Universität Konstanz

Mathematik II
für Chemie, Life Science und Nanoscience

Vorlesung 4: Lineare Ausgleichsrechnung (Kap 14.3)

Dr. Stefan Frei, 11.05.2020

Überbestimmte Gleichungssysteme

- **Anwendung**: Beschreibung von Messdaten mithilfe einer Funktion
- Anzahl Messdaten $m > n$: Anzahl der Parameter der Funktion

Beispiel: Zerfallsprozess mit experimentelle Daten

- **Annahme**: Die Konzentration zeigt folgendes Verhalten
$$f(t) = \alpha \cdot \exp(\lambda t)$$
mit Parametern α und λ
- **Messwerte** (t_i, s_i) mit $s_i \approx f(t_i)$

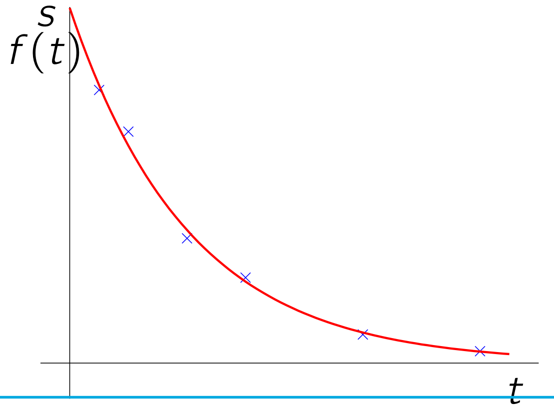
t_i	0.50	1.00	2.00	3.00	5.00	7.00
s_i	2.30	1.95	1.05	0.72	0.24	0.10

Graphische Darstellung

- Da $6 = m > n = 2$ können wir nicht erwarten, dass wir für alle Messpunkte $f(t_i) = s_i$ exakt erfüllen können
- Außerdem: Messdaten haben oft signifikante Messfehler (z.B. 5%-10%)
- Wir suchen eine Kurve, die (t_i, s_i) annähert

Darstellung der Messergebnisse

Messergebnisse und optimale Kurve



Graphische Lösung (Halblogarithmische Skala)

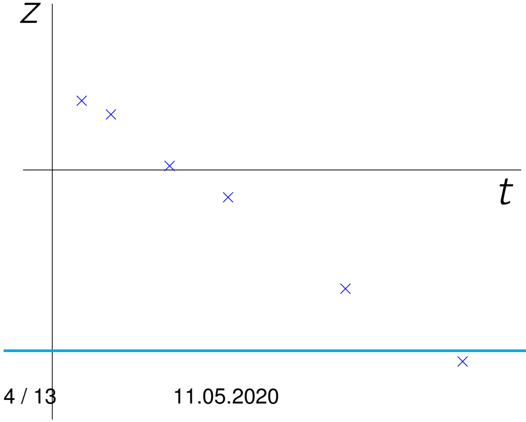
Wir setzen eine logarithmische Skala für die Funktionswerte f an

$$g(t) := \ln(f(t)) = \ln(\alpha \exp(\lambda t)) = \underbrace{\ln(\alpha)}_{=:\beta} + \lambda t$$

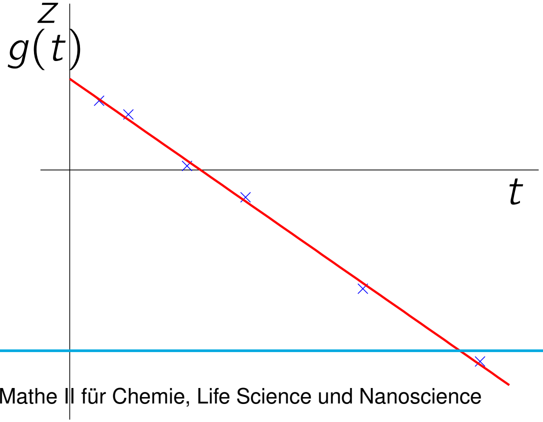
g ist eine Gerade
mit Parametern $\ln(\alpha)$ und λ.

t_i	0.50	1.00	2.00	3.00	5.00	7.00
s_i	2.30	1.95	1.05	0.72	0.24	0.10
$z_i = \ln(s_i)$	0.83	0.67	0.05	-0.33	-1.43	-2.30

Darstellung der Messergebnisse
im halblog. Koordinatensystem



optimale Gerade



Mathematische Lösung: Methode der kleinsten Fehlerquadrate

- $m = 6$ Gleichungen

$$\beta + \lambda t_i = z_i, \qquad i = 1, \dots, m$$

- Matrix-Vektor-Schreibweise

$$\underbrace{\begin{pmatrix} 1 & t_1 \\ 1 & t_2 \\ 1 & t_3 \\ 1 & t_4 \\ 1 & t_5 \\ 1 & t_6 \end{pmatrix}}_{=:A} \cdot \underbrace{\begin{pmatrix} \beta \\ \lambda \end{pmatrix}}_{=:\vec{x}} = \underbrace{\begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \\ z_4 \\ z_5 \\ z_6 \end{pmatrix}}_{=:\vec{b}}$$

- Methode der kleinsten Fehlerquadrate (*Least Squares*): Bestimme die Parameter $x = (\beta, \lambda)$ so, dass die Abweichung minimal wird

$$\min_{x \in \mathbb{R}^2} \|b - Ax\|_2^2 = \min_{x \in \mathbb{R}^2} \sum_{i=1}^{m} (b_i - (Ax)_i)^2 = \min_{x \in \mathbb{R}^2} \sum_{i=1}^{m} (z_i - g(t_i))^2$$

Normalengleichung

Methode der kleinsten Fehlerquadrate (*Least Squares*): Bestimme die Parameter $x = (\beta, \lambda)$ so, dass die Abweichung minimal wird

$$\min_{x \in \mathbb{R}^2} \|b - Ax\|_2^2 = \min_{x \in \mathbb{R}^2} \sum_{i=1}^{m} (b_i - (Ax)_i)^2 = \min_{x \in \mathbb{R}^2} (z_i - g(x; t_i))^2$$

- Notwendige Bedingung erster Ordnung für das Minimum

$$\frac{d}{dx_i} \|b - Ax\|_2^2 = 0$$

- Dies ist äquivalent zur Normalengleichung

$$A^T A \vec{x} = A^T b$$

- Zur Lösung des Problems genügt es diese nach x aufzulösen. Die hinreichende Bedingung 2.Ordnung ist immer erfüllt.

Beispiel Zerfallexperiment

Wir stellen die Normalengleichung auf

$$A^T A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0.5 & 1 & 2 & 3 & 5 & 7 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0.5 \\ 1 & 1 \\ 1 & 2 \\ 1 & 3 \\ 1 & 5 \\ 1 & 7 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 6 & 18.5 \\ 18.5 & 88.25 \end{pmatrix}$$

$$A^T b = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0.5 & 1 & 2 & 3 & 5 & 7 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0.83 \\ 0.67 \\ 0.05 \\ -0.33 \\ -1.43 \\ -2.30 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -2.51 \\ -23.055 \end{pmatrix}$$

Die Normalengleichung lautet also

$$\begin{pmatrix} 6 & 18.5 \\ 18.5 & 88.25 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta \\ \lambda \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -2.51 \\ -23.055 \end{pmatrix}$$

Beispiel Zerfallexperiment (2)

- Gauß-Elimination

$$\left(\begin{array}{cc|c} 6 & 18.5 & -2.51 \\ 18.5 & 88.25 & -23.055 \end{array}\right) \quad \to \quad \left(\begin{array}{cc|c} 6 & 18.5 & -2.51 \\ 0 & 31.21 & -15.32 \end{array}\right)$$

- Rückwärtseinsetzen ergibt

$$\lambda = x_2 \approx -0.491$$
$$\beta = x_1 \approx 1.095$$

- Die Lösung ist also

$$g(t) = 1.095 - 0.491t$$

bzw. rücktransformiert

$$f(t) = \exp(g(t)) = \exp(1.095)\exp(-0.491t) \approx 2.989\exp(-0.491t).$$

Beispiel Epidemiologie

Wir schätzen die Reproduktionszahl R_0 in Deutschland bezüglich der Corona-Infizierten zwischen 13.04. bis 16.04.2020 (Quelle: RKI)

t_k	0	1	2	3
i_k	58 716	56 998	54 984	53 450
$j_k := \ln(i_k)$	10.98	10.95	10.91	10.89

- Annahme (1.VL): Die Infektionszahl genügt (kurzfristig) der Beziehung

$$i(t) = i_0 \exp\left(\frac{(R_0 - 1)t}{t_{inf}}\right)$$

  mit Parametern i_0, R_0.

- Logarithmische Skala

$$j(t) := \ln(i(t)) = \underbrace{\ln(i_0)}_{=:j_0} + \frac{(R_0 - 1)t}{t_{inf}}$$

Gleichungen

- $m = 4$ Gleichungen:

$$j(t_k) = j_k \quad \Leftrightarrow \quad j_0 + \frac{t_k}{t_{inf}} R_0 = \frac{t_k}{t_{inf}} + j_k, \quad k = 1, \dots, 4$$

- In Matrix-Vektor-Schreibweise ($t_{inf} = 6$)

$$\begin{pmatrix} 1 & \frac{t_1}{t_{inf}} \\ 1 & \frac{t_2}{t_{inf}} \\ 1 & \frac{t_3}{t_{inf}} \\ 1 & \frac{t_4}{t_{inf}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_0 \\ R_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{t_1}{t_{inf}} + j_1 \\ \frac{t_2}{t_{inf}} + j_2 \\ \frac{t_3}{t_{inf}} + j_3 \\ \frac{t_4}{t_{inf}} + j_4 \end{pmatrix}, \quad \text{d.h.} \quad \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & \frac{1}{6} \\ 1 & \frac{1}{3} \\ 1 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}}_{=A} \underbrace{\begin{pmatrix} j_0 \\ R_0 \end{pmatrix}}_{=\vec{x}} = \underbrace{\begin{pmatrix} 10.98 \\ 11.12 \\ 11.24 \\ 11.39 \end{pmatrix}}_{=\vec{b}}$$

- Normalengleichung $A^T A\vec{x} = A^T\vec{b}$

$$\begin{pmatrix} 4 & 1 \\ 1 & \frac{7}{18} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_0 \\ R_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 44.73 \\ 11.29 \end{pmatrix}$$

Beispiel Epidemiologie (3)

- Gauß-Elimination

$$\left(\begin{array}{cc|c} 4 & 1 & 44.73 \\ 1 & \frac{7}{18} & 11.29 \end{array}\right) \quad \to \quad \left(\begin{array}{cc|c} 4 & 1 & 44.73 \\ 0 & \frac{5}{36} & 0.1075 \end{array}\right)$$

- Rückwärtseinsetzen

$$x_2 = R_0 = 0.1075 \cdot \frac{36}{5} \approx 0.774$$

$$x_1 = j_0 \approx \frac{1}{4}(44.73 - 0.774) = 10.989$$

$$\Rightarrow i_0 = \exp(j_0) \approx 59\,219$$

- Entwicklung der Infizierten

$$i(t) = 59\,219 \exp\left(\frac{0.774 - 1}{t_{inf}} t\right).$$

Ausgleich mit Polynomen

- Bislang Lineare Ausgleichsrechnung: Beschreibung von Messdaten durch eine lineare Funktion $g(t) = \alpha_0 + \alpha_1 t$
- $g(t)$ heißt Regressionsgerade

- **Allgemeiner**: Annäherung durch Polynome vom Grad $n-1$

$$p(t) = \alpha_0 + \alpha_1 \cdot t + \cdots + \alpha_{n-1} \cdot t^{n-1}$$

- Es ergibt sich das lineare Gleichungssystem

$$\begin{aligned} \alpha_0 + \alpha_1 t_1 + \alpha_2 t_1^2 + \cdots + \alpha_{n-1} t_1^{n-1} &= s_1 \\ &\vdots \\ \alpha_0 + \alpha_1 t_m + \alpha_2 t_m^2 + \cdots + \alpha_{n-1} t_m^{n-1} &= s_m, \end{aligned}$$

Wichtig: Wie oben gehen die zu bestimmenden Parameter α_i linear ein.

Ausgleich mit Polynomen (2)

In Matrix-Vektor-Schreibweise

$$A\vec{x} = \vec{b}, \qquad \text{mit} \quad A = \begin{pmatrix} 1 & t_1 & t_1^2 & \cdots & t_1^{n-1} \\ 1 & t_2 & t_2^2 & \cdots & t_2^{n-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & t_m & t_m^2 & \cdots & t_m^{n-1} \end{pmatrix}, \quad \vec{x} = \begin{pmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_{n-1} \end{pmatrix}, \quad \vec{b} = \begin{pmatrix} s_1 \\ s_2 \\ \vdots \\ s_m \end{pmatrix}.$$

Auch hier führt die Methode der kleinsten Fehlerquadrate (Minimierung der Abweichung) auf die Normalengleichung

$$A^T A\vec{x} = A^T \vec{b}$$