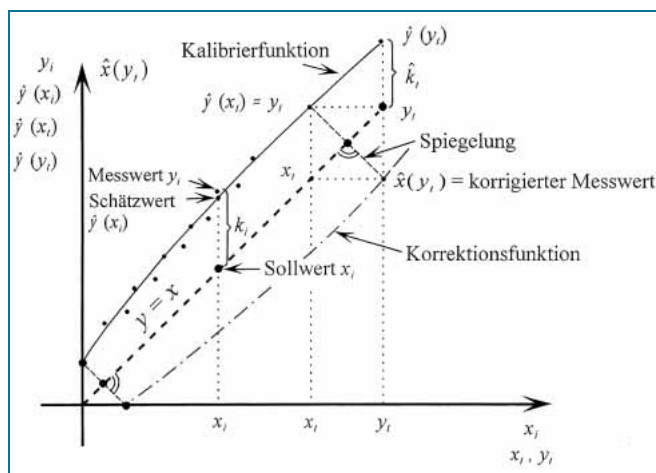


Abb. 1: Skizze einer Kalibrierfunktion und einer Korrektionsfunktion

$$\hat{y}(x_i) - x_i \approx \hat{y}(y_i) - y_i \quad (15)$$

Ersetzt man $\hat{y}(x_i)$ durch y_i und x_i durch $\hat{x}(y_i)$

$$y_i - \hat{x}(y_i) \approx \hat{y}(y_i) - y_i, \quad (16)$$

zeigt sich die genäherte Korrektionsfunktion:

$$\begin{aligned}
 \hat{x}(y_i) &\approx y_i - (\hat{y}(y_i) - y_i) \\
 &\approx 2y_i - (\hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 \cdot \sqrt{y_i} + \hat{\beta}_2 \cdot y_i) \\
 &\approx -\hat{\beta}_0 - \hat{\beta}_1 \cdot \sqrt{y_i} + (2 - \hat{\beta}_2) \cdot y_i
 \end{aligned} \quad (17)$$

Für die Beispielrechnung folgt somit:

$$\hat{x}(y_i)[m] \approx 0,00264 - 0,000575 \cdot \sqrt{y_i} + 1,000012 \cdot y_i \quad (18)$$

Wenn (wie beim vorliegenden Beispiel der Distanzmesser-Kalibrierung) die Korrekturen in Relation zu den Messwerten sehr klein sind, liefern beide Korrektionsgleichungen (14) und (17) nahezu identische Ergebnisse, deren Abweichungen voneinander keine praktische Relevanz besitzen.

In Abb. 1 ist die Kalibrierfunktion Gl. (9) und die an der Diagonalen $y = x$ gespiegelte Korrektionsfunktion Gl. (14) skizzenhaft dargestellt. Die Abweichungen der Graphen von der Diagonalen sind in stark vergrößertem Maßstab dargestellt, im Maßstab der Skizze wären sie separat nicht wahrnehmbar.

3.3 Berechnung der Kalibrierfunktion und der Korrektionsfunktion mit gekürzten Beobachtungen

Wie in Kap. 1 und Kap. 3.1 bereits angegeben, wird in der Praxis häufig die funktionale Abhängigkeit nicht direkt zwischen den Kalibrier-Messwerten y_i und den Kalibrier-Sollwerten x_i , sondern zwischen den Kalibrierabweichungen k_i nach Gl. (1) und den Sollwerten x_i bestimmt. Die Kalibrierabweichungen k_i sind gekürzte Beobachtungen, wie sie bei iterativen Ausgleichungen nach Gauß-Newton verwendet werden. Man führt folglich eine Linearisierung durch, auch wenn sie bei einem linearen Regressionsansatz („linear“ in den Parametern) eigentlich nicht erforderlich wäre. Die iterative Ausgleichung sei an dem in Kap. 3.2 gegebenen Beispiel verdeutlicht.

Mit den Parameterstartwerten

$$\hat{\beta}_0^{(0)} = 0 \quad \hat{\beta}_1^{(0)} = 0, \quad \hat{\beta}_2^{(0)} = 1 \quad (19)$$

ergibt sich für den Regressionsansatz Gl. (7) die Näherungsgleichung

$$Y_i^{(0)} = 0 + 0 \cdot \sqrt{x_i} + 1 \cdot x_i + e_i = 1 \cdot x_i + e_i \quad (20)$$

und deren Realisierungen

$$y_i^{(0)} = 1 \cdot x_i. \quad (21)$$

Durch Subtraktion von den Beobachtungen zeigt sich die Variablengleichung der gekürzten Beobachtungen

$$K_i = Y_i - Y_i^{(0)} \quad (22)$$

und deren Realisierungen, welche die Kalibrierabweichungen k_i in Gl. (1) darstellen.

$$k_i = y_i - x_i$$

Formale Linearisierung des funktionalen Modells Gl. (7) mit Hilfe der Näherungswerte der Parameter liefert als gekürzte lineare Kalibriergleichung:

$$K_i = \Delta\beta_0^{(0)} + \Delta\beta_1^{(0)} \cdot \sqrt{x_i} + \Delta\beta_2^{(0)} \cdot x_i + e_i \quad (23)$$

Die Ausgleichsrechnung ergibt die Parameterverbesserungen

$$\begin{aligned} \Delta\hat{\beta}_0^{(0)} &= -0,00264, & \Delta\hat{\beta}_1^{(0)} &= 0,000575, \\ \Delta\hat{\beta}_2^{(0)} &= -0,000012 \end{aligned} \quad (24)$$

und durch Addition zu den Startwerten von Gl. (19) folgen die Parameterschätzwerte

$$\hat{\beta}_0^{(1)} = -0,00264, \hat{\beta}_1^{(1)} = 0,000575, \hat{\beta}_2^{(1)} = 0,999988. \quad (25)$$

Diese iterativ berechneten Parameterschätzwerte sind mit den direkt berechneten in Gl. (9) identisch.

Diese Identität lässt sich bereits durch eine Parameteränderung im funktionalen Modell aufzeigen. An Stelle von Gl. (7) tritt das funktionale Modell

$$K_i := Y_i - x_i = \beta_0 + \beta_1 \cdot \sqrt{x_i} + (\beta_2 - 1) \cdot x_i + e_i, \quad (26)$$

wobei im Vergleich mit Gl. (23) gilt:

$$\Delta\beta_0^{(0)} := \beta_0, \quad \Delta\beta_1^{(0)} := \beta_1, \quad \Delta\beta_2^{(0)} := \beta_2 - 1. \quad (27)$$

Durch Addition des linearen Terms „1 · x_i“ gelangt man folglich von einem iterativen Funktionsansatz nach Gl. (23) zum direkten Funktionsansatz nach Gl. (7). Wird bei einem iterativen Funktionsansatz ein Parameter für den linearen Term nicht vorgesehen bzw. nach einem Signifikanztest eliminiert, unterstellt man, dass bei dem direkten Funktionsansatz dieser Parameter den festen Wert „1“ hat.

Die Addition der Schätzwerte der Kalibrierabweichungen

$$\hat{k}_i[m] = -0,00264 + 0,000575 \cdot \sqrt{x_i} - 0,000012 \cdot x_i. \quad (28)$$

zu den Realisierungen $y_i^{(0)}$ der Näherungsgleichung (21) liefert wieder die direkte Kalibriergleichung (9)

$$\begin{aligned} \hat{y}(x_i)[m] &= y_i^{(0)} - \hat{k}_i^{(0)} \\ &= -0,00264 + 0,000575 \cdot \sqrt{x_i} + 0,999988 \cdot x_i. \end{aligned} \quad (29)$$

Die Addition der Zuschläge in Gl. (29) dient lediglich der iterativen Berechnung der Beobachtungsschätzwerte, die sich bei der direkten Ausgleichung ohne diesen rechen-technischen Umweg ergeben. Dies bestätigt die bereits in Kap. 2 gemachte Aussage, dass die Anwendung des Varianz/Kovarianzfortpflanzungsgesetzes auf die Addition in Gl. (29), d. h. die zusätzliche Addition der a priori-Varianzen $\sigma_{y_i}^2$ zu den Varianzschätzwerten $\hat{\sigma}_{k_i}^2$, nicht korrekt ist. Die geschätzte Kovarianzmatrix der geschätzten Beobachtungen in Gl. (11) stellt gleichzeitig die geschätzte

Kovarianzmatrix der nach Gl. (28) geschätzten Kalibrierabweichungen dar.

$$\hat{\Sigma}_{\hat{\mathbf{y}}} = \hat{\Sigma}_{\hat{\mathbf{k}}} \quad (30)$$

Korrektionsfunktion:

Berechnet man mit den zu korrigierenden späteren Messwerten y_i die Korrekturen

$$\hat{k}_i[m] = -0,00264 + 0,000575 \cdot \sqrt{y_i} - 0,000012 \cdot y_i. \quad (31)$$

ergeben sich nach Gl. (2) die korrigierten Messwerte

$$\hat{x}(y_i) = y_i - \hat{k}_i.$$

Wie ersichtlich, ist diese iterative Korrektur nach Gl. (2) identisch mit der genäherten „direkten“ Korrektionsfunktion Gl. (17) bzw. Gl. (18).

4 Prognoseberechnungen im linearen Modell

4.1 Definitionsbereich des linearen Regressionsmodells

Im linearen Regressionsmodell sind nach Gl. (5) und Gl. (6) die Erwartungswerte $E(Y_i)$ der Zufallsvariablen Y_i und deren Schätzwerte \hat{y} als Funktion der festen Werte \mathbf{X} und der unbekannt Parameter β bzw. der Parameterschätzwerte $\hat{\beta}$ erklärt:

$$E(\mathbf{y}) = \mathbf{X}\beta, \quad \hat{\mathbf{y}} = \mathbf{X}\hat{\beta}$$

Das bedeutet, die Zufallsvariablen Y_i sind ausschließlich **an den Stützstellen x_i definiert**. Folglich verdeutlicht ein mit durchgezogener Linie dargestellter Graph einer Regressionsfunktion lediglich den Krümmungsverlauf, nicht aber den Definitionsbereich dieser Funktion.

Dies sei an der aus WITTE/SCHMIDT (2000, Abb. 2.5-1) entnommenen Abb. 2 verdeutlicht. Die dargestellte Regressionsgerade zeigt lediglich, dass die Erwartungswerte $\mu_{Y(x_i)}$ der Zufallsvariablen $Y(x_i)$ **linear aufeinanderfolgen**. Zwischen den Stützstellen x_i sind **keine** Zufallsvariablen Y definiert.

Daher erlaubt die aus den Kalibrierdaten (Messwerte y_i und Sollwerte x_i) bestimmte Regressionsfunktion Gl. (6), bzw. Gl. (9) des Beispiels, prinzipiell

- keine Aussagen bezüglich zu berichtiger Werte zwischen den Stützstellen, d. h. keine Schätzung von Regressionswerten \hat{y}_i mit anderweitigen Werten x_i ,

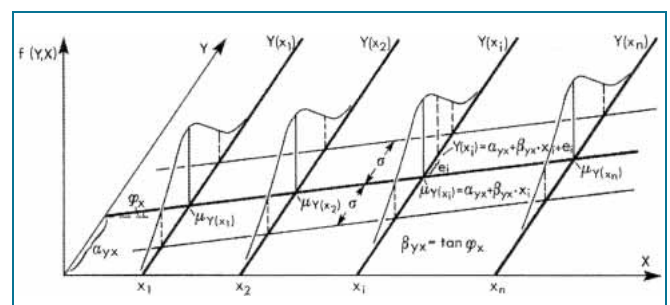


Abb. 2: An festen Stützstellen x_i definierte Zufallsvariablen $Y(x_i)$ im klassischen linearen Regressionsmodell



weil

- anderweitige Messwerte an der Regressionsausgleichung nicht beteiligt sind und
- die Kalibrierdaten mit den zu berichtenden Messwerten keinerlei funktionale Beziehung aufweisen.

Damit aber die aus den Kalibrierdaten bestimmte Regressionsfunktion zur Korrektur späterer Messwerte benutzt werden kann,

- unterstellt man deren Gültigkeit auch für die zu berichtenden Messwerte

und berechnet mit ihr „Abschätzungen“ der berichtigen Messwerte, was in der Ökonometrie als **Prognose** bezeichnet wird. Eine „Gültigkeitsannahme“ kann jedoch keine funktionale Beziehung zwischen den Kalibrierdaten und den berichtigen Messwerten begründen.

Prognosemodelle finden in der Ökonometrie vielfältige Anwendung. Zur Klarheit der Definitionen sei hervorgehoben, dass die Berechnung der Schätzwerte \hat{y} der an der Ausgleichung beteiligten Beobachtungen y nach Gl. (6) in der Ökonometrie bereits als Prognose, und zwar als **Ex-post-Prognose** bezeichnet wird (GRUBER 1997, Kap. 3.6.1). Die Prognose von Daten, die an der Ausgleichung nicht beteiligt sind, wird **echte Prognose** (= **Ex-ante-Prognose**) genannt (GRUBER 1997, Kap. 3.6.2), wovon nachfolgend ausschließlich die Rede sein soll.

4.2 Prognosemodelle der Ökonometrie

Die aus Kalibrierdaten bestimmte Regressionsgleichung (6) wird in der Ökonometrie als „Eingleichungsmodell“ bezeichnet. Von einem „Mehrgleichungsmodell“ spricht man, wenn mehrere sich gegenseitig beeinflussende Regressionsgleichungen als Gesamtheit betrachtet werden. Das Mehrgleichungsmodell enthält neben den in Gl. (6) vorkommenden Variablen und Koeffizienten zusätzlich weitere Koeffizienten, welche die Verflechtungen der endogenen Variablen untereinander charakterisieren. Das Mehrgleichungsmodell ist folglich für Kalibrierregressionen nicht zutreffend. Daher werden aus der Vielzahl der ökonometrischen Prognosemodelle hier nur zwei für die Diskussion maßgebliche Eingleichungs-Prognosemodelle vorgestellt.

Nach GRUBER (1997, Kap. 3.6.2) kann bei gegebenem Vektor $\hat{\beta}$ von Regressionskoeffizienten und bei gegebenem Vektor x_t von Werten der Regressoren der nach Gl. (6) berechnete Wert \hat{y}_t für eine zukünftige Periode bzw. für ein zusätzliches Element (Index t) sein:

1. eine **Durchschnittsprognose**, d. h. eine Prognose des Erwartungswertes $E(Y_t)$ des Regressanden. Bezeichnet man die Störvariable der Durchschnittsprognose mit e_t , dann gilt:

$$e_t = E(Y_t) - \hat{y}_t = E(Y_t) - \hat{\beta}'x_t \quad (32)$$

Da $E(Y_t)$ eine Konstante, x_t annahmegemäß ein Vektor fester Werte und $\hat{\beta}$ der geschätzte Parametervektor mit der Kovarianzmatrix $\hat{\Sigma}_{\hat{\beta}} = \hat{\sigma}_e^2(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}$ nach Gl. (10) ist (wobei die Residuenvarianz der Regression hier mit $\hat{\sigma}_e^2$ bezeichnet wird), lautet die geschätzte Varianz der Störvariable e_t in diesem Fall:

$$\hat{\sigma}_{e_t}^2 = x_t' \hat{\Sigma}_{\hat{\beta}} x_t = \hat{\sigma}_e^2 x_t' (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} x_t \quad (33)$$

2. die Prognose eines **individuellen Wertes** y_t des Regressanden Y_t , d. h. die Schätzung einer Realisation des Regressanden Y_t . Bezeichnet man die Störvariable der Einzelwertprognose mit $e(i)_t$, wobei i hier als Hinweis auf einen individuellen Wert zu verstehen ist, gilt:

$$e(i)_t = y_t - \hat{y}_t = y_t - \hat{\beta}'x_t \quad (34)$$

y_t ist eine Realisation der Zufallsvariablen Y_t , für die sich im klassischen Regressionsmodell die Residuenvarianz $\hat{\sigma}_e^2$ ergibt. Da y_t und $\hat{\beta}$ unkorreliert sind, folgt mit Gl. (33) die Varianz der Einzelwertprognose:

$$\hat{\sigma}_{e(i)_t}^2 = \hat{\sigma}_e^2 + \hat{\sigma}_e^2 = \hat{\sigma}_e^2 + \hat{\sigma}_e^2 x_t' (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1} x_t \quad (35)$$

Die zu berichtenden Messwerte y_t sind (ebenso wie die Kalibriermesswerte y_i) individuelle Einzelwerte, die sowohl untereinander als auch zu den Kalibriermesswerten unabhängig sind. Daher ist das letztgenannte **Prognosemodell individueller Einzelwerte** hier zutreffend. Der Vektor x_t entwickelt sich entsprechend der Kalibrierfunktion aus jeweils nur einem Messwert x_t , der je nach verwendetem Polynomansatz in unterschiedlichen Formen auftritt, beispielsweise beim Ansatz Gl. (7) der Vektor

$$x_t = (1, \sqrt{x_t}, x_t)'. \quad (36)$$

Obwohl die Parameterschätzwerte $\hat{\beta}_0$, $\hat{\beta}_1$ und $\hat{\beta}_2$ untereinander korreliert sind, können die berichtigen Messwerte nicht korreliert sein, weil jeder Messwert individuell berichtet wird. Dies entspricht der Messpraxis, da jeder einzelne Messwert bereits während der Messwerterfassung durch die im Distanzmesser implementierte Software oder „von Hand“ einzeln berichtet wird.

Dieses individuelle Prognosemodell behandeln u. a. auch SCHACH/SCHÄFER (1978, S. 82), WITTE/SCHMIDT (2000, Gl. (2.97, 2.98, 2.182)) und SEARLE (1971, Gl. (61)). Die dort angegebenen Gleichungen beziehen sich immer nur auf jeweils einen Vektor x_t .

Die in TOUTENBURG (1975, S. 69) und BIBBY/TOUTENBURG (1977, S. 84) behandelten Prognosemodelle sind für die Prognose berichtiger Messdaten nicht geeignet, da hier

- **Durchschnittsprognosen** in den oben erwähnten
- **Mehrgleichungsmodellen** beschrieben werden.

Derartige Prognosen beziehen sich auf miteinander verknüpfte Gleichungssysteme. Anstelle des Vektors x_t wird hier eine Matrix \mathbf{X}_t benötigt, weil (im Gegensatz zu den Voraussetzungen in Kap. 3.1) a priori-Korrelationen vorliegen, und zwar sowohl bei den Regressionsdaten, als auch bei den zu prognostizierenden Daten, als auch zwischen Regressions- und Prognosedaten. Daraus folgen selbstverständlich Korrelationen der „geschätzten“ Prognosewerte dieser Mehrgleichungsmodelle. Da dieses Modell nicht zutreffend ist, lassen sich hiermit Korrelationen der berichtigen Einzelmesswerte nicht begründen. In Gl. (35) kann anstelle des Vektors x_t keine Matrix \mathbf{X}_t eingesetzt werden, da sich für den zweiten Summanden dann eine Matrix ergäbe, die sich zu einem Skalar (1. Summand) nicht addieren lässt.

5 Varianz berechtigter Messwerte

Mit dem Varianzansatz nach Gl. (35) soll lediglich die Unabhängigkeit eines individuell berechtigten Einzelwertes von den Kalibrierdaten verdeutlicht werden. Für die Berechnung der Varianz eines berechtigten Messwertes lässt sich dieser Ansatz nicht (bzw. nur genähert) verwenden. Bei geodätischen Korrektionsfunktionen sind die für eine Prognose notwendigen festen Messwerte x_t nicht bekannt und müssten durch die zu berichtigenden Messwerte x_t ersetzt werden. Anstelle des Ansatzes Gl. (36) enthielte der Vektor \mathbf{x}_t jetzt die Elemente

$$\mathbf{x}_t = (1, \sqrt{y_t}, y_t)', \quad (37)$$

welche zum Zwecke der Varianzabschätzung als „feste“ Messwerte aufgefasst werden müssten.

Anstelle der aus den Kalibrierdaten berechneten Varianz nach Gl. (35) ist in der Geodäsie jedoch die Varianzbestimmung nach DIN 18723 vorgeschrieben. Dort werden Mess- und Ausgleichungsverfahren verwandt, bei denen systematische Messabweichungen die Varianzberechnung nicht verfälschen können. Mit der hieraus geschätzten Standardabweichung $\hat{\sigma}$ einer Einzelmessung wird durch ein einseitiges Konfidenzintervall die maximale Größe der Standardabweichung σ der Grundgesamtheit eingegrenzt.

Dieser a priori-Wert für σ berücksichtigt alle zufälligen Eventualitäten mit vorgegebener Wahrscheinlichkeit. Daher geben die Hersteller geodätischer Instrumente diese Standardabweichung σ als Genauigkeit des jeweiligen Instrumentes an. Diese gilt wegen der (nahezu) 1:1-Spiegelung von der Kalibrier- zur Korrektionsfunktion auch für berichtigte Messwerte. Die Anbringung von konstanten Korrektionswerten kann das Streuverhalten des Messvorganges und damit die Varianz des Messergebnisses nicht beeinflussen.

Schlussbemerkungen

In diesem Beitrag wird dargelegt, dass

- die Korrektion von Messwerten nicht als lineare Transformation von Zufallsvariablen aufgefasst werden kann und daher die Anwendung des Varianz/Kovarianzfortpflanzungsgesetzes in diesem Zusammenhang nicht angebracht ist,
- der Bezug auf die Prognosemodelle der Ökonometrie verdeutlicht, dass die Anbringung von Korrekturen an unabhängig ermittelten Messwerten keine Korrelationen zwischen den berechtigten Messwerten bewirken kann.

Literatur

- BENNING, W.: Statistik in Geodäsie, Geoinformation und Bauwesen. Wichmann, Heidelberg, 2002.
- BIBBY, J., TOUTENBURG, H.: Prediction and Improved Estimation in Linear Models. Wiley, Chichester, 1977.
- GRUBER, J.: Ökonometrie, Band 1: Einführung in die multiple Regression und Ökonometrie. Vahlen, München, 1997.
- SCHACH, S., SCHÄFER, T.: Regressions- und Varianzanalyse. Springer, Berlin, 1978.
- SEARLE, S. R.: Linear Models. Wiley, New York, 1971.
- TOUTENBURG, H.: Vorhersage in linearen Modellen. Akademie-Verlag, Berlin, 1975.
- WITTE, B., SCHMIDT, H.: Vermessungskunde und Grundlagen der Statistik für das Bauwesen. Wittwer, Stuttgart, 2000.

Anschrift des Autors:

Dr.-Ing. HUBERT SCHMIDT,
Geodätisches Institut der RWTH Aachen,
Templergraben 55, 52062 Aachen (Germany),
Tel.: 02 41-8 09 52 81/8 09 53 00,
hubert.schmidt@gia.rwth-aachen.de

Zusammenfassung

Ausgehend von der Definition des Varianz/Kovarianzfortpflanzungsgesetzes und anhand vergleichender Betrachtungen mit Prognosemodellen der Ökonometrie wird dargelegt, dass die Anbringung von Korrekturen an unabhängigen Messwerten keine Korrelationen zwischen den korrigierten Messwerten begründen kann.

Schlagwörter

Kalibrierung, Korrektion, Prognose, Korrelation

Summary

Based on the definition of the propagation of variances/covariances and comparing with the prediction in linear models of econometrics the paper states, that the correction of independent measured values does not constitute correlations between the corrected measurements.

Keywords

calibration, correction, prediction, correlation