Warum Modelle ?

um Experimente am Realsystem
zu vermeiden, einzuschränken

Statt dessen :
Gedankenexperimente
Computer - Experimente

- weniger Schaden
- weniger Kosten

Modell muß adäquat sein

sonst

- genau genug / falsche Schlüsse
- nicht zu genau / zu teuer

aber : es gibt verschiedene Modelle
auch zum gleichen ‚Thema'

wegen: Zweck der Modellierung / Systemanalyse weitere Fragen:

a) was ist, wenn zwei Lieferanten gleichartige Produkte liefern können

→ Entscheidungsproblem
normatives Modell
Optimierung

b) was ist, wenn Zusammenhänge (teilweise) nichtlinear sind

→ Lösung nichtlinearer Gl. syst.

c) gibt es einfachere Lösungskonzepte Gauß-Seidel

d) Lösungsalgorithmus als Verhaltensmodell (?)
Schweinezyklus

e) was ist zu tun, wenn I/O - Daten nicht vollständig verfügbar sind

→ Pool - Modelle

f) wie nutzt man empirische Daten

→ Ausgleichsrechnung
maximum Likelihood

Regression / Korrelation | Identifikation

g) ist I/O - Modell komplexes Modell (nur weil/wenn $n \gg 1$ ist)

Komplexitätsbegriff

Zwecke der Systemanalyse

- Verstehen des Verhaltens / der Phänomene

  Daten sammeln
  Modell aufstellen / Hypothese
  Parameter schätzen

  zuerst meist nur deskriptives Modell
  'Beschreibung' der Vergangenheit

- Folgen abschätzen

  explikatives Modell nötig / kausal
  wenn - dann Fragen
  Simulation

  Ursache & Wirkung

  explikatives Modell hat (bedingte) Vorhersagekraft

- Handlungen vorausschauend optimieren

  Entscheidungsvariable
  Ziel(e) definieren
  ggf. Restriktionen def.
  Optimum - Suche

  normatives Modell

Modellbildung ist wichtigster Schritt

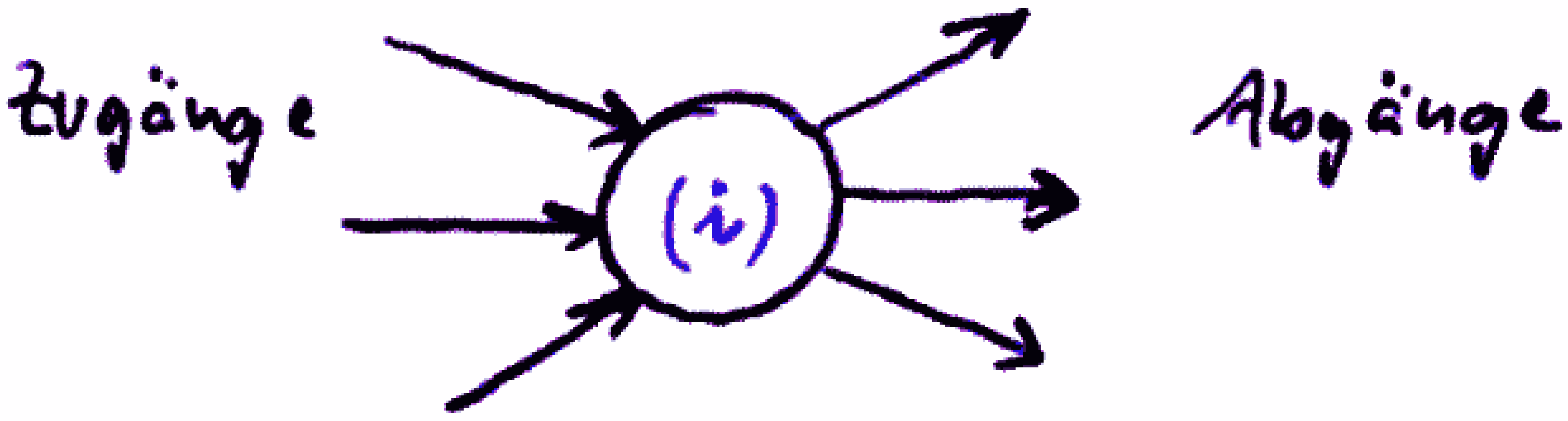
- mentale Modelle
- formale Modelle

des 'Systems'

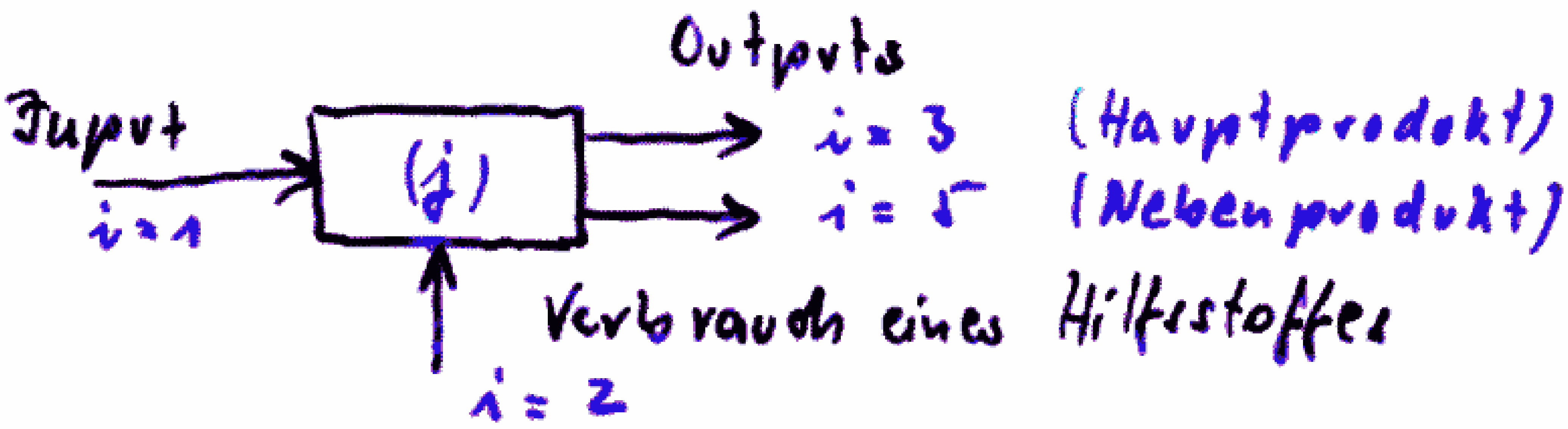
Zwei wichtige Modelltypen mit impliziten Funktionen
– Input-Output Modelle
2.3 – Pool-Modelle

mehrere (Güter-) Ströme (Index i)
mehrere Prozesse (Index j)

Bilanz für jedes Gut (in einer Periode)



Bilanz für jeden Prozeß (in einer Periode)



→ System gekoppelter (linearer) Gleichungen

aber nicht mehr nötig zu wissen, wer was an wen liefert

(z. B. Gas- und Strom-Verbundnetze:

unbekannt, wieviel Erdgas in einem Unternehmen aus NL kommt, wieviel aus SU;

unbekannt, wieviel Strom aus Kernkraftwerk, wieviel aus Braunkohlekraftwerk!

Gemeinsamkeit solcher statischer / stationärer Systemmodelle:

n Gleichungen für n unbekannte Größen
(simultanes lineares Gleichungssystem)
inhomogen

Lösungskonzepte

a) von Hand, wenn n sehr klein

$$ax + by + c = x \qquad (1)$$
$$dx + ey + f = y \qquad (2)$$

(1) nach x auflösen und in (2) einsetzen
(2') nach y auflösen
y in (1') einsetzen

b) Umformung in $Ax = b$

Lösung des homogenen Systems $Ax = 0$ mit Cramerscher Regel
↳ partikuläre Lösung von $Ax = b$ (x_0)
dann Korrekturterme (Linksnebenklasse) bestimmen

$x = x_0 + x_{korr}$ (nicht immer lösbar)

oder

Gauß'sche Elimination $\mathcal{O}(n^3)$

c) iterativ durch wiederholtes Einsetzen
(wesentlich effizienter, wenn konvergent; auch brauchbar im Falle schwacher Nichtlinearitäten)

Lösung eines lin. Gl.syst. durch wiederholtes Einsetzen

(Gauß-Seidel-Prozeß)

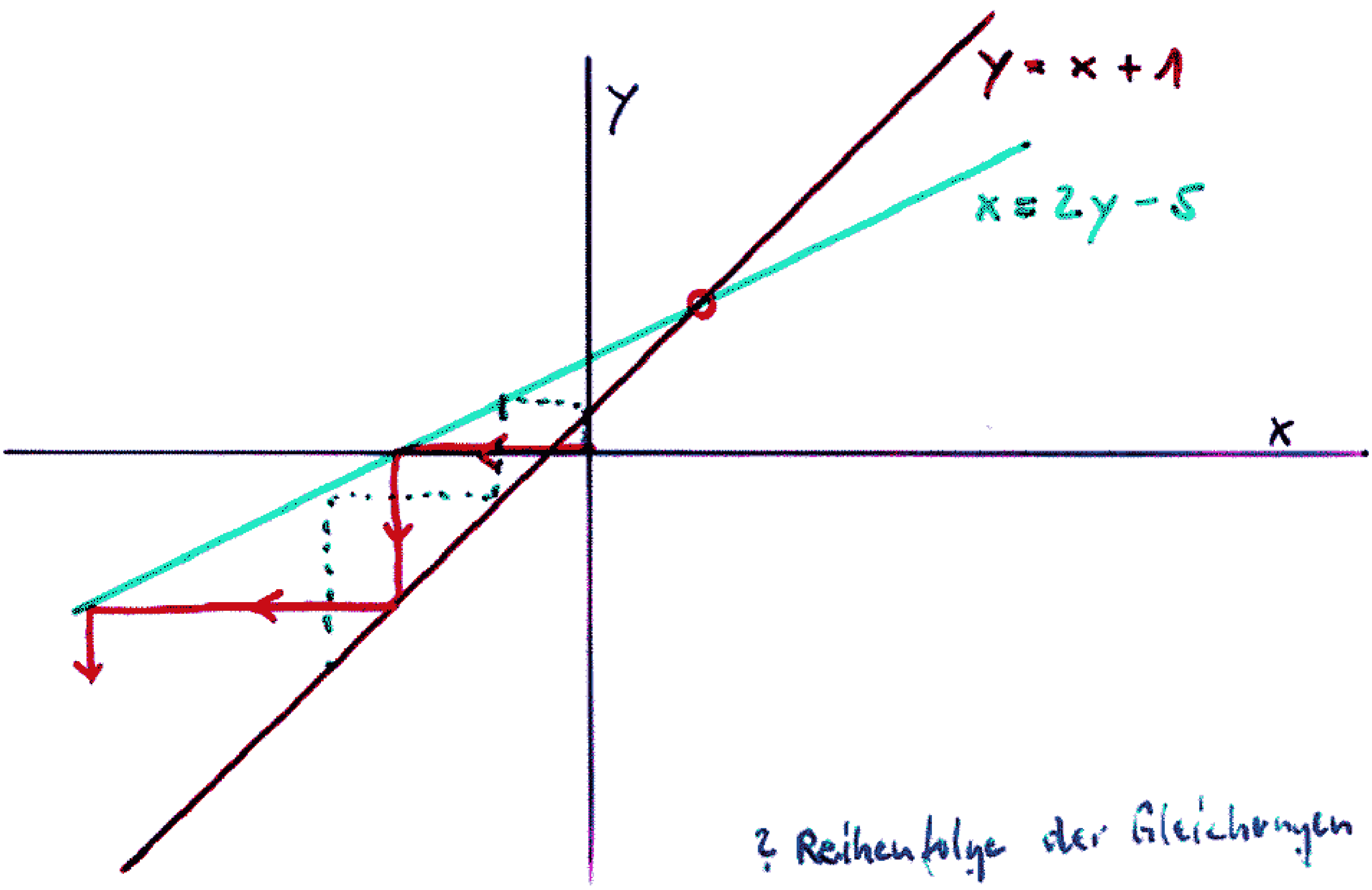
1. Versuch

$x := 2y - 5$

$y := x + 1$

Iteration		x	y	
0		0	0	Startwerte (beliebig)
1	(x)	−5	0	
2	(y)	−5	−4	
3	(x)	−13	−4	
4	(y)	−13	−12	

⋮ divergiert



? Reihenfolge der Gleichungen ändern

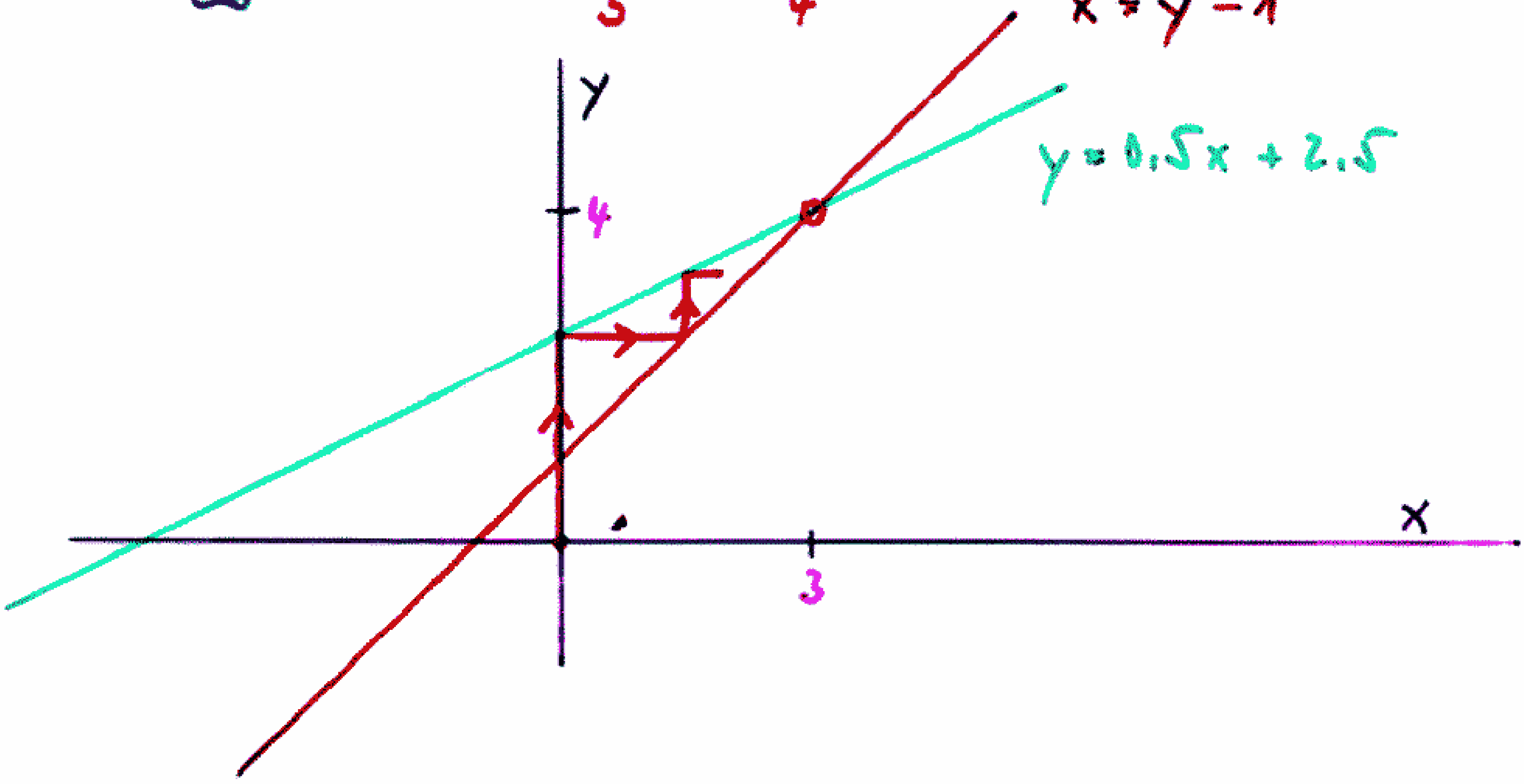
2. Versuch

$x = 2y - 5 \quad \rightarrow \quad y = 0{,}5x + 2{,}5$

$y = x + 1 \quad \quad x = y - 1$

Koeff. ≤ 1

Iteration		x	y
0		0	0
1	(y)	0	2,5
2	(x)	1.5	2,5
3	(y)	1,5	3,25
4	(x)	2,25	3,25
∞		3	4



Reihenfolge der Gleichungen spielt keine Rolle

↷

Vorteil für große Modelle: modularer Aufbau möglich; kein Sortieren der Gleichungen nötig

? wie findet der Wirtschaftsprozeß die ‚Lösung' bisher: explizite Darstellung der Beziehungen

$$x_i = f_i\left(\{x_j \mid j \neq i\}\right) \qquad i = 1, 2, \dots, n$$

$j < i$ → Reihenfolge

andere Darstellungsform (z.B. aus Extremalprinzipien heraus: $G(x) \to$ Extr.)

$$\frac{\partial G}{\partial x_i} = F_i\left(\{x_j \mid j = 1, \dots, n\}\right) \stackrel{!}{=} 0 \qquad \text{(implizit)}$$

nur iterative Lösung möglich (Nullstellenbestimmung)

Gauß-Seidel-Prozeß

- ist bei großen Gleichungssystemen das einzig praktikable Verfahren
- versucht, die schnellen – negativ rückgekoppelten – Suchprozesse der Realität in vereinfachter Form abzubilden
- kann auch im (leicht) nichtlinearen Fall konvergieren

wichtiges Kriterium: Jacobi - Matrix
(auch für $n \neq m$)

$$J = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \vdots & & & \\ \frac{\partial f_m}{\partial x_1} & \frac{\partial f_m}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_m}{\partial x_n} \end{pmatrix}$$

im linearen Fall mit $m = n$ ist dies genau die Koeffizientenmatrix A

wichtig ist: λ_{max} größter Eigenwert

Implizite Funktionen (algebraische Schleifen)

z. B. zur Lösung $z = f(z)$ $n = 1$

dann Startwert z_0 vorgeben

$$z_1 = f(z_0)$$
$$z_2 = f(z_1)$$
$$\vdots$$
$$z_n = f(z_{n-1})$$

bis $|(z_n - z_{n-1})/z_n| < \varepsilon$ für $|z_n| > 1$

$|z_n - z_{n-1}| < \varepsilon$ für $|z_n| \leq 1$

Konvergenz nicht gesichert
evtl. auch mehrere Lösungen!

z. B. $z^2 - 5z + 2 = 0$ $z_A = 0.438$

$z_B = 4.56$

a) $z = \sqrt{5z - 2}$

b) $z = 0.2\, z^2 + 0.4$

zu a) für $z_0 > z_A$ Konvergenz zu $z_n = z_B$
$z_0 < z_A$ keine Konvergenz

zu b) für $z_0 < z_B$ Konvergenz zu $z_n = z_A$
$z_0 > z_B$ keine Konvergenz

Konvergenzbedingung (Lipschitz)

$|f(z_1) - f(z_2)| \leq L\, |z_1 - z_2|$ für alle z_1, z_2

$L < 1$

oder: binäre Suche, Regula Falsi

nichtlin. Gl. system

$$f_1(x_1, x_2, \dots x_n) = 0 \qquad r_1$$
$$f_2(x_1, x_2, \dots x_n) = 0 \qquad r_2$$
$$\vdots \qquad\qquad\qquad \vdots$$
$$f_m(\underbrace{x_1, x_2, \dots x_n}_{\text{beliebiger Startvektor } \underline{x}^{(0)}}) = 0 \qquad r_m$$

Residuen

$$\begin{cases} m = n \\ m \neq n \end{cases}$$

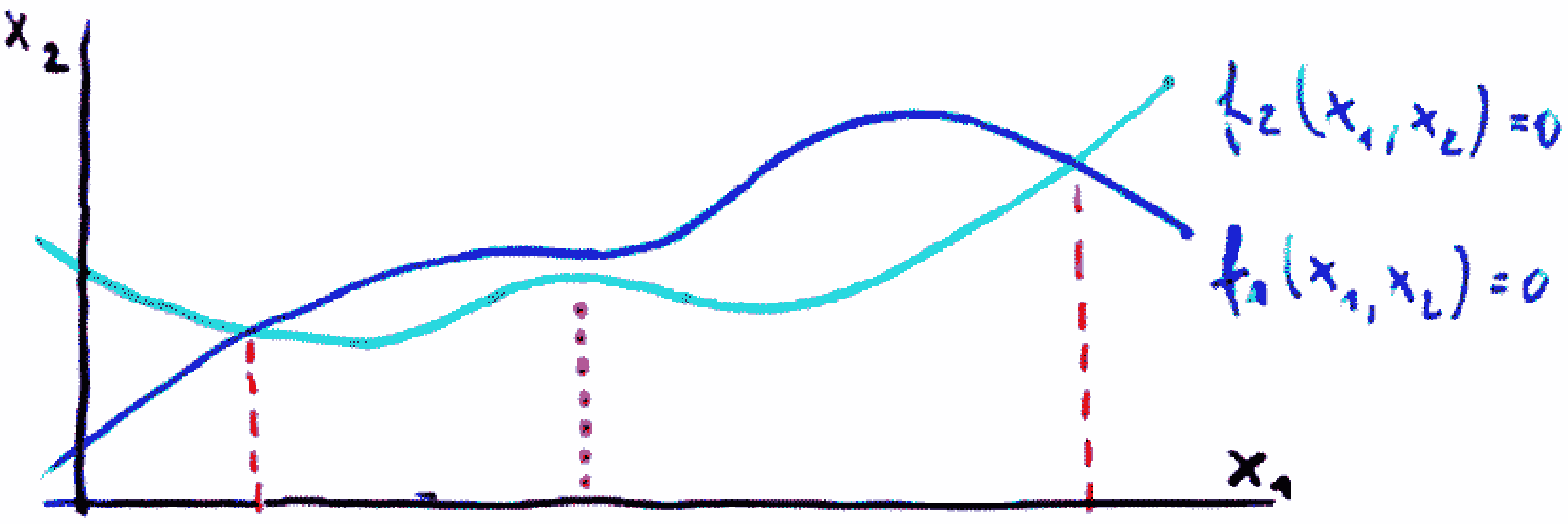
$m < n$ $\quad$ $m > n$

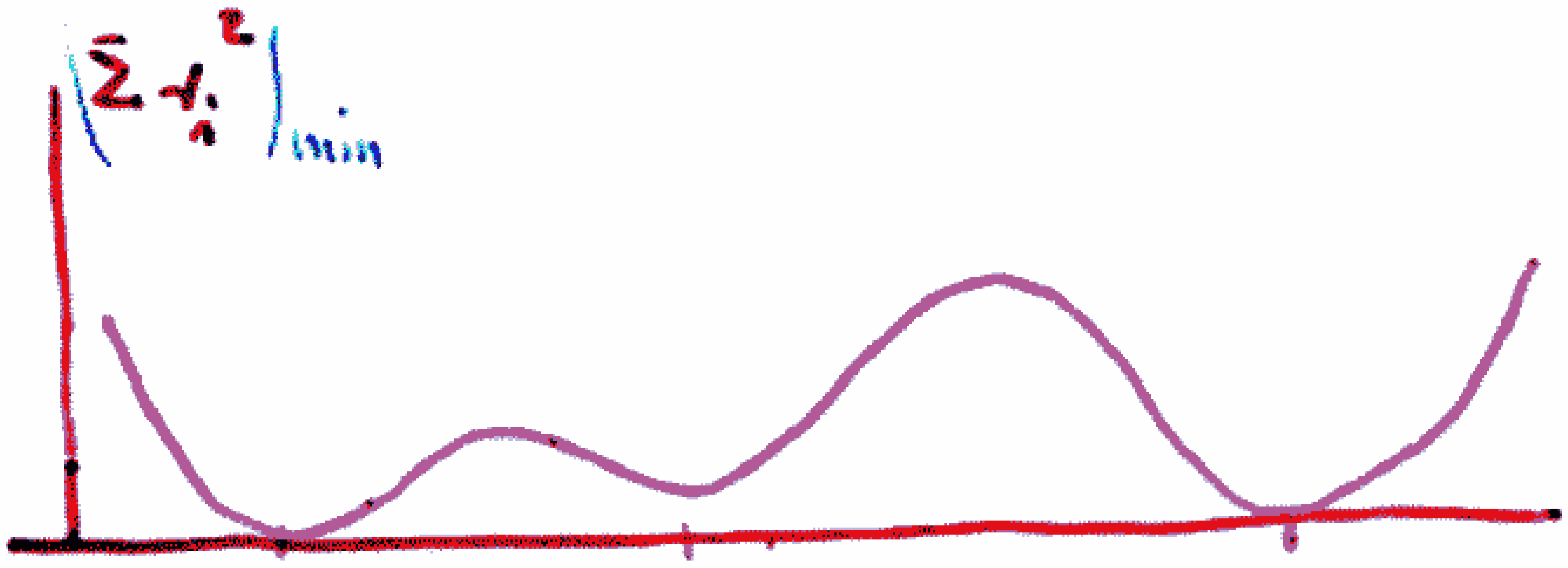
übliches Lösungsverfahren (iterativ)

$\sum r_i^2 \rightarrow \min$ $\quad$ Quadratsummen-Minimierung (Spezialfall der Optimierung)

Gefahren: es können mehrere Lösungen existieren

es können Scheinlösungen hinzukommen (abh. von Lösungsverfahren)





Lösung nichtlinear Gleichungssysteme durch iterative Prozesse

Der Gauss Seidel Prozess

- versucht die schnellen negativ rückgekoppelten Prozesse der Realität in vereinfachter Form abzubilden
- ist bei großen Gleichungssystemen das einzig praktikable Verfahren

$$F_i(\{x_j \mid j = 1, \dots n\}) = 0 \qquad (i = 1, \dots n)$$

$$x_i := f_i(\{x_j \mid j \neq i\}) \qquad (i = 1, \dots n)$$

Konvergenzrate:

$$\max_i |x_i^{t+1} - x_i^t| \sim |\lambda \max|^t \qquad \text{für } t \to \infty$$

$\lambda \max$: größter Eigenwert der Jakobimatrix $\left\{\frac{\partial f_i}{\partial x_j}\right\}$

2 hinreichende Bedingungen für die Konvergenz der Gaus Seidel Iteration

a) Diagonaldominanz:

$$x_i^{t+1} = f_i(\{x_j^t \mid j \neq i\})$$

falls $\sum_i \frac{\partial f_i}{\partial x_j} < 1$ für $(j = 1, \dots n)$

oder $\sum_j \frac{\partial f_i}{\partial x_j} < 1$ für $(i = 1, \dots n)$

dann $|\lambda \max| < 1$

b) fast rekursive Gleichungen:

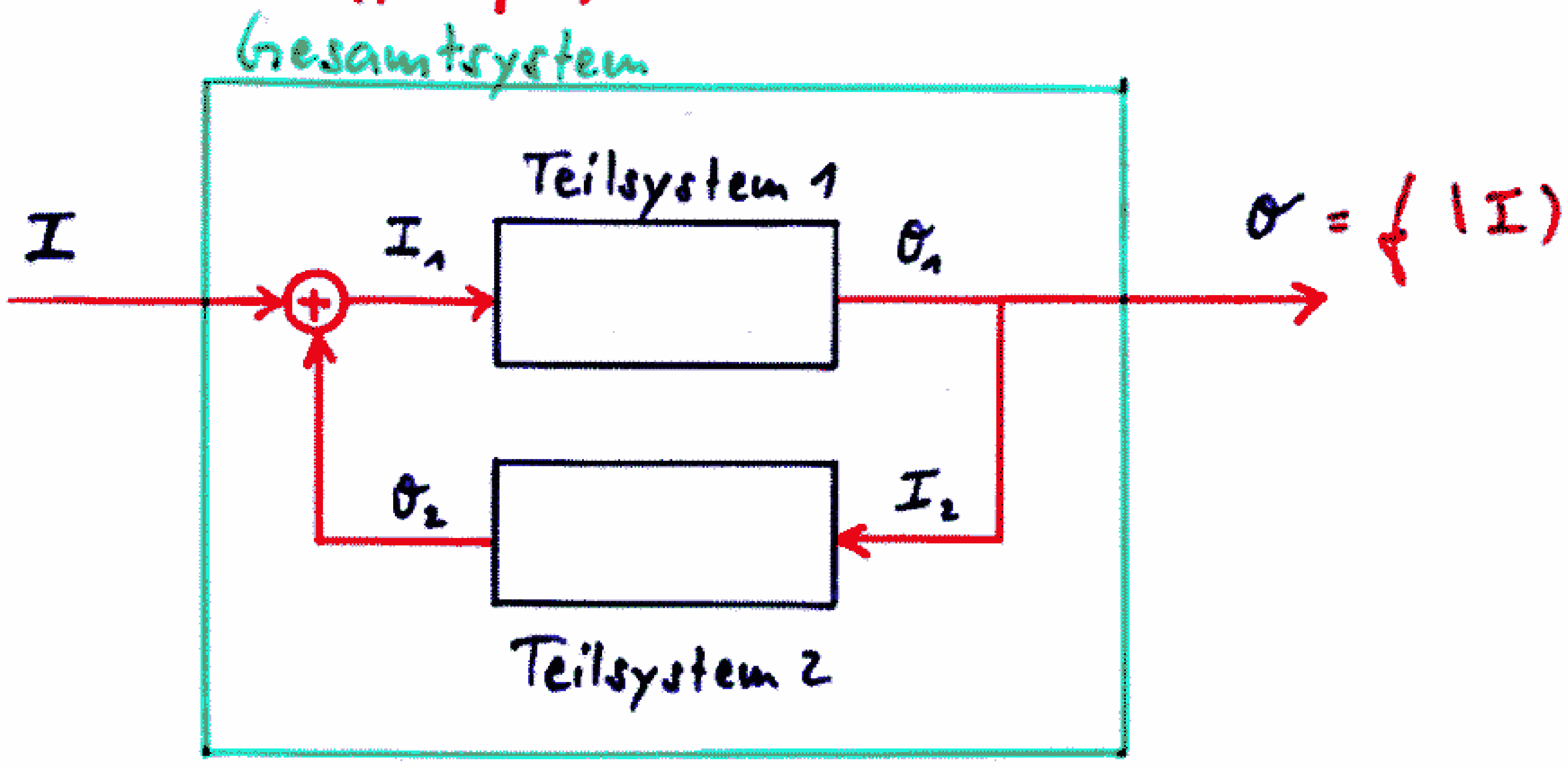
$$x_i^{t+1} = R_i(\underline{x}^t) + \varepsilon \cdot F_i(\underline{x}^t)$$

$$\frac{\partial R_i}{\partial x_j} = 0 \quad \text{für } j > i; \quad \|F\| = 1$$

$$|\lambda \max| \sim \varepsilon$$

?: lin. Syst. mod. = einfach ($\neq$ Komplex)

Kästchendenken :



$$O = O_1 = f_1(I_1) = f_1(I + O_2)$$

$$O_2 = f_2(I_2) = f_2(O)$$

$$O = f_1(I + f_2(O))$$

einfachster Fall : lineare Beziehungen

$$O_1 = a \cdot I_1$$
$$O_2 = b \cdot I_2$$

$\left.\begin{matrix} a \\ b \end{matrix}\right\}$ Parameter

$$O = a \cdot I + a \cdot b \cdot O$$

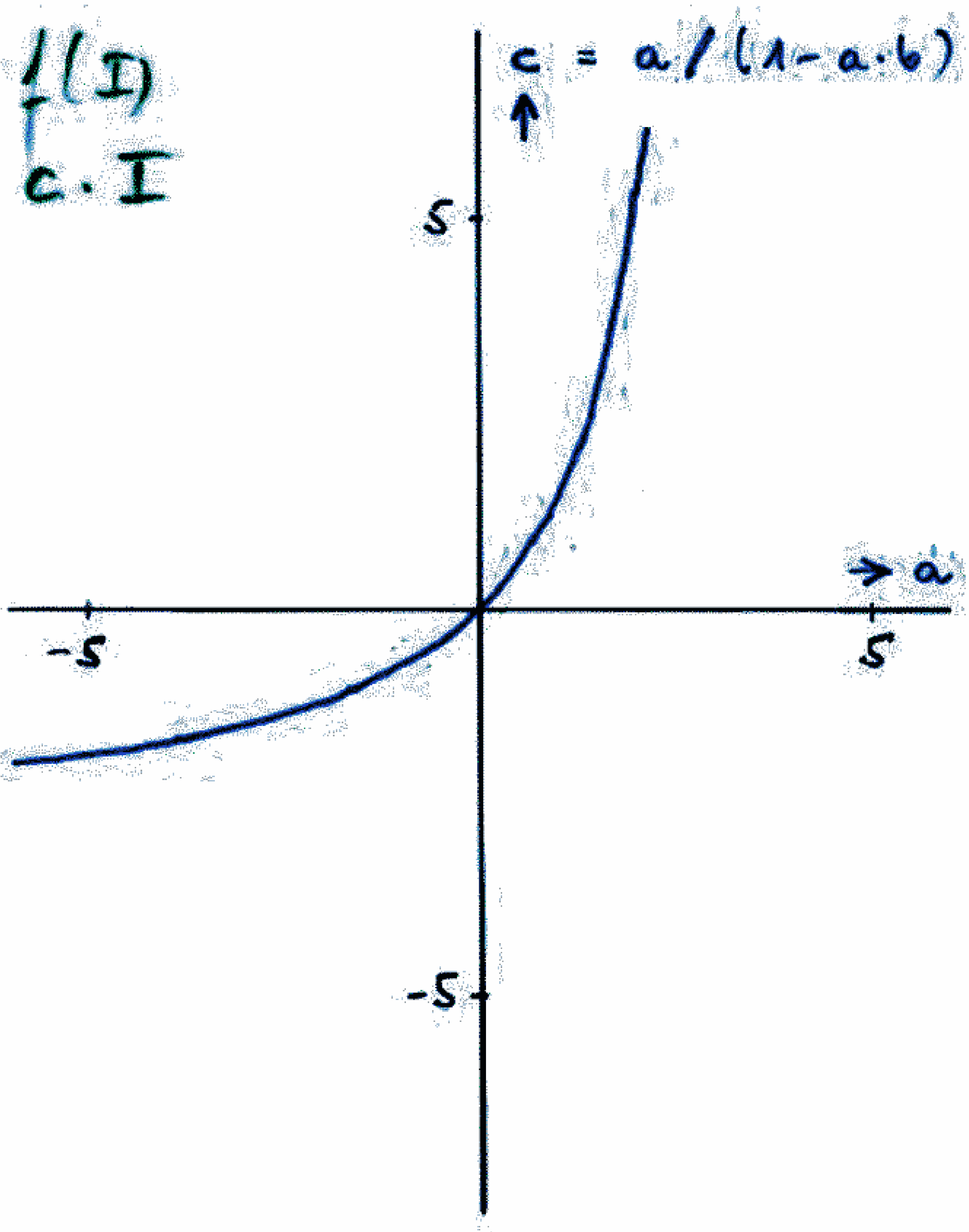
$$O = \frac{a}{1 - a \cdot b} I = c \cdot I$$

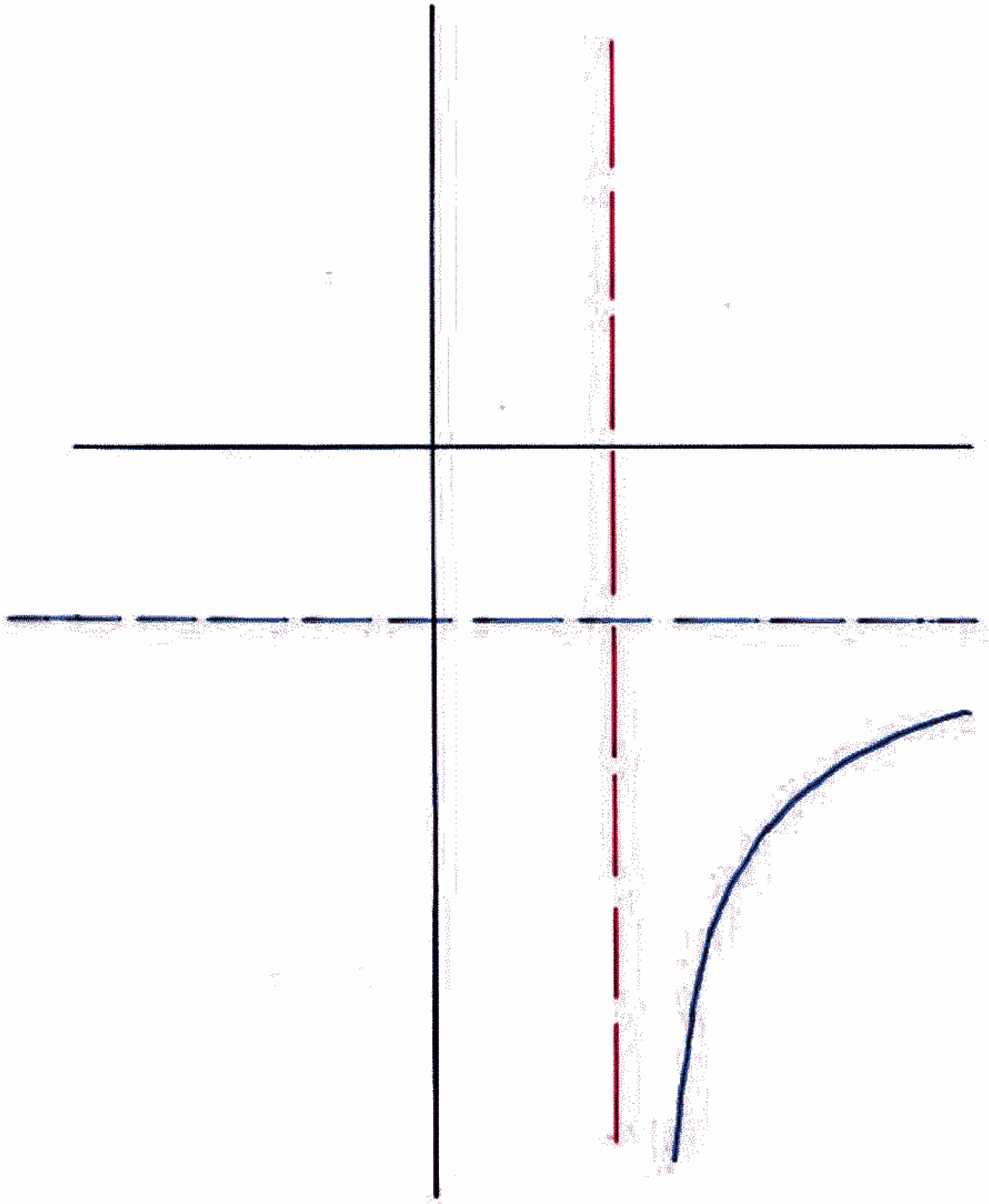
Rückkopplung
Feedback

Ziel : bestmögliche Organisation der Teilsysteme

$\vartheta = f(I)$
$= c \cdot I$

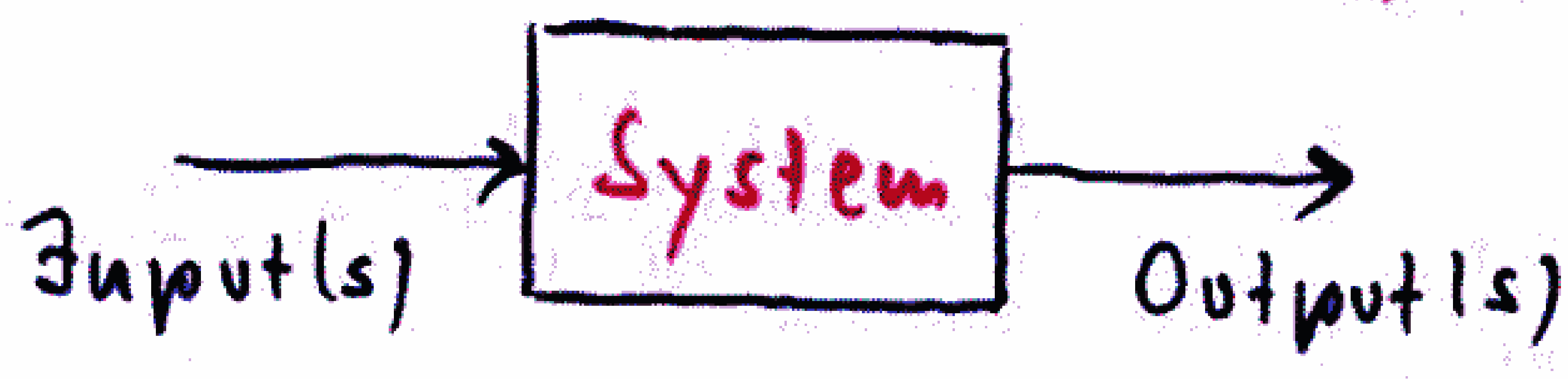
$c = a/(1 - a \cdot b)$ für $b = \frac{1}{3}$



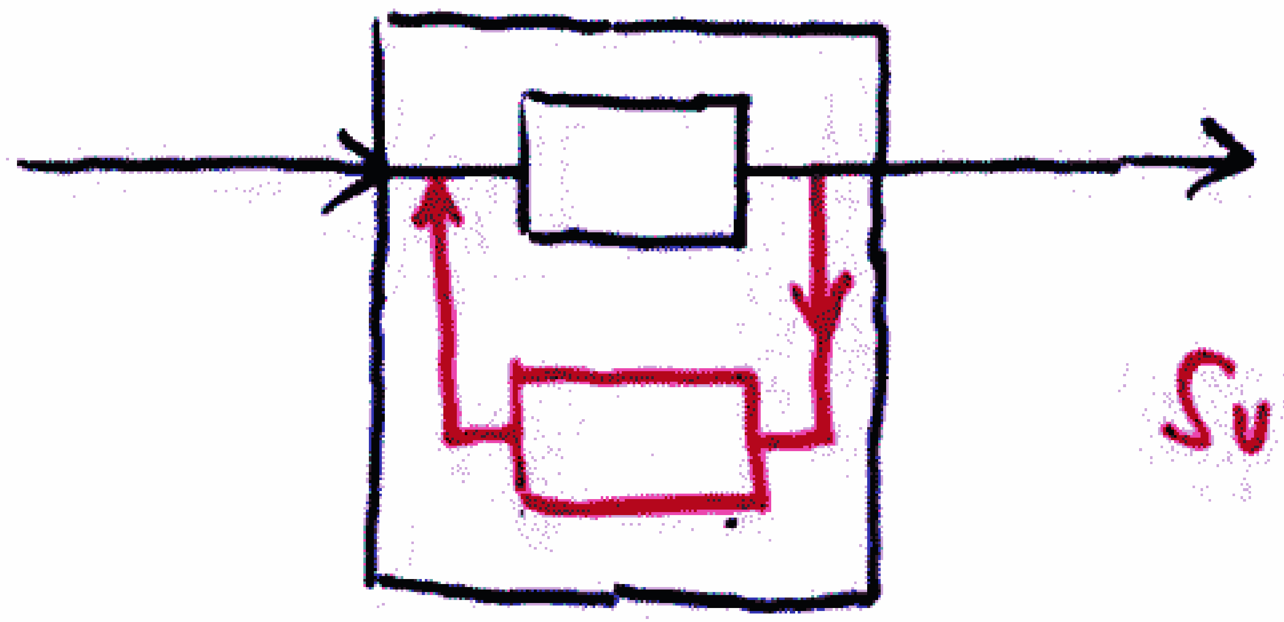


‚Drehen' am Parameter a bewirkt
nichtlineares Verhalten
ggf. Umklappen

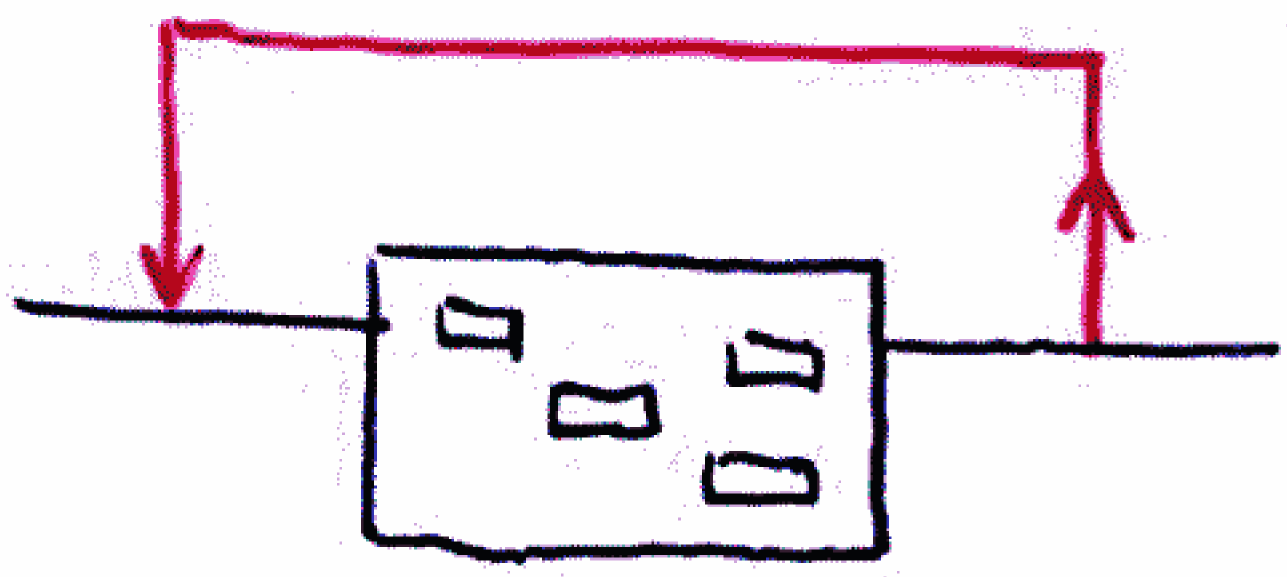
black box - Methode
‚Kästchen - Denken'



Input - Output Analyse



Subsystem(e)



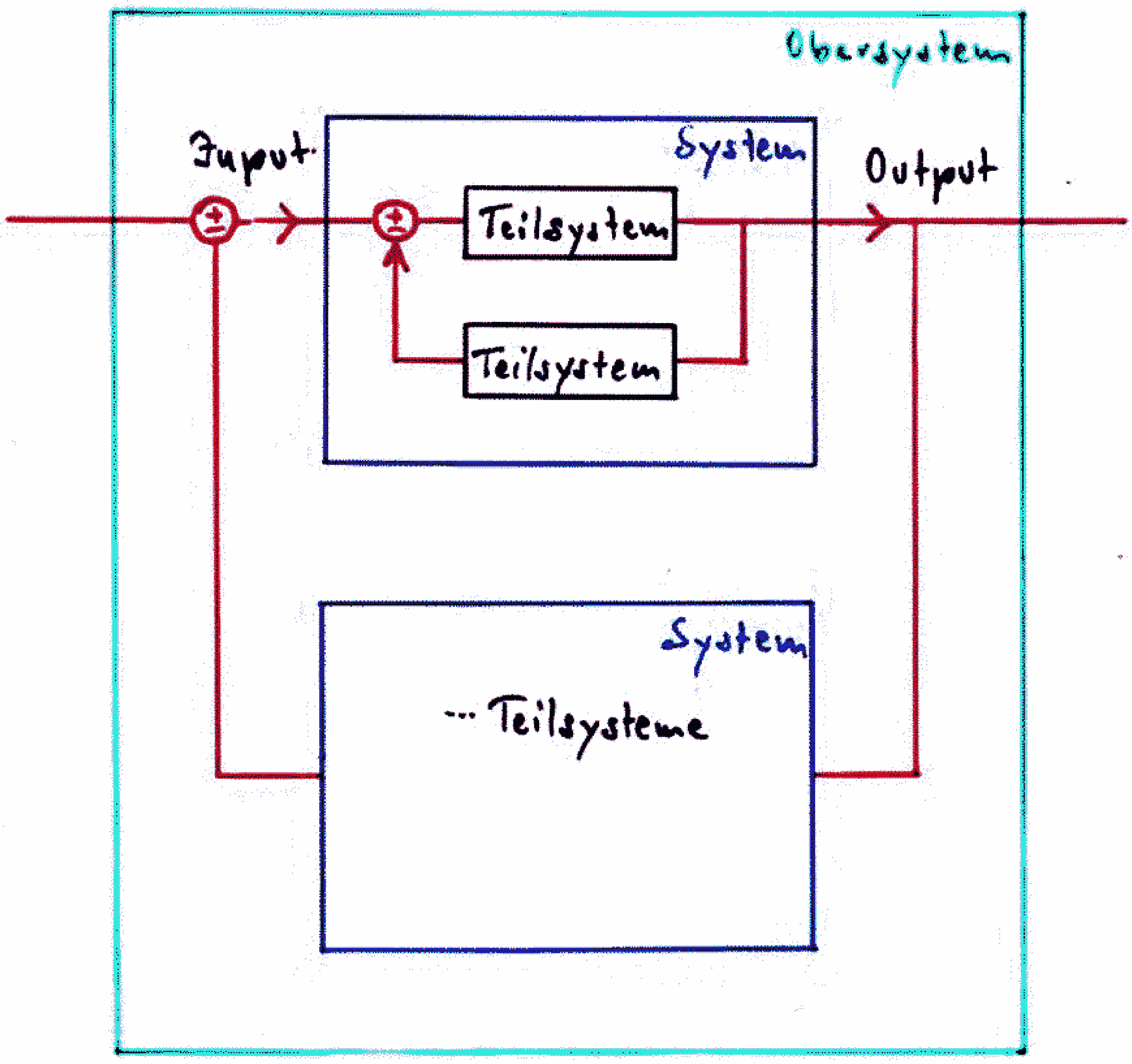
Obersystem
(Umwelt)
(Umfeld)

Rückwirkungen (mit Verzögerung)

- schnelle
- langsame

je nach Zeithorizont:

- instantan
- nicht berücksichtigt



1. Schwierigkeit : Komplexität
2. Schw. : Dynamik

Schwierigkeiten

Komplexität

- Konnektivität
  - Anzahl der Beziehungen
  - Beziehungsarten
- Varietät
  - Anzahl der Elemente
  - Elementarten

Dynamik

- Verzögerungen, Hysteresen
- Schwelleneffekte, Umklappen
- Gedächtnis, Erwartung (Lernen)

(erst dadurch explikativ / erklärend : Kausalmodell)

Nichtlinearität

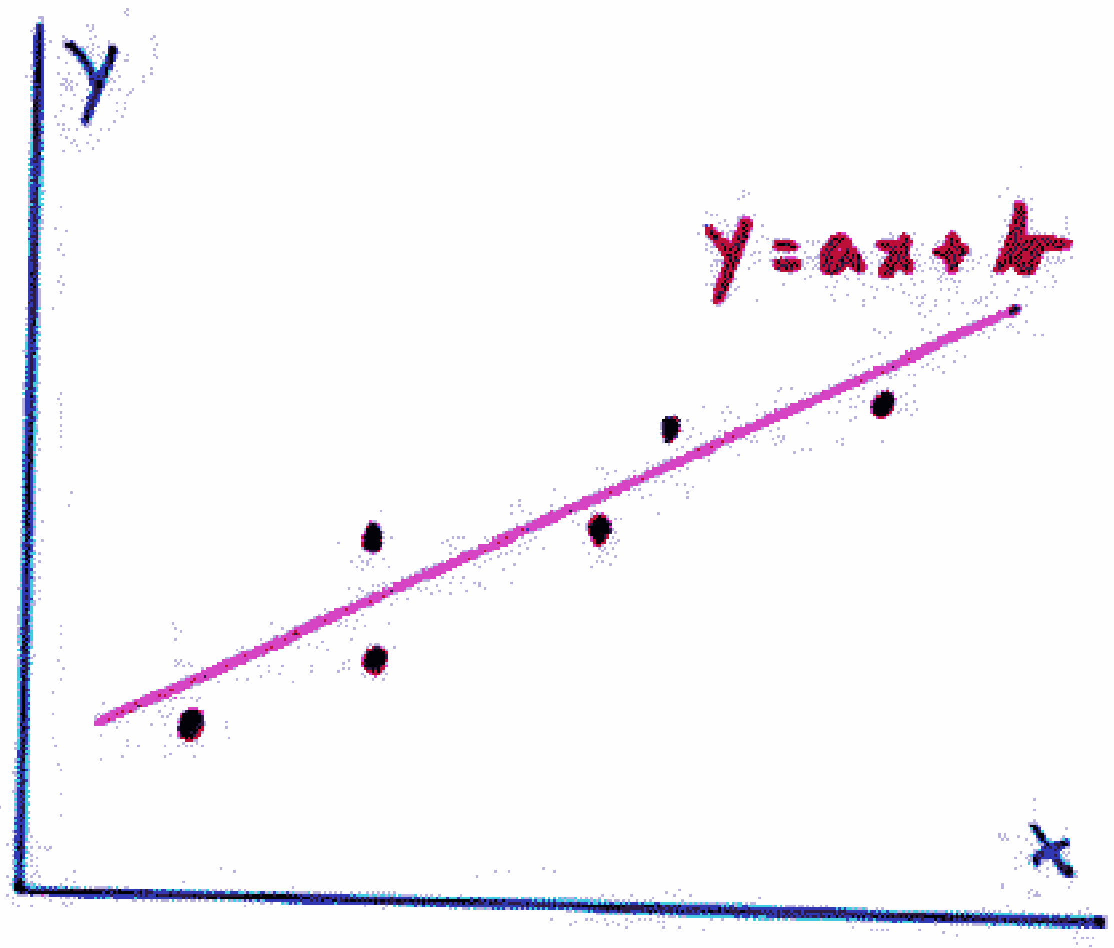
besonders wichtig : nichtlineare Dynamik
(neu) (Chaotik)

Aufstellung der Gleichungs-Beziehungen

a) Verwertung aller bekannten Naturgesetze
(soweit anwendbar)

b) Verwertung aller Konsistenzbedingungen
(z. B. Bilanzgleichungen wie
Σ inputs = Σ outputs im Poolmodell)

c) Verwertung empirischer Daten



beobachtete Daten aus der Vergangenheit

hier: lineare Beziehung unterstellt

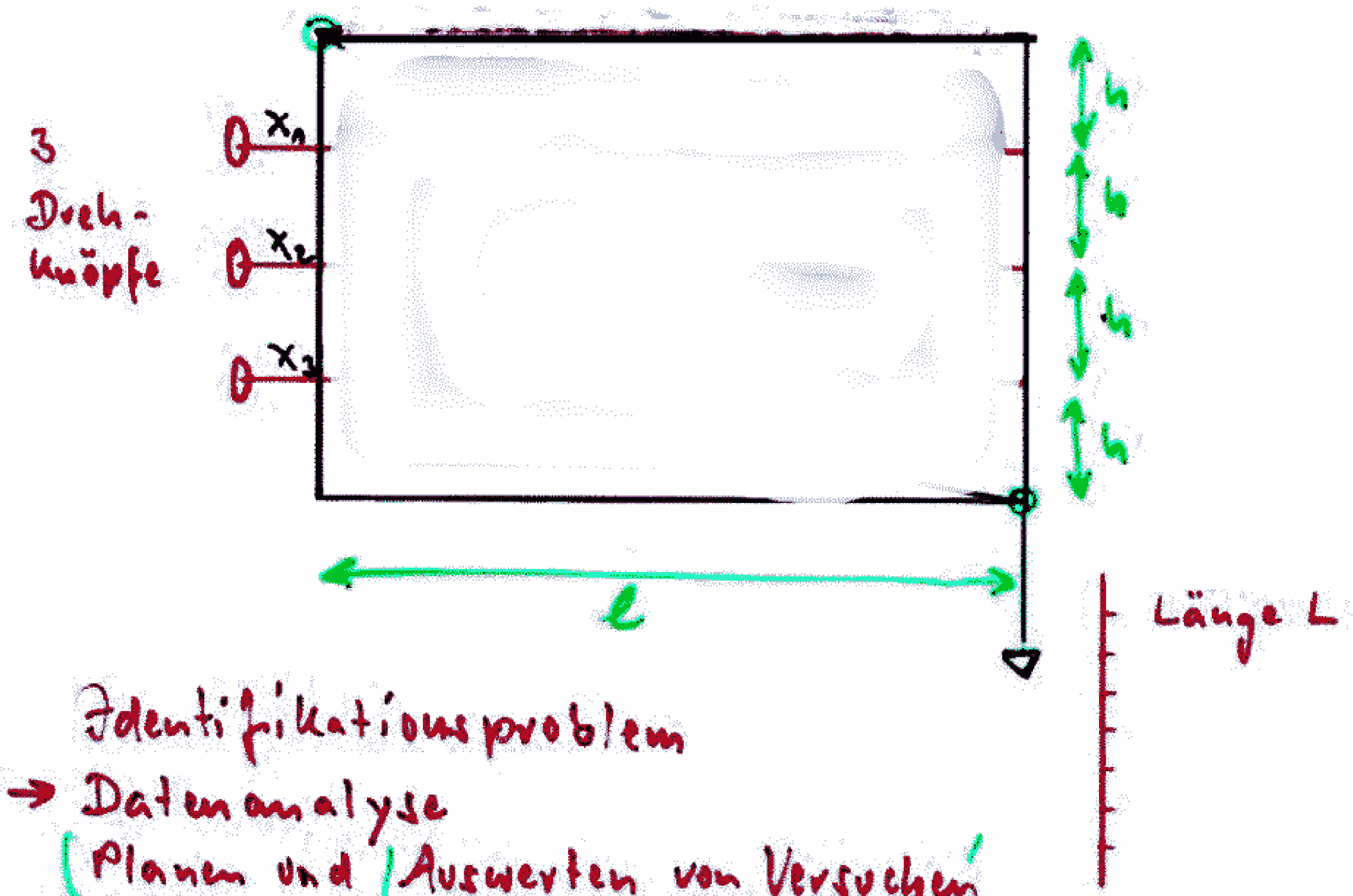
Regressions- / Korrelations-Analyse

- Σ der quadrat. Abweichungen → min
- maximum likelihood

Modelltyp muß unterstellt werden

Parameterschätzung
(hier: a, b)

Eine einfache ‚Black Box'



Identifikationsproblem
→ Datenanalyse
(Planen und) Auswerten von ‚Versuchen'

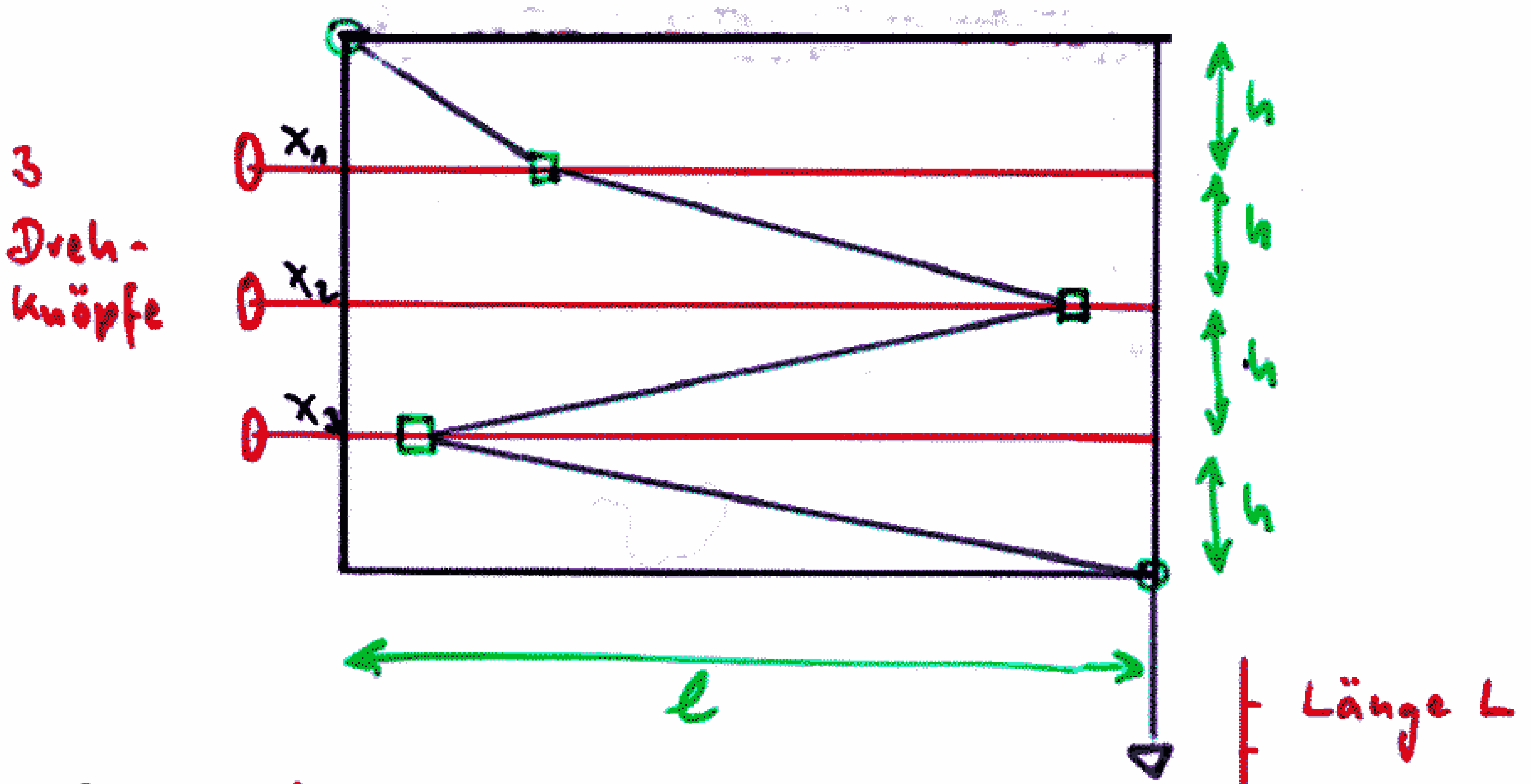
richtiges Model:

$$L = \sqrt{h^2 + x_1^2} + \sqrt{h^2 + (x_1 - x_2)^2} + \sqrt{h^2 + (x_2 - x_3)^2} + \\ + \sqrt{h^2 + (\ell - x_3)^2}$$

? exakte Analyse + analyt. Optimierung
oder
experimentelle Optimierung

Lösungsstrategie

Eine einfache ‚Black Box'



Identifikationsproblem

→ Datenanalyse

(Planen und) Auswerten von ‚Versuchen'

richtiges Model :

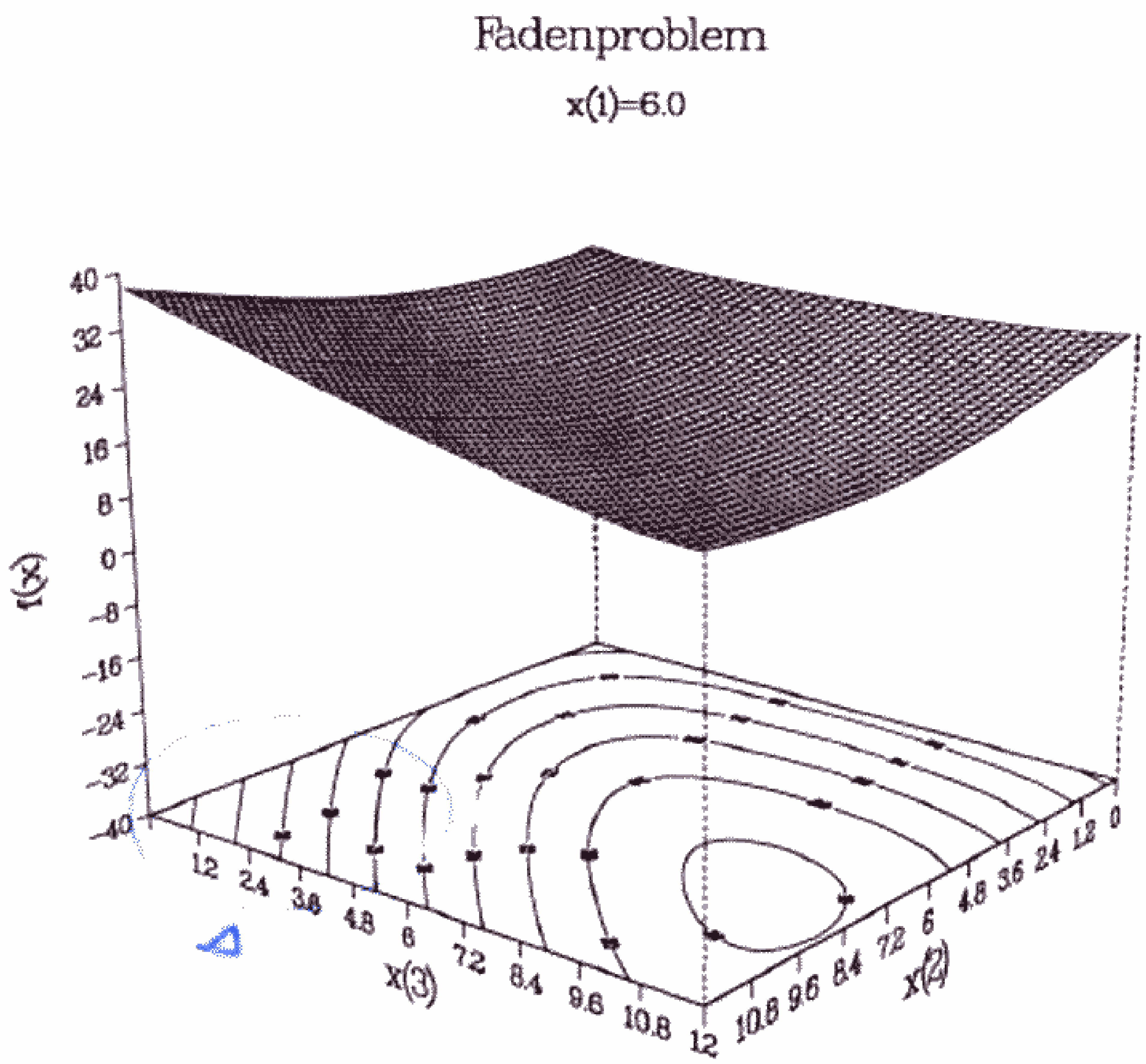
$$L = \sqrt{h^2 + x_1^2} + \sqrt{h^2 + (x_1 - x_2)^2} + \sqrt{h^2 + (x_2 - x_3)^2} + \sqrt{h^2 + (l - x_3)^2}$$

? exakte Analyse + analyt. Optimierung

oder

experimentelle Optimierung

Lösungsstrategie



für diesen Bereich
wäre ein lineares Modell als Approximation
‚brauchbar'

2.6 Verwertung empirischer Daten (Varianzanalyse)

$$\varepsilon_k \dashrightarrow \boxed{a} \longrightarrow y_k \qquad k = 1, 2, \dots, n$$

„Modell" $y_k = a + \varepsilon_k$ — $a = \text{const}$

Abweichg → Min

$$S(a) = \sqrt{\sum_{(k)} \varepsilon_k^2} = \sqrt{\sum_{(k)} (y_k - a)^2}$$ euklidische Norm

andere Maße für Abweichung:

$$R(a) = \sum_{(k)} |y_k - a| = \sum_{(k)} |\hat{\varepsilon}_k|$$

$$T(a) = \max_{(k)} |y_k - a|$$

$S \to \min$: L_2- Approximation (diskrete Gaußsche A.)

$R \to \min$: L_1- Approximation

$T \to \min$: L_∞- Approximation (Tschebyschew A.)

Beispiel : $y_k = \{285, 294, 297, 302, 305, \cancel{309}, 315\}$ — 393 „Ausreißer"

$a_S = 301$ (313)

$a_R = 302$ (302)

$a_T = 300$ (339)

(300)

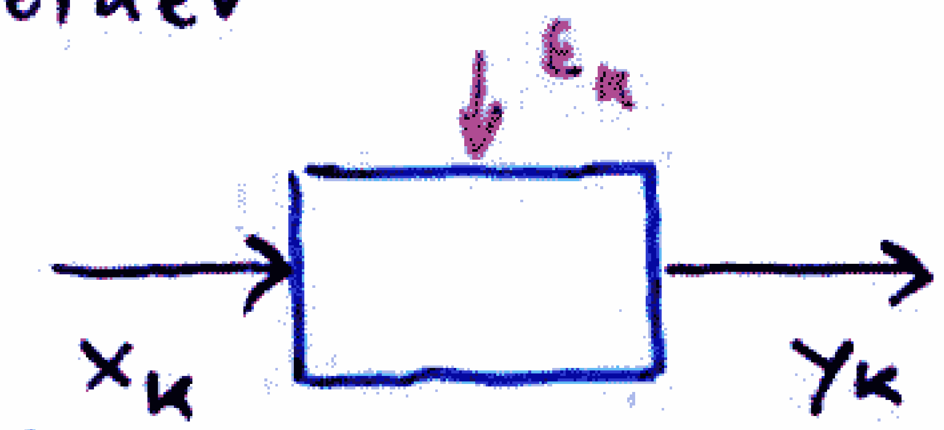
Ausgleichsrechnung

Schätzverfahren

Anpassungsprinzipien

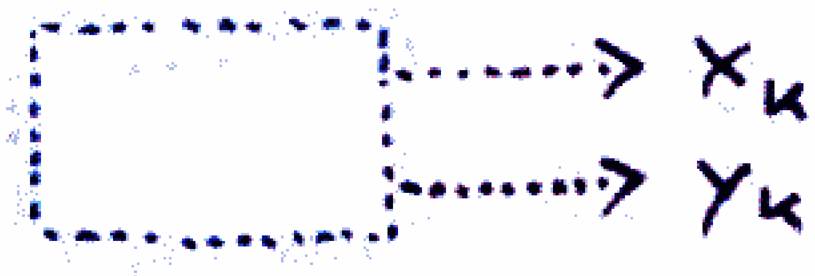
L_p-Norm : $\sqrt[p]{\sum_{(k)} |\hat{\varepsilon}_k|^p}$ $\quad 1 \le p \le \infty$

allgemeiner



$k = 1, 2, \dots, n$

unabh. Var.
kontrollierte



Ursache / Wirkung
Koinzidenzen

gesucht: Zusammenhang $y = f(x, a_1, \dots a_m)$

„Gesetz", „Theorie"
„Modell"
Hypothese

Regressionsanalyse
Korrelationsanalyse (x_k ebenfalls fehlerbehaftet)
Spezialfall: $x \equiv t$ Zeit : Fit-Methode
Trendextrapolation
Prognosemodell

Beispiel: $y = \underline{a}x + \underline{b}$ bzw. $y - ax - b = 0$

$$S(a,b) = \sum_k p_k (y_k - a x_k - b)^2 \rightarrow \min$$

p_k als Gewichtsfaktoren

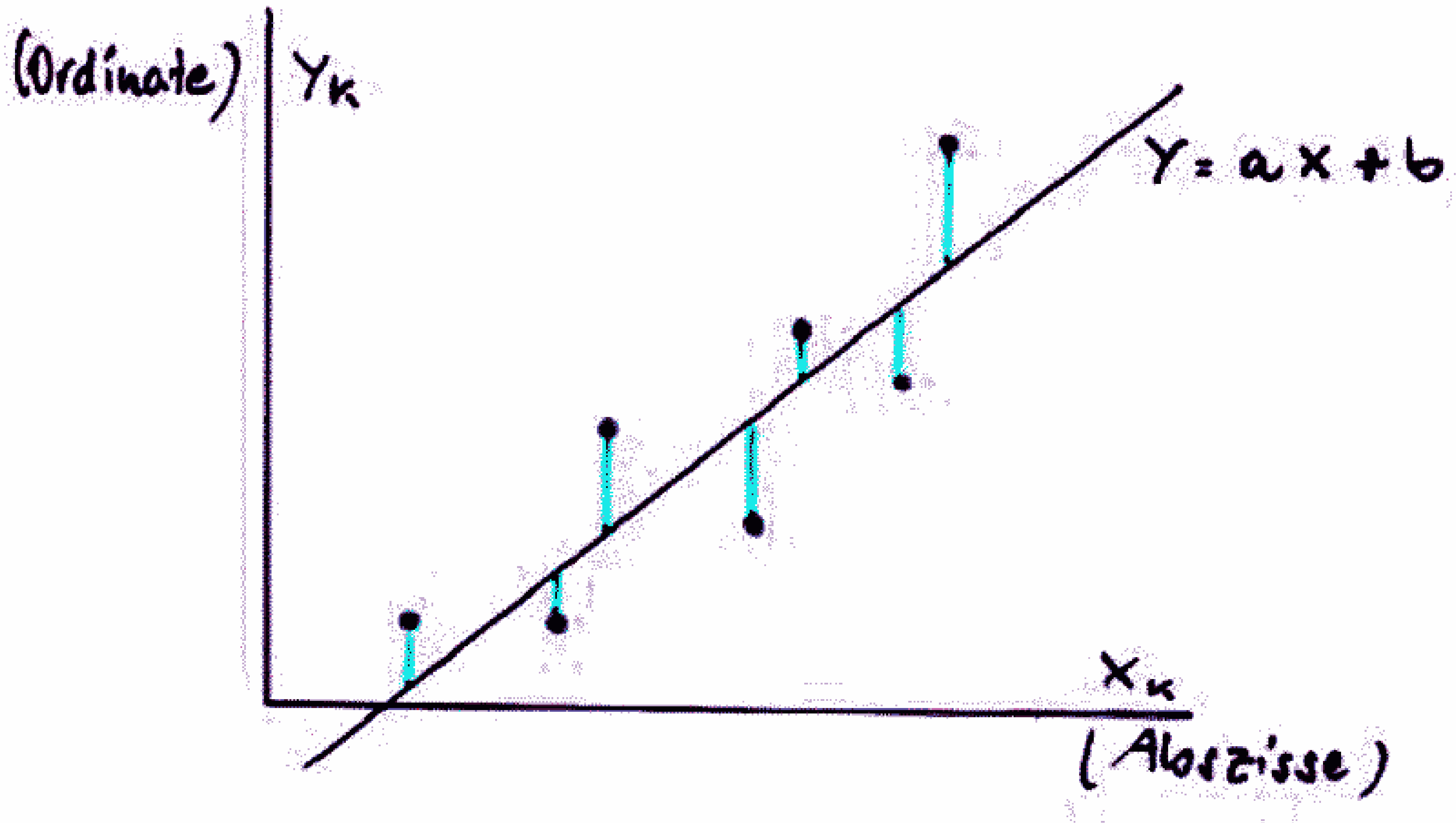
z. B. $p_k = 0$ für Ausreißer

z. B. $p_k = \frac{1}{y_k^2}$: relative Fehler

$$\frac{\partial S(a,b)}{\partial a} = 0$$

$$\frac{\partial S(a,b)}{\partial b} = 0$$

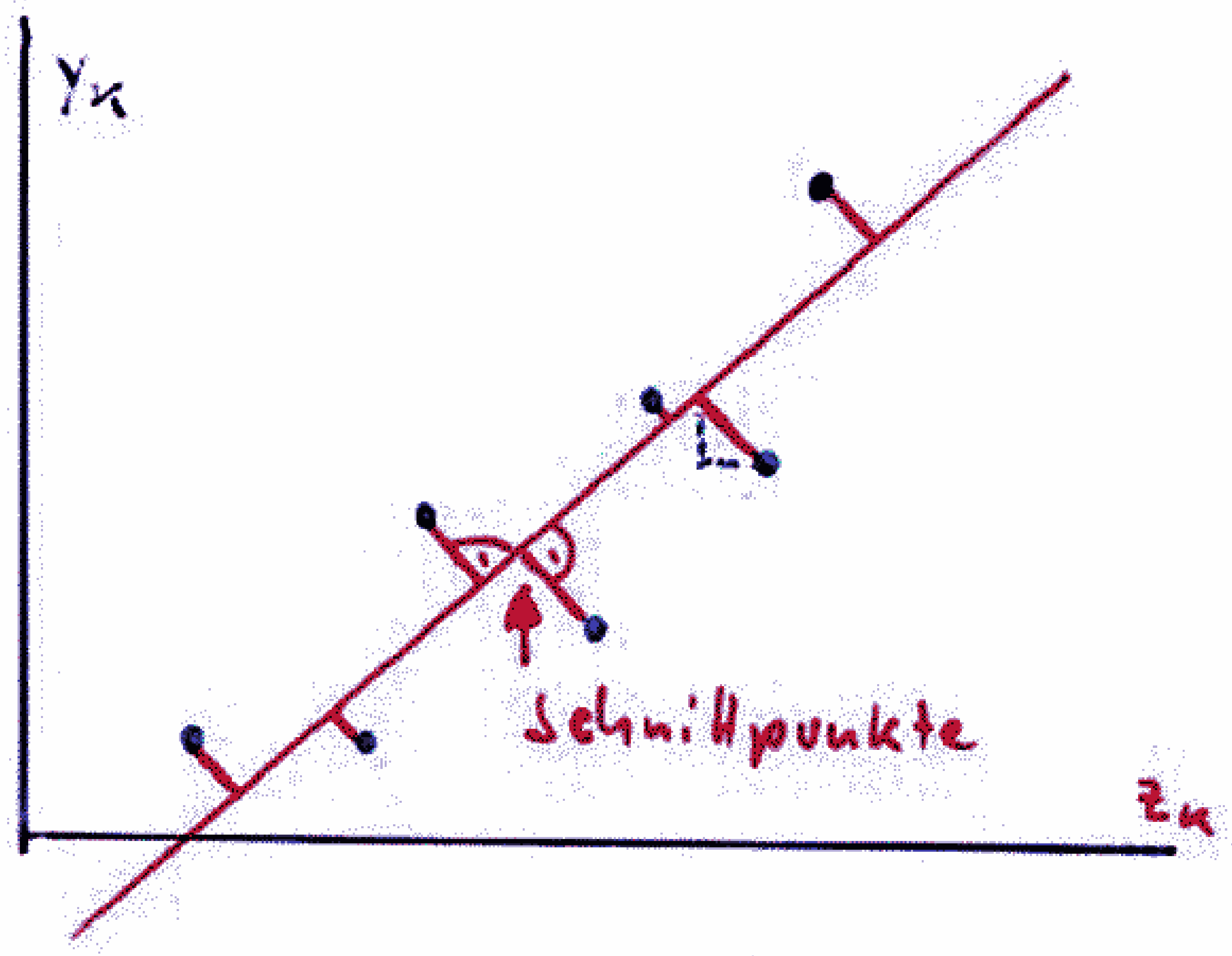
Gleichungssystem
(Nullstellenproblem)



hierbei angenommen : nur y_k fehlerbehaftet

andere Möglichkeit : auch x_k fehlerbehaftet

$x_k = z_k + \eta_k$



bzw. $\underbrace{a_1, a_2}, \dots, a_m$

$$S(a, b, z_1, z_2 \dots z_K) =$$

$$\sum_K \left[\underbrace{p_K (y_K - a z_K - b)^2}_{} + q_K (z_K - x_K)^2 \right] \to \min$$

bzw. allgemeiner $\left(y_K - f(a_1, a_2, \dots, a_m, z_1, z_2, \dots, z_n) \right)$

$\leadsto$ notwendige Bedingungen:

$$\frac{\partial S}{\partial a_i} = 0 \qquad i = 1, 2, \dots, m$$

$$\frac{\partial S}{\partial z_k} = 0 \qquad k = 1, 2, \dots, n$$

$n + m$ simultane Gleichungen

evtl. mehrere (relative) Minima
lokale

wichtigste Modelle für 1 erklärende Variable x

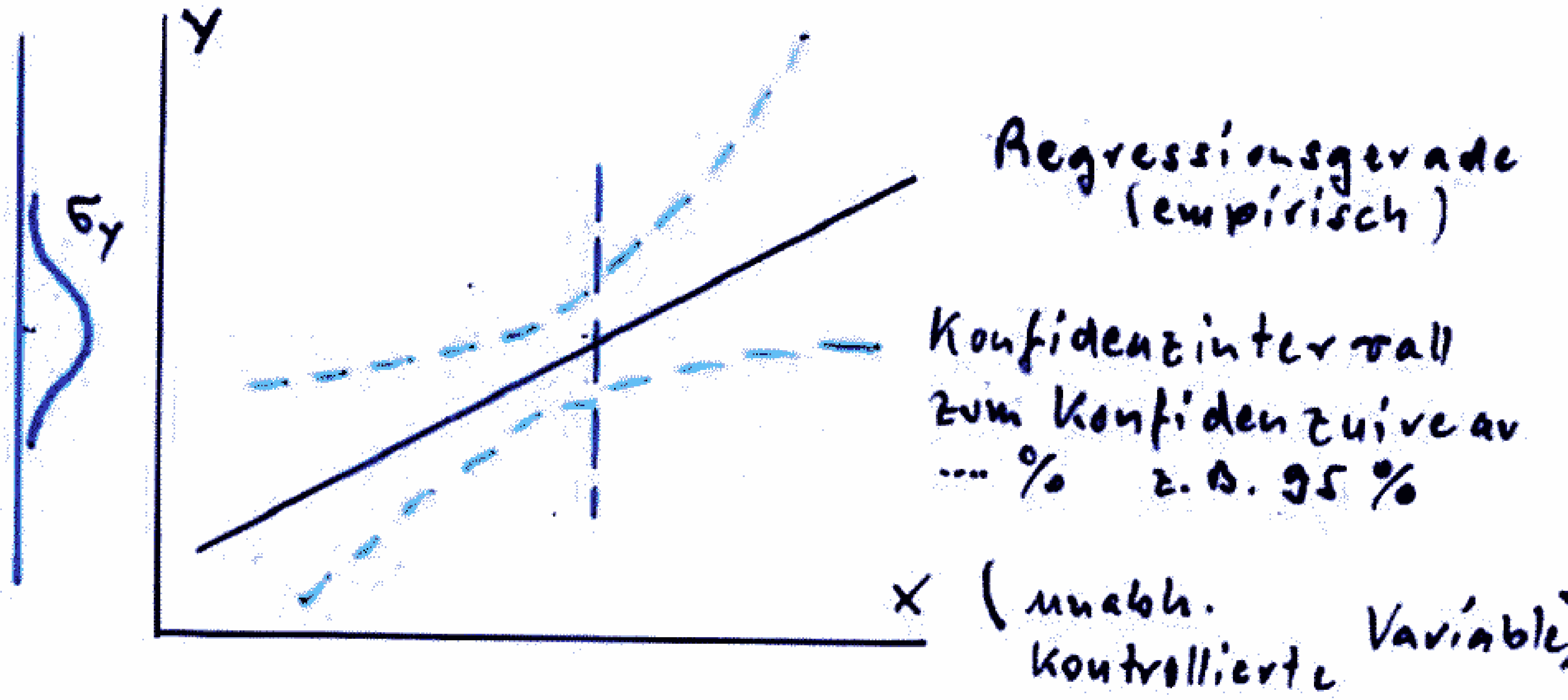
$y = ax + b$	linear
$y = a + \exp(b + cx)$	exponentiell
$y = \dfrac{a}{1 \pm \exp(c(b-x))} + d$	logistisch
$y = a \cdot \exp(\pm \exp(c(b-x))) + d$	Gompertz
$y = a + bx + cx^2$	Parabel
allgemeiner	Polynom
$y = a + \dfrac{b}{x-c}$	hyperbolisch
$y = a \exp(-c(x-b)^2) + d$	Gauß (ökologisch)
$y = a + bx^c$	Potenz

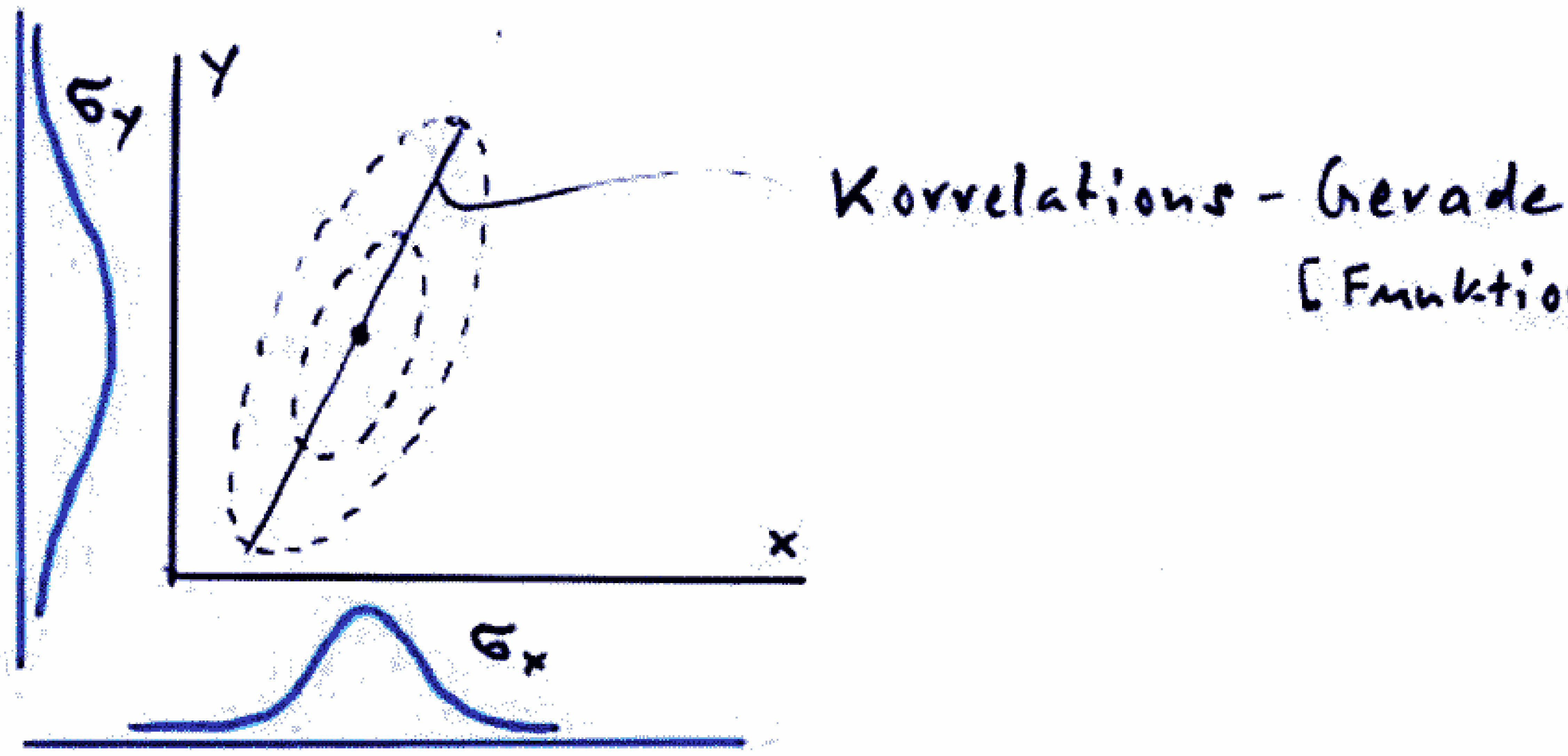
$\log(y-a) = \log b + c \log x$

d.h. bis zu 4 Parameter sind simultan zu schätzen

Ausreißer festlegen
Gewichtsfaktoren festlegen
Modelltyp wählen / ausprobieren

→ Software-Paket für interaktive Problemlösung (z.B. IRECA)





W. dichte $f(x, y; \sigma_x, \sigma_y)$ $n = 2$

$f(\underline{x}; \underline{\lambda})$ $n > 2$

$\uparrow$ Zufallsgrößen $\quad \uparrow$ Parametervektor

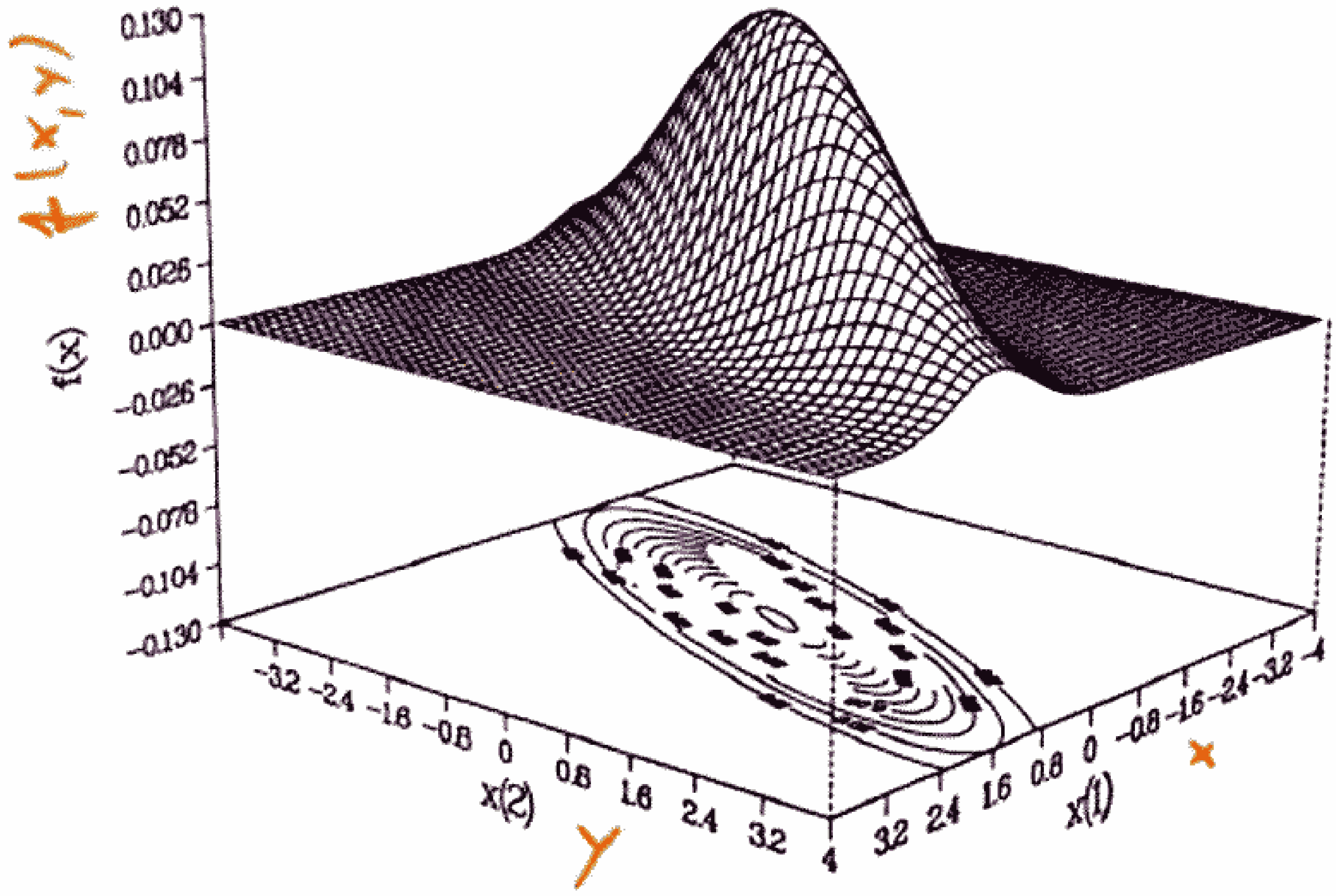
$$dP^{(j)} = f(x^{(j)}; \lambda)\, dx$$

a-posteriori - Wahrsch. des Ereignisses $x^{(j)}$

$$dP = \prod_{j=1}^{N} f(x^{(j)}; \lambda)\, dx$$

Gesamtwahrsch. der Stichprobe

$dP \rightarrow \max$ Maximum Likelihood Methode two–dimensional normal distribution



$$f(x,y) = \frac{1}{2\pi\,\sigma_x \sigma_y \sqrt{1-\rho^2}}\; e^{-\frac{1}{2(1-\rho^2)}[Q]}$$

$$Q = \left(\frac{x-\xi_x}{\sigma_x}\right)^2 - 2\rho^2 (x-\xi_x)(y-\xi_y) + \left(\frac{y-\xi_y}{\sigma_y}\right)^2$$

Linien Q = konst. : elliptische Höhenlinien von $f(x,y)$

$n > 2$

$$f(\underline{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{n}{2}} \sqrt{\mathrm{Det}\, B^{-1}}}\; e^{-\frac{1}{2}(x-\xi)^T B\,(x-\xi)}$$

B^{-1} Kovarianzmatrix

Quadratsummenminimierung am Beispiel eines Schätzproblems (KQ Schätzer) LS

Beobachtungs-Tupel $\begin{Bmatrix} x_1, x_2, \dots, x_t, \dots, x_T \\ y_1, y_2, \dots, y_t, \dots, y_T \end{Bmatrix}$

x unabhängige Variable (Ursache)

y abhängige Variable (Wirkung)

$\hat{y}(a, x)$ Modell, Hypothese

$a \in \mathbb{R}^n$ Parameter des Modells, zu schätzen

Schätzaufgabe

$$f(a) = \sum_{t=1}^{T} \left(\hat{y}(a, x_t) - y_t \right)^2 \rightarrow \text{Min!}$$

Sei $\hat{y}(a,x)$ zweimal stetig differenzierbar nichtlin. Fkt. bezügl. $a_1, a_2, \dots, a_n$

Dann

$$\nabla f(a) = 2\sum_{t=1}^{T} (\hat{y}(a,x_t) - y_t)\, \nabla \hat{y}(a,x_t)$$

und

$$\nabla^2 f(a) = 2\sum_{t=1}^{T} (\hat{y}(a,x_t) - y_t)\, \nabla^2 \hat{y}(a,x_t) +$$

$$+ 2\sum_{t=1}^{T} \nabla \hat{y}(a,x_t)\, [\nabla \hat{y}(a,x_t)]^T I$$

2. Term : stets positiv (semi-) definit

1. Term : kann verschiedenes Vorzeichen haben!

$\leadsto$

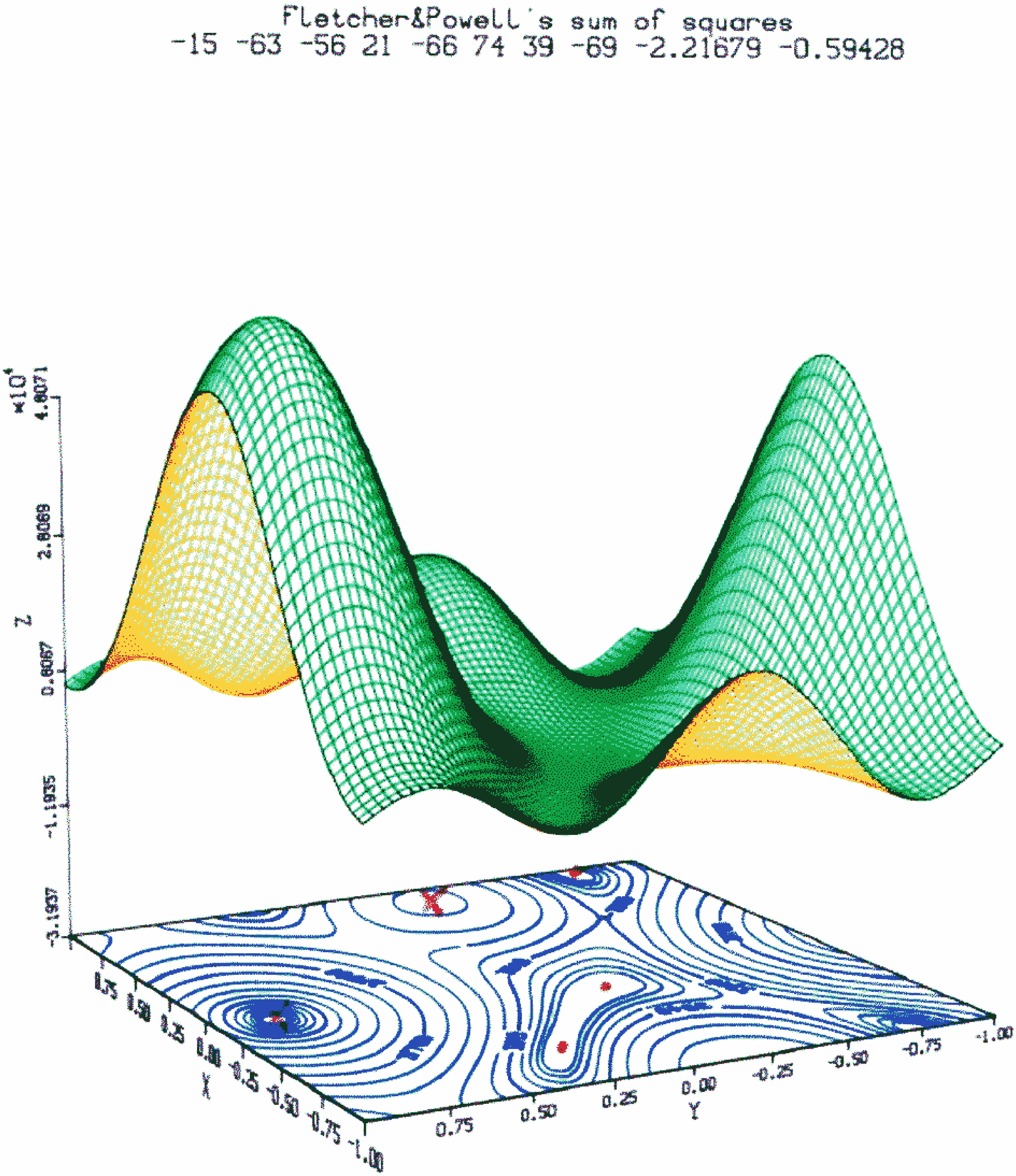
$f(a)$ kann lokal konvex oder auch konkav sein je nach den Werten für die a_i

d.h. $f(a)$ kann multimodal sein (ist es normalerweise auch)

Also : Das nichtlineare Gleichungssystem

$\nabla f(a) = 0$

liefert keine hinreichende Bedingung für das gesuchte globale KQ-Minimum



• • •   minima (up to 2^n)

x x   maxima

Dann, und nur dann, wenn

$$\hat{y}(a,x) = \sum_{j=1}^{n} a_j \underline{g_j(x)} \qquad \text{lineares Modell}$$

kann nichtlin. bzgl. x sein!

gilt:

$$\nabla \hat{y}(a,x_i) = \{g_1(x_i), g_2(x_i), \dots, g_n(x_i)\}$$

$$\nabla^2 \hat{y}(a,x_i) = 0$$

$$\nabla^2 f(a) = 2 \sum_{i=1}^{T} \sum_{j=1}^{n} (g_j(x_i))^2 I > 0$$

positive Konstante

also existiert nur ein Minimum

und $\nabla f(a) = 0$ ist notwendig und hinreichend

man erhält n simultane in a lineare Gleichungen

Bsp. $\hat{y}(a,x) = a_1 + a_2 x$

dann Lösung sofort ermittelbar

$$a_1 = \frac{\sum x_i^2 \sum y_i - \sum x_i \sum x_i y_i}{T \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2}$$

alle Summen $\sum_{i=1}^{T}$

$$a_2 = \frac{T \sum x_i y_i - \sum x_i \sum y_i}{T \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2}$$

Was ist zu tun, wenn $\hat{y}(a,x)$ nichtlinear in a ?

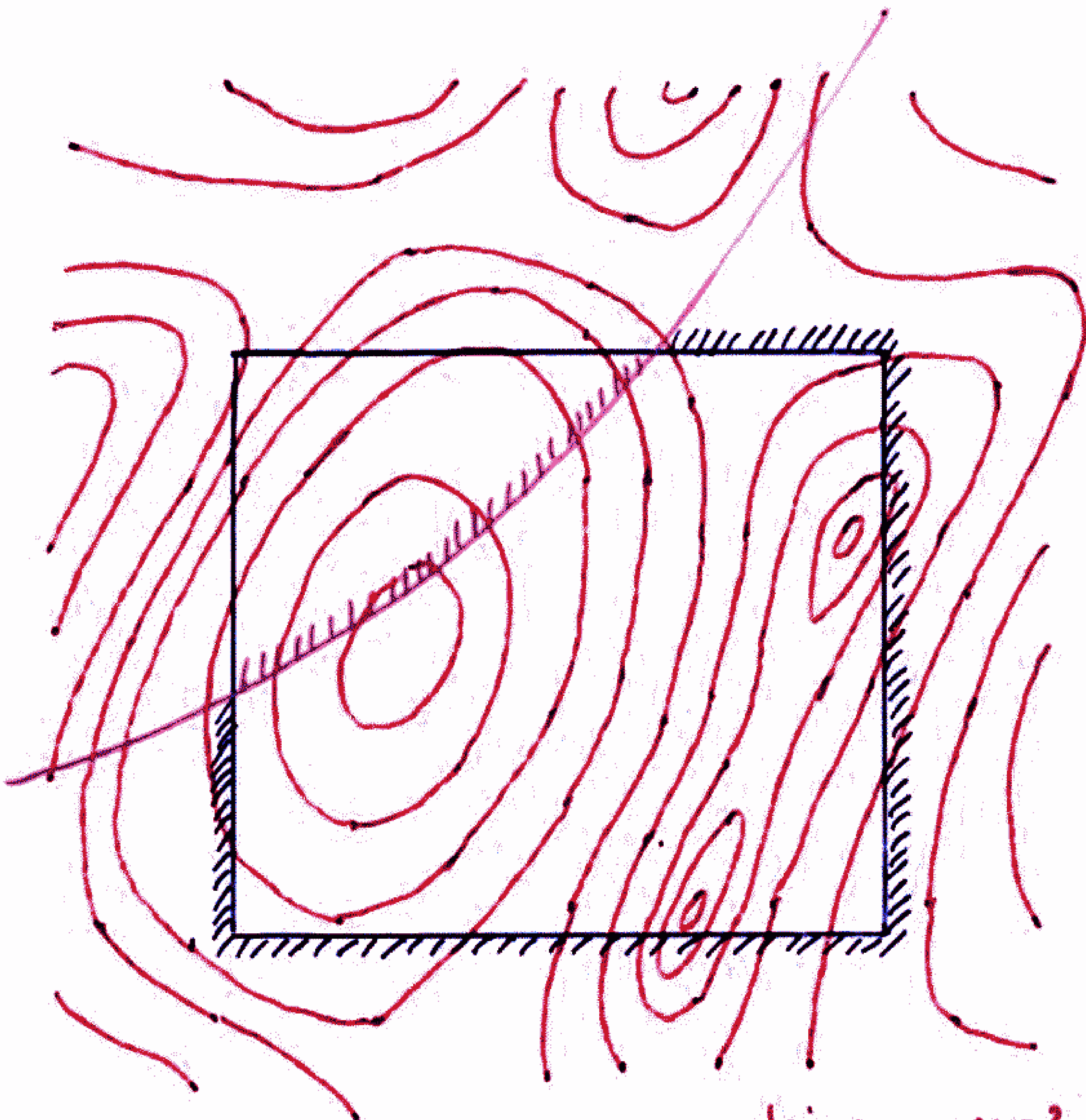
global konvergente Optimum-Suche

$f(a) \to \min$

evtl. mit zusätzlichen Nebenbed.

- einfache Schranken $\quad b_i \le a_i \le c_i$
- allgemeiner $\quad g_j(a) \ge 0$

$\forall j = 1(1)m$



hier $n=2$

Lineare Regression, Fehlerquadratsumme

Modell $y_i = a + b \cdot t_i + \varepsilon_i \qquad i = 1, 2, \dots, n$

$$S(a,b) = \sum_{(i)} (y_i - a t_i - b)^2 \rightarrow \min$$

$$\frac{\partial S}{\partial a} = \frac{\partial S}{\partial b} = 0 \quad \leadsto \quad \tilde{a}, \tilde{b}$$

$$\tilde{a} = \frac{(\Sigma t_i^2)(\Sigma y_i) - (\Sigma t_i)(\Sigma t_i y_i)}{n \Sigma t_i^2 - (\Sigma t_i)^2}$$

$$\tilde{b} = \frac{n \Sigma t_i y_i - (\Sigma t_i)(\Sigma y_i)}{n \Sigma t_i^2 - (\Sigma t_i)^2}$$

damit: empirische Regressionslinie

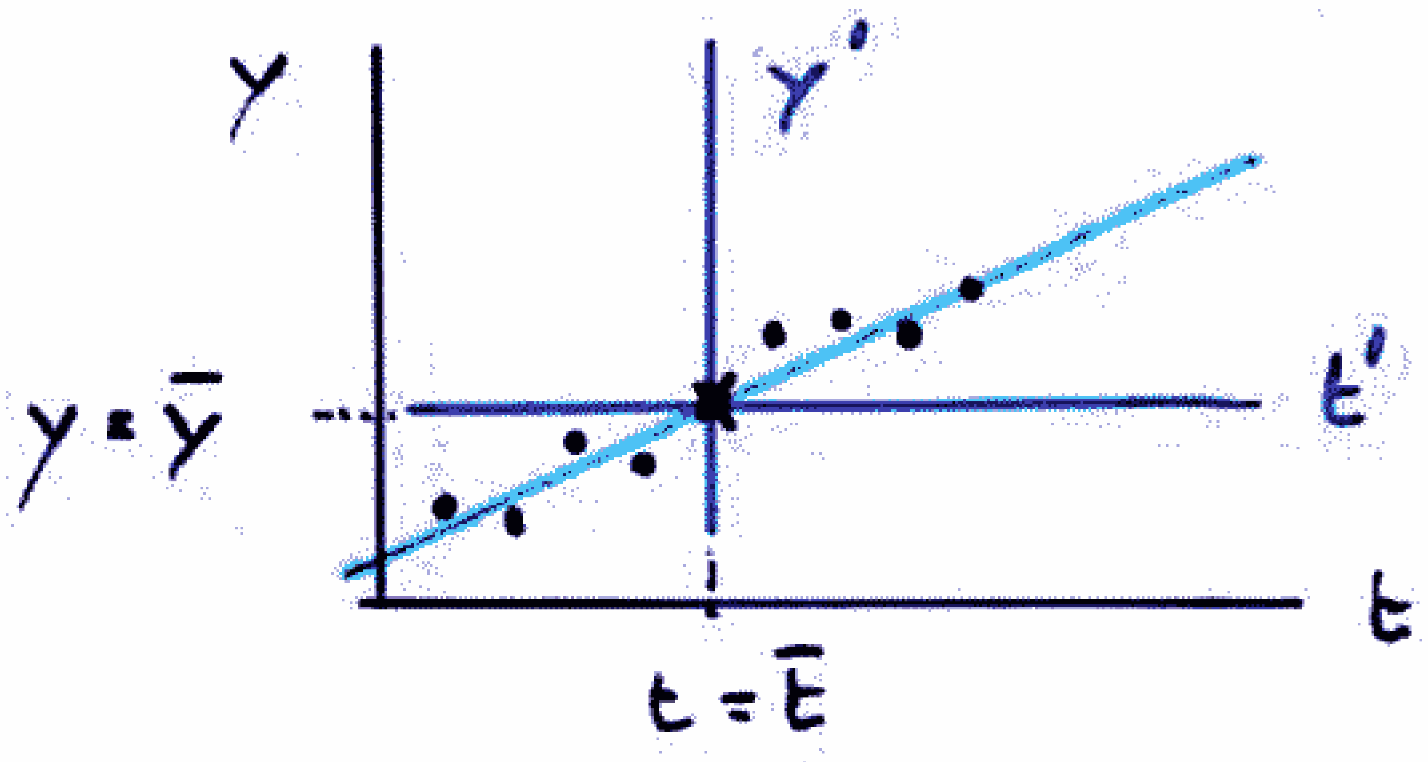
Transformation $t' = t - \bar{t}$

$y' = y - \bar{y}$

mit $\bar{t} = \frac{1}{n} \Sigma t_i \quad ; \quad \bar{y} = \frac{1}{n} \Sigma y_i$

$$\tilde{b} = (\Sigma t_i' y_i') / (\Sigma t_i'^2)$$

$$\tilde{a} = \bar{y} - \bar{t}\,\tilde{b}$$



Abweichungen vom Mittelwert

$$\sum (y_i - \bar{y})^2 = \sum y_i'^2$$

hier nicht brauchbar

Abweichungen von der Regressionsgeraden

$$\sum \tilde{\varepsilon}_i^2 = \sum (y_i - \tilde{a} - \tilde{b} t_i)^2 = \sum (y_i' - \tilde{b} t_i')^2$$
$$\leq \sum y_i'^2$$

Verhältnis:

$$\frac{\sum \tilde{\varepsilon}_i^2}{\sum y_i'^2} = r^2$$

r : „Korrelationskoeffizient der Stichprobe"

Schätzung für die Varianz σ_y^2:

$$\tilde{\sigma}_y = \sqrt{\frac{\sum \tilde{\varepsilon}_i^2}{n-2}} = \sqrt{\frac{\sum (y_i - \tilde{a} - \tilde{b} t_i)^2}{n-2}}$$

Kovarianzmatrix für $\tilde{x} = \begin{pmatrix} \tilde{a} \\ \tilde{b} \end{pmatrix}$

$$\begin{pmatrix} \sigma^2(\tilde{a}) & \mathrm{cov}(\tilde{a},\tilde{b}) \\ \mathrm{cov}(\tilde{a},\tilde{b}) & \sigma^2(\tilde{b}) \end{pmatrix} = C_{\tilde{x}} = \sigma_y^2 \begin{pmatrix} 1 - \frac{\bar{t}}{\sum t_i'^2} & -\frac{\bar{t}}{\sum t_i'^2} \\ -\frac{\bar{t}}{\sum t_i'^2} & \frac{1}{\sum t_i'^2} \end{pmatrix}$$

$\Rightarrow$ bessere Aussage über die Brauchbarkeit von $\tilde{a}$ und $\tilde{b}$

Konfidenz- / Vertrauens- intervall

1. wahre Regressionslinie $a + bt$
2. empirische Regressionslinie $\tilde{a} + \tilde{b}t$

$$E(\tilde{a}+\tilde{b}t) = E(\tilde{a}) + t\,E(\tilde{b}) = a + bt$$

↑ weil nach obigen Formeln $\tilde{a}$ und $\tilde{b}$ sog. unverzerrte Schätzungen sind

$$\sigma^2(\tilde{a}+\tilde{b}t) = \sigma^2(\tilde{a}) + t^2\sigma^2(\tilde{b}) + 2t\,\mathrm{cov}(\tilde{a},\tilde{b})$$

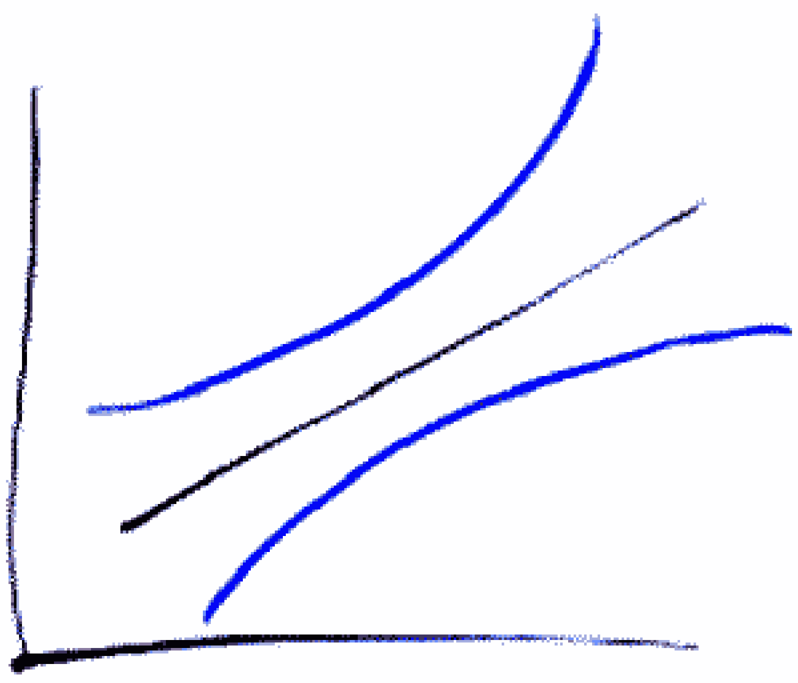
$$= \sigma_Y^2\left(\frac{1}{n} + \frac{\bar{t}}{\Sigma t_i'^2}\right)$$ unbekannt

$$\tilde{\sigma}^2(\tilde{a}+\tilde{b}t) = \tilde{\sigma}_Y^2\left(\frac{1}{n} + \frac{\bar{t}}{\Sigma t_i'^2}\right)$$

neue Variable: $$v = \frac{(\tilde{a}+\tilde{b}t) - (a+bt)}{\tilde{\sigma}(\tilde{a}+\tilde{b}t)}$$

folgt Student'scher t-Verteilung mit $n-2$ Freiheitsgraden

zum Konfidenzniveau $1-\alpha$ findet man



$$|v| \leq T_{1-\frac{1}{2}\alpha}$$

Quantil der Student'schen Verteilung (aus Tafeln)

Literatur: S. Brandt: Datenanalyse
B.I.-Wissenschaftsverlag, Mannheim, 1981, 2. Aufl

Erweiterungen:

A] nichtlineare Regressions- / Korrelations-analyse
Ausgleichsrechnung

B] multivariate Ausgleichsmodelle
multiple (lineare) Regression

zu A: $y = ax^2 + bx + c$ Modell linear bezügl. a, b, c

$y = e^{ax^2 + bx + c}$ Modell nichtlinear

$\ln y = ax^2 + bx + c$ Transformation

$$S(a,b,c) = \sum_{(k)} g_k \left[\ln y_k - (a x_k^2 + b x_k + c) \right]^2$$

allgem.: $\left[T y_k - T f(a_1 \dots a_m, x_k) \right]^2$

Taylor 1. Term $\left[\frac{\partial T}{\partial f}\Big|_{x_k} (y_k - f(\dots)) \right]^2$

↳ Gewichtsfaktoren $g_k = \dfrac{p_k}{\left(\frac{\partial T}{\partial f}\Big|_{x_k} \right)^2}$

Beispiel 1) $Tf = \ln f$

$$\frac{\partial T}{\partial f} = \frac{1}{f} \qquad q_k = f^2 p_k \quad \text{bzw.}$$

$$y_k^2 p_k$$

2) $Tf = f^r$

$$\frac{\partial T}{\partial f} = r f^{r-1} \qquad q_k = \frac{1}{r^2} y_k^{2-2r} p_k$$

elementare nichtlineare Modelle:

$f(a_1, a_2, \dots, a_m, x)$ linear bezügl. $a_1 \dots a_{m-1}$
nichtlinear " a_m

m $\frac{\partial S}{\partial a_i} \stackrel{!}{=} 0$ lassen sich $m-1$ Parameter als Funktion von a_m eliminieren und es bleibt Nullstellenproblem für eine Variable a_m zu lösen

$$\frac{\partial S}{\partial a_m}(a_1(a_m), a_2(a_m), \dots, a_{m-1}(a_m)) \stackrel{!}{=} 0$$

oder direkt

$$S(a_m) \rightarrow \min$$

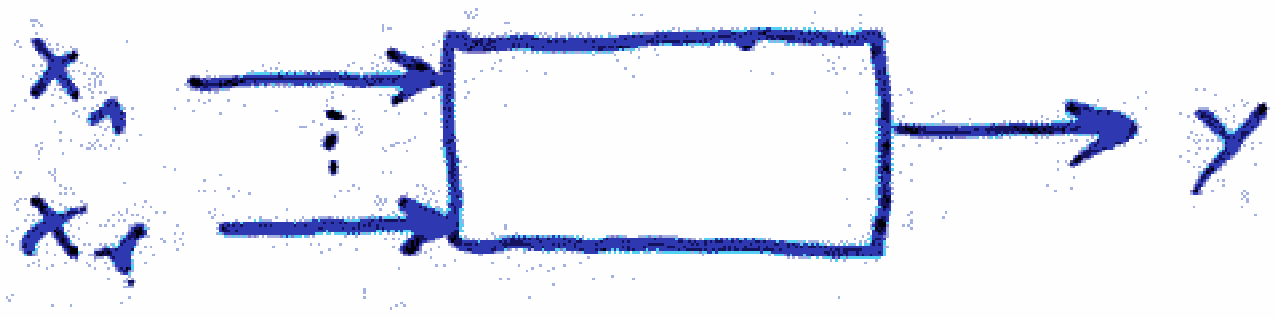
mit Optimierungsmethode

allgemeine nichtlineare Modelle

z. B. $y = \frac{a}{1 \pm \exp[c(b-x)]} + d$

Literatur: H. Späth: Algorithmen für elementare Ausgleichsmodelle, R. Oldenbourg, München, 1973

H. Späth: Algorithmen für multivariable Ausgleichsmodelle, R. Oldenbourg, München, 1974



$$y = a_1 x_1 + a_2 x_2 + \dots + a_r x_r + a_0$$

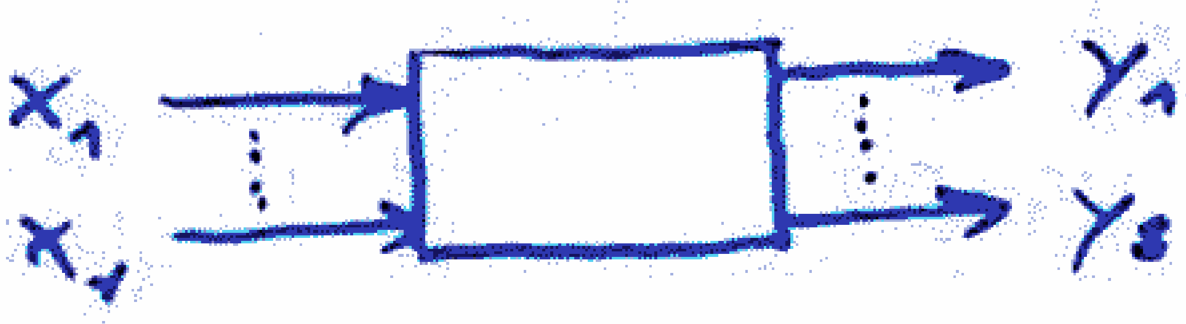
n Datensätze $\{y_k, x_{1k}, x_{2k} \dots x_{rk}\}$ $\quad n > r$

Ausgleichsprinzip: $\|Xa - y\|_2 \to \min$

eukli d. Norm

d.h.: überbestimmtes lineares Gleichungssystem

multiple (lineare) Regression:



simultane Schätzung mehrerer Gleichungen

falls Modelle nichtlinear:

allgemeines Approximationsproblem

$$\left.\begin{array}{l} L_2 \\ L_1 \\ L_\infty \\ L_p \end{array}\right\} \text{Norm}$$

Ökonometrie
Biometrie

Modell muß vorgegeben werden
angepaßt werden nur Parameter des Modells

Modell ist stets ein „Ansatz"
eine Hypothese

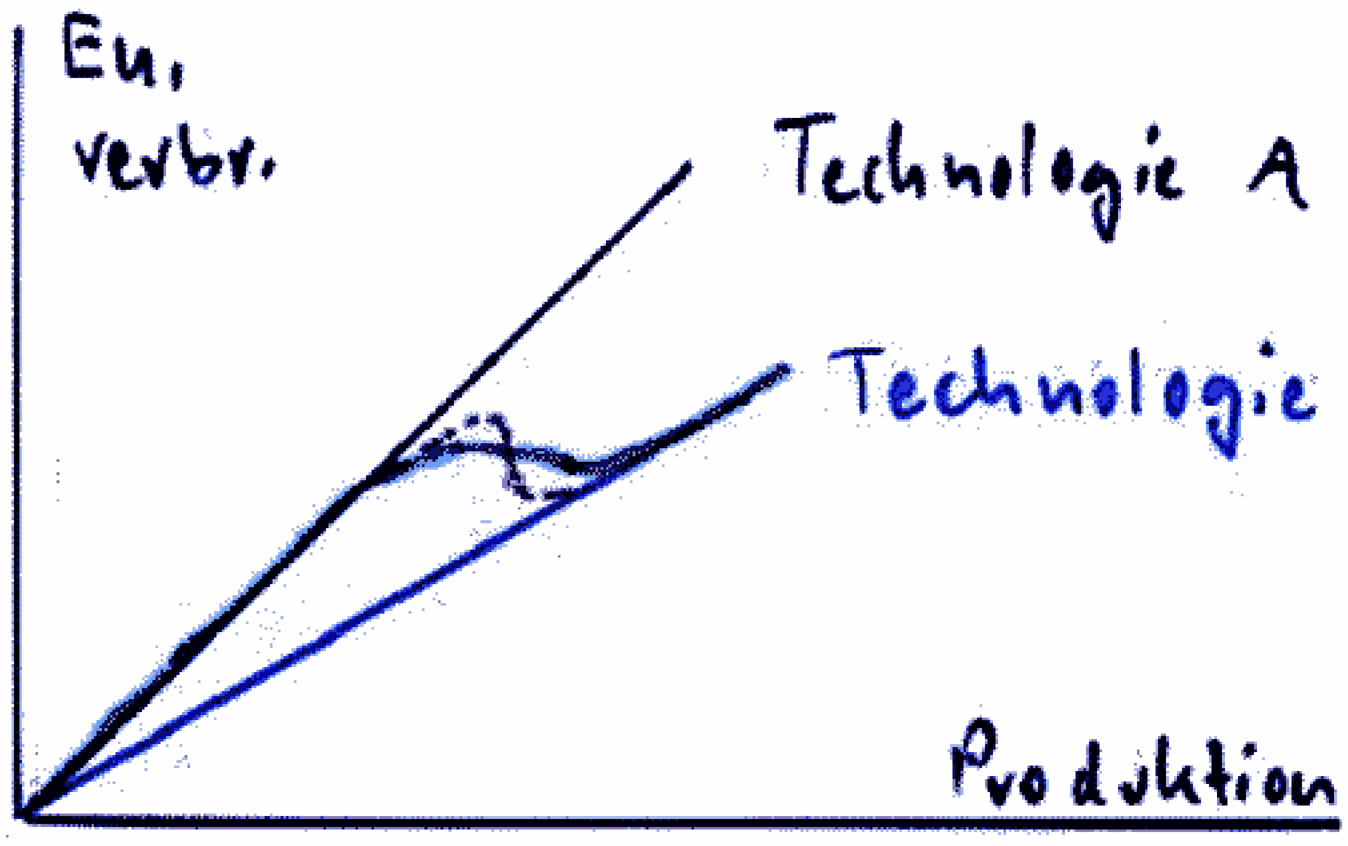
Modell ist nicht unbedingt eine Beziehung der Art

Wirkung = f(Ursache)

sondern eher eine Koinzidenzrelation

z. B. BSP(t)
Energieverbrauch(t)

z. B. Zahl der Geburten (t)
Zahl der Störche (t) } sehr „gute" Korrelation



$E = \alpha \cdot P$

$\alpha = \alpha(t)$

$\alpha = f(\text{Preis})$

$\alpha = f'(\text{Arbeitszeit})$

bisher: Datenanalyse

≙ statische Analyse „Gesetze"

jetzt: dynamische Analyse

Zeitreihenanalyse „Trends"

„Prognosen"

Modell $y = f(x, a) + v$

x erklärende Größe, unabhängige Variable
exogene Größe, Input, Ursache, Edukt

y erklärte Gr., abhängige Var.
endogene Gr., Output, Wirkung, Produkt

a Parameter

v Störung

$x, a, (y)$: Vektoren

x_k, y_k : Stichproben

$\Rightarrow \tilde{a}$ aus Schätzungen
KQ kleinste (Fehler)quadrate
ML maximum Likelihood

$y = f(x, \tilde{a})$ Struktur

damit Interpolation, Extrapolation,
Prognose

x_k, y_k : Zeitreihen, meist äquidistant
$\equiv$
t_k $\qquad t_k = t_{k-1} + \underset{\text{const.}}{\Delta t}$

$y_t = f(t, a) + v_t$

z.B. $f(t, a) = \alpha + \beta t$ $\qquad a = \begin{Bmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{Bmatrix}$
$(+ \gamma t^2 + \dots)$

Schätzverfahren liefert $\tilde{\alpha}$ und $\tilde{\beta}$

z. B. mit KQ Methode

Voraussetzungen: u normalverteilt

$\sigma(u)$ konstant, unabh. von t *

$\mathrm{cov}(u_t, u_{t'}) = 0$ für $t \neq t'$ **

* homoskedastisch

** nicht autokorreliert

$$w(u_1, u_2, \dots, u_T) = \frac{1}{(2\pi)^{T/2}\sqrt{\det V}} \exp\left(-\frac{1}{2} u' V^{-1} u\right)$$

V: Kovarianzmatrix

wenn $V = \sigma_u^2 I$

$$w(u_1, u_2, \dots, u_T) = \frac{1}{(2\pi)^{T/2}\sigma_u^T} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma_u^2} \underbrace{\sum_{i=1}^{T} u_i^2}_{\to \min}\right)$$

ML-Prinzip:

OLS

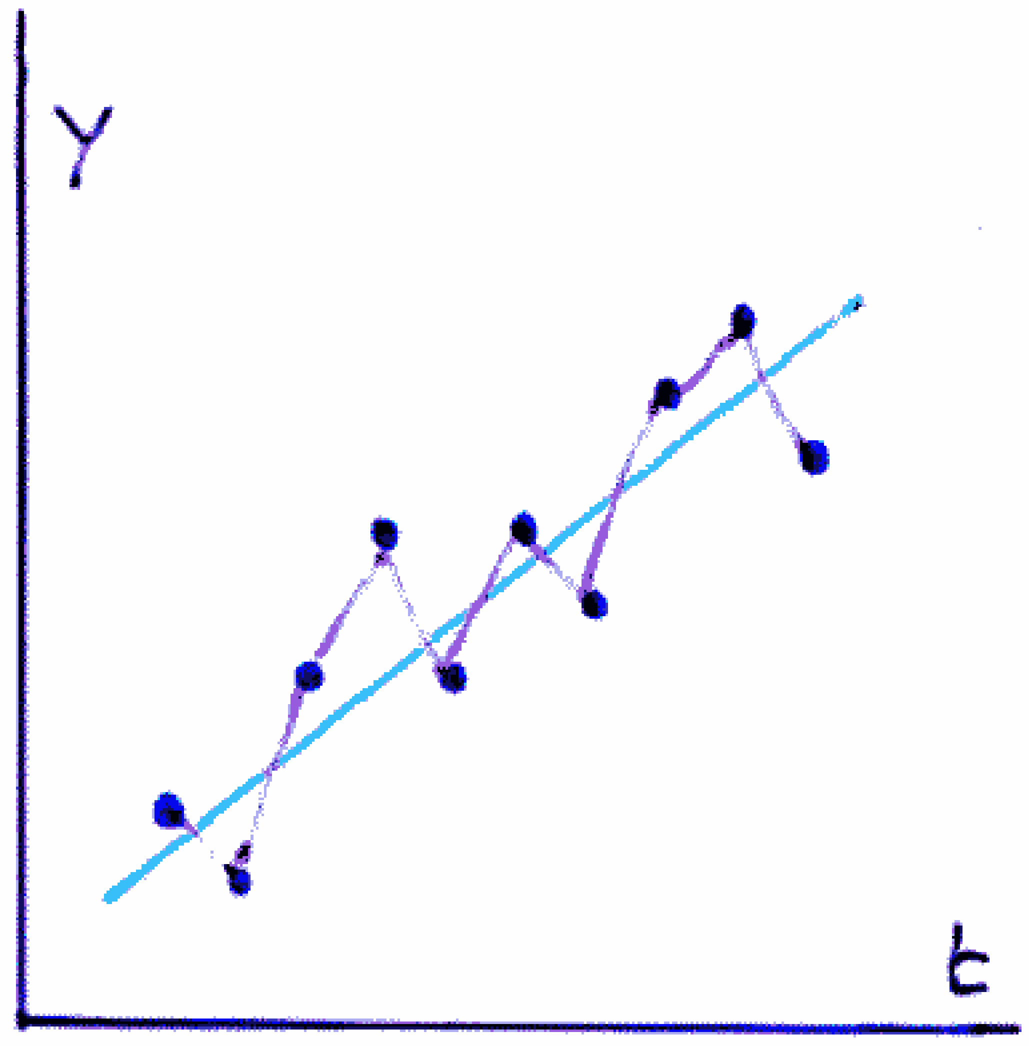
ordinary least squares

GLS generalized least squares: Aitken

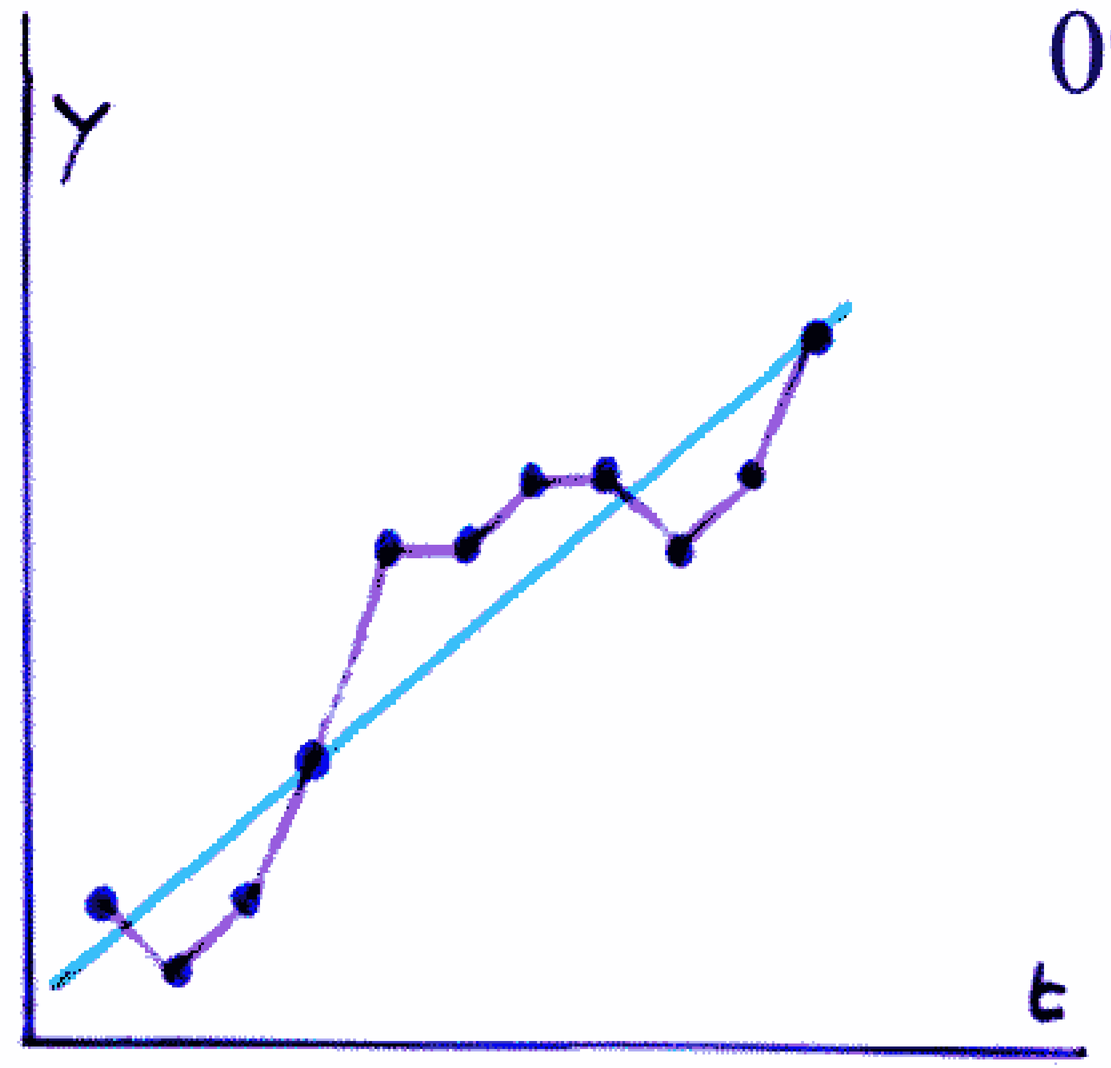
$u' V^{-1} u \to \min$ bzw.

$$\tilde{u}' V^{-1} \tilde{u} = (y - f(t,a))^T V^{-1} (y - f(t,a)) \to \min$$

2. dynamische Streudiagramme:



$\tilde{\beta}$ „stabil"
$\tilde{\sigma}_v^2$ „unverzerrt"



$\tilde{\beta}$ „stark schwankend"
$\tilde{\sigma}_v^2$ „unterschätzt"

Ansatz : $u_t = \rho u_{t-1} + \varepsilon_t$ **für Störungen**

$|\rho| < 1$ $\rho > 0$ Persistenz

$\rho < 0$ Antipersistenz

$E(\varepsilon_t) = 0$

$E(\varepsilon_t^2) = \sigma_\varepsilon^2$

$E(\varepsilon_t \varepsilon_{t'}) = 0$ für $t \neq t'$

$\sigma^2(u_t) = \rho^2 \sigma^2(u_{t-1}) + \sigma_\varepsilon^2$; $\sigma^2(u_t) = \sigma^2(u_{t-1}) = \sigma_v^2$

$\sigma_v^2 = \frac{1}{1-\rho^2} \sigma_\varepsilon^2$

$$V = \sigma_v^2 \begin{pmatrix} 1 & \rho & \rho^2 & \cdots & \rho^{T-1} \\ \rho & 1 & \cdots & & \rho^{T-2} \\ \vdots & & & & \\ \rho^{T-1} & \rho^{T-2} & & \cdots & 1 \end{pmatrix}$$

Kovarianz-matrix

Lineare autoregressive Beziehung 1. Ordnung

stochastischer Prozeß

Startwert u_{t_0}

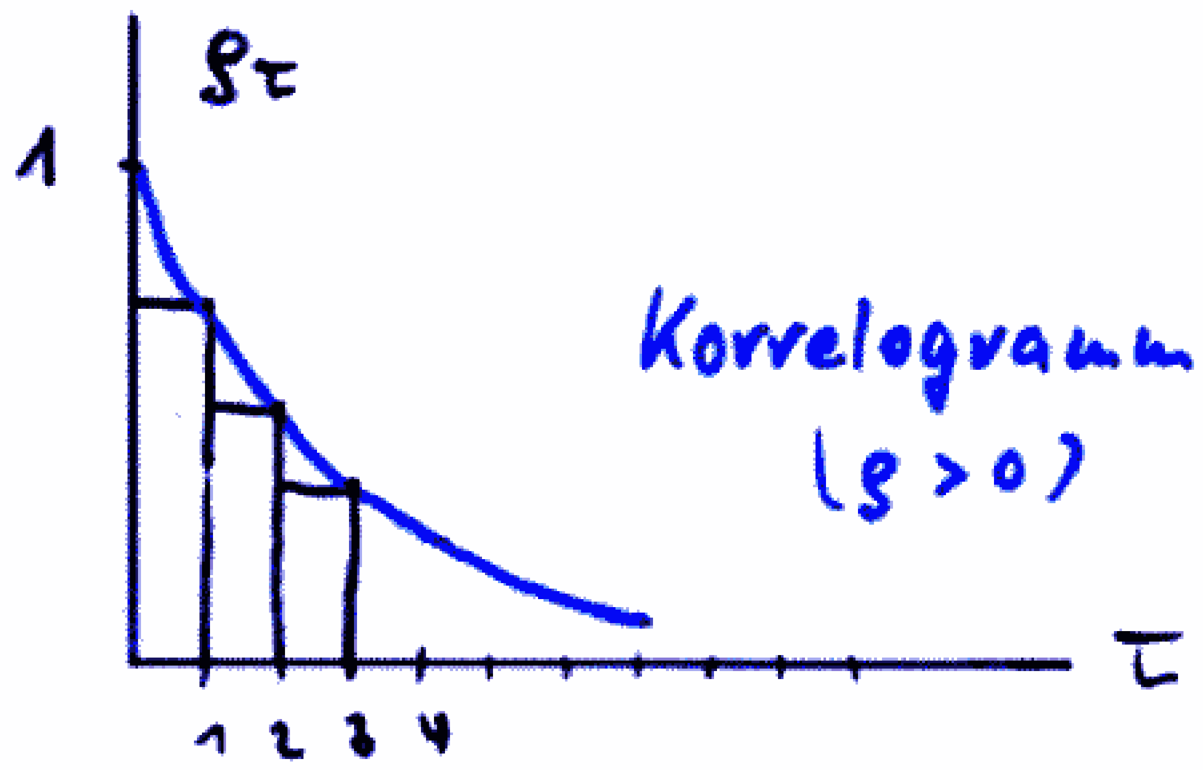
wenn $t_0 < 0$ und $|t_0| \gg 1$, d.h. $t_0 \to -\infty$,

dann ε_t unabh. von u_{t_0}

$$\operatorname{cov}(u_t, u_{t-\tau}) = \gamma_\tau = \rho\,\gamma_{\tau-1} = \rho^2 \gamma_{\tau-2} = \dots$$
$$= \rho^\tau \sigma_u^2 = \frac{\rho^\tau}{1-\rho^2}\sigma_\varepsilon^2$$

Korrelationskoeff:

$$\rho_\tau = \frac{\gamma_\tau}{\sigma_u^2} = \rho^\tau$$



da $\rho_\tau \to 0$ für $\tau \to \infty$: $\lim\limits_{T\to\infty}\left(\frac{1}{T}\sum u_t\right) = E(u) = 0$

$\leadsto \bar{u} = \frac{1}{T}\sum u_t$ unverzerrte Schätzung

---

im allg. ρ nicht bekannt

dann: zweistufiges Schätzverfahren 2SLS

1. Parameter $\tilde{a}$ mit OLS-Verfahren

   $\leadsto$ Residuen $\hat{u}_t = \rho\,\hat{u}_{t-1} + \hat{\varepsilon}_t$

2. $\tilde{\rho}$ mit OLS-Verfahren

   $\leadsto \tilde{\rho}$ einsetzen in Matrix V

3. damit: $\tilde{\tilde{a}}$ mit GLS-Verfahren

evtl. Iteration

eine statistisch-theoretische Rechtfertigung für dieses Vorgehen gibt es noch nicht

'empirisch akzeptabel'

Test auf Autokorrelation — Durbin - Watson

$$d = \frac{\sum_{t=2}^{T} (\hat{u}_t - \hat{u}_{t-1})^2}{\sum_{t=1}^{T} (\hat{u}_t)^2} \approx 2 - 2\varrho$$

ϱ	d
1	0
−1	4
0	2

<u>wenn</u> $|\varrho| \approx 1$: anderes Verfahren wählen

<u>weitere</u> Ansätze : $u_t = \varrho u_{t-1} + \delta u_{t-2} (+ \dots \quad)$

Lineare Autoregr. 2. Ordng.

Transform. $\underbrace{\Delta_\varrho y_t}$ $= y_t - \varrho y_{t-1}$

neue Variable, deren Störungen nicht autokorreliert

Heteroskedastizität

$\sigma^2(u_t) = \sigma_t^2$ nicht konstant

↷ Umskalierung $y_t^* = \frac{y_t}{\sigma_t}$ als neue Var.

wenn σ_t unbekannt : Ansatz,

z.B. $\sigma_t = s \cdot x_t$ bzw $\sigma_t = s \cdot t$

oder $\sigma_t = p \cdot \bar{y}_t$ prop. Regressionswert

hierzu spezielle Tests
(grob z.B. graphische Auftragung des Streudiagramms)

↑ fein deskriptive Dyn.

3. dynamische Systemmodelle

rerum cognoscere causas

Kausalmodelle — Ursache → Wirkung

nicht-instantane Reaktion

math. Formulierung : ebenfalls Gleichungen !

zeitkontinuierlich — Differentialgleichungen — Analog-Rechner

zeit diskret — Differenzengleichungen — Digital-Rechner

klassisches Beispiel : Newton's Bewegungsgesetz
1643–1727

Kraft = Masse × Beschleunigung

$K = m \cdot b$ — lex prima

(Spezialfall $K = m \cdot g$)

,Naturgesetz'

erlaubt Prognose!

$b = \dot{v} = \ddot{x}$ $\qquad \dot{v} = \frac{dv}{dt} \qquad \dot{x} = \frac{dx}{dt} \qquad \ddot{x} = \frac{d^2x}{dt^2}$

$\left.\begin{array}{l}\text{Startbedingungen}\\ \text{Gesetz}\end{array}\right\} \rightarrow$ zukünftiges Verhalten

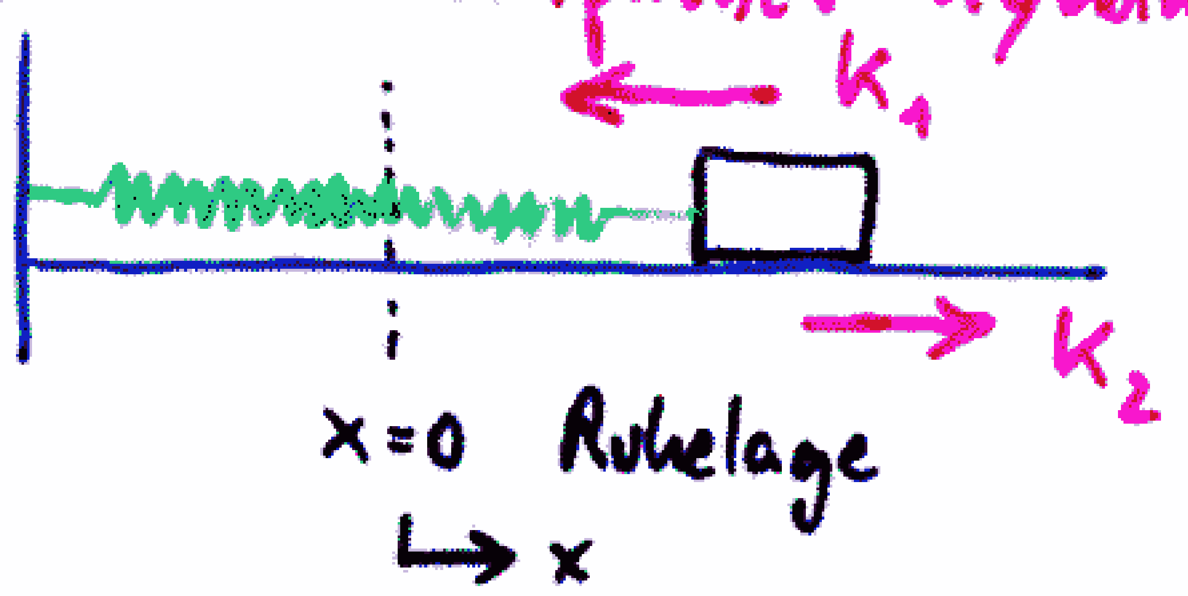
$x(t) = f(x_0, m, K, t)$ durch zweimalige Integration

für Rakete noch benötigt: lex secunda

Kraft durch Impulsänderung $K_J = \frac{d}{dt}(m \cdot w)$

Kräftegleichgewicht (vektoriell) $\underbrace{A}_{\text{Auftrieb}} + \underbrace{W}_{\text{Widerst.}} + \underbrace{G}_{\text{Schwere}} + \underbrace{K_B}_{\text{Beschl.}} + \underbrace{K_J}_{\text{Impuls-änd.}} = 0$

3.1 ein einfaches dynamisches Systemmodell



Masse-Feder-System
(Ebene)

K_1 Rückstellkraft
K_2 Reibungskraft

ohne Reibung :
ideale Feder

$$K_1 = -k_1 x$$

Reibung

a) viskose R. (in Flüss.) $\quad K_2 = -k_2 \dot{x}$

b) turbulente R. (in Luft) $\quad K_2 = -\bar{k}_2 \dot{x}^2$

c) Bodenreibung

Haft $\quad K_2 = -K_1 \quad$ für $\quad \dot{x} = 0$

Gleit $\quad K_2 = -\bar{\bar{k}}_2 \,\mathrm{sign}\, \dot{x} \quad\quad \dot{x} \neq 0$

resultierende Bewegung: (Fall a)

$$m\ddot{x} = -k_1 x - k_2 \dot{x}$$

$$\ddot{x} + \frac{k_2}{m}\dot{x} + \frac{k_1}{m}x = 0$$

$$\ddot{x} + \gamma \dot{x} + \omega^2 x = 0$$

Normalform (3.1)

senkrechte Aufhängung

$$m\ddot{y} = -k_1 y - k_2 \dot{y} - mg$$

$$\ddot{y} + \gamma \dot{y} + \omega^2 y = -g$$

mit $z = y + \frac{g}{\omega^2}$

$$\ddot{z} + \gamma \dot{z} + \omega^2 z = 0$$

(3.2)

Ruhelage $\quad z = 0$

$$y_0 = -\frac{g}{\omega^2}$$

Allgemeine Lösung von (3.2) $\ddot{z} + \gamma \dot{z} + \omega^2 z = 0$

$$z(t) = c_1 e^{\lambda_1 t} + c_2 e^{\lambda_2 t}$$

mit $\lambda_{1,2}$ aus $\lambda^2 + \gamma\lambda + \omega^2 = 0$

c_1, c_2 aus Anfangsbedingungen

$$\lambda_{1,2} = -\frac{\gamma}{2} \pm \sqrt{\frac{\gamma^2}{4} - \omega^2}$$

Fall A : $\frac{\gamma^2}{4} < \omega^2$ geringe Dämpfung

$\lambda_{1,2}$ komplex

$$z(t) = e^{-\sigma t} (c_1 \cos qt + c_2 \sin qt)$$

mit $\sigma = \gamma/2$; $q = \sqrt{\omega^2 - \sigma^2}$

Fall AA : $\gamma = 0$ kein Widerstand

$$z(t) = c_1 \cos \omega t + c_2 \sin \omega t$$

mit $z(t=0) = z_0$

und $\dot{z}(t=0) = 0$ folgt

$z(t) = z_0 \cos \omega t$ harmonischer Oszillator

Periode T aus $\omega T = 2\pi \rightarrow T = 2\pi/\omega$

Amplitude $A = z_0$

Fall AB : $\gamma > 0$ dann $z(t \to \infty) \to 0$

Schwingungen klingen ab

keine periodische Bewegung

Fall B $\quad \gamma^2/4 > \omega^2 \qquad \lambda_{1,2}$ reell
keine Schwingungen

asymptotischer Rückgang der Auslenkung

Fall C: Aufhängung mit periodischem Antrieb

$$\ddot{z} + \gamma\dot{z} + \omega^2 z = B \sin \omega_0 t$$

das ist Spezialfall von

$$\ddot{z} + \gamma\dot{z} + \omega^2 z = g(t) \qquad (3.3)$$

3.2 stabiles Gleichgewicht I

Gleichung 3.3 gewöhnl. Dgl. zweiter Ordnung

Andere Schreibweise: 2 gekoppelte Dgl. 1. Ordnung

wir führen ein: $\quad x_1 = z$
$\quad x_2 = \dot{z} \qquad$ und erhalten

$$\left.\begin{aligned} \dot{x}_1 &= x_2 \\ \dot{x}_2 &= -\omega^2 x_1 - \gamma x_2 + g(t) \end{aligned}\right\} \quad \dot{x} = Ax + b \qquad \begin{matrix}(3.4)\\(3.5)\end{matrix}$$

in Vektorform

$$x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}; \quad \dot{x} = \begin{pmatrix} \dot{x}_1 \\ \dot{x}_2 \end{pmatrix}; \quad b = \begin{pmatrix} 0 \\ g(t) \end{pmatrix}; \quad A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -\omega^2 & -\gamma \end{pmatrix}$$

allgemeiner

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= f_1(x_1, x_2) \\ \dot{x}_2 &= f_2(x_1, x_2) \end{aligned} \qquad x \in \mathbb{R}^2$$

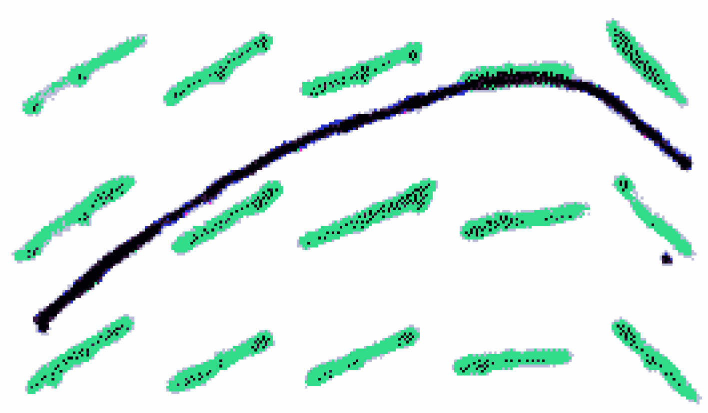
$$\dot{x} = f(x) \quad \text{mit } f(x) = \begin{pmatrix} f_1(x) \\ f_2(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1(x_1, x_2) \\ f_2(x_1, x_2) \end{pmatrix} \qquad (3.6)$$

$$\dot{x} = f(x) \qquad \text{mit} \qquad x = x(t) \tag{3.6}$$

$x(t)$ Zustand des dyn. Systems zur Zeit t

$f_i(x)$ seien glatte Funktionen in $U \subseteq R^2$ (offen)
definieren Vektorfeld auf U (Zustandsraum)

Lösung von (3.6) ist glatte Kurve in der Ebene, deren Tangente in x durch $f(x)$ gegeben ist (Trajektorie, Orbit)



Orbit, entlang dem $\dot{x} = 0$ gilt : Fixpunkt der Bewegung (Gleichgewichts-Zustand)

beim Modell mit Reibung : Ruhelage, keine Bewegung

(wegen $x = \begin{pmatrix} z \\ \dot{z} \end{pmatrix}$ $\dot{x} = \begin{pmatrix} \dot{z} \\ \ddot{z} \end{pmatrix} = 0$ $\curvearrowright$ Beschleunigg 0
Geschwind. 0

Ruhelage beim senkrechten Feder-Masse System :

$$\bar{x} = \begin{pmatrix} -g/\omega^2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

jetzt Frage nach Stabilität der Gleichgewichts

kehrt System nach Störung von sich aus zurück oder entfernt es sich vom Gleichgewicht ?