Woche 13

Freitag, 2. Juni 2023 09:38

Nicht-lineare Ausgleichsrechnung

Setup:

$$F(x) = \begin{pmatrix} \overset{\text{Messwert}}{y_1} - \overset{\text{Modellfunktion}}{f_x}(\underset{\text{Messpunkte}}{t_1}) \\ \vdots \\ y_n - f_x(t_n) \end{pmatrix}$$

x: Parametervektor

F: Residuenvektor

Finde $x \in \mathbb{R}^n$: $\|F(x)\|_2$ minimal

Idee: Analysiswissen über lokale Minima anwenden

Betrachte $\Phi : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}_{\geq 0}$

$$\Phi(x) = \frac{1}{2}\|F(x)\|_2^2 = \frac{1}{2} F(x)^T F(x)$$

Dann gilt: Φ minimal $\Rightarrow \underbrace{D\Phi(a^*)}_{= \operatorname{grad}(\Phi(a^*))} = 0$

Wir können also a^* bestimmen, indem wir die Nullstelle von $\operatorname{grad}\Phi$ finden

Wieso betrachten wir Φ?

$$\underset{x \in \mathbb{R}^n}{\operatorname{argmin}} \|F(x)\|_2^2 \Leftrightarrow \underset{x \in \mathbb{R}^n}{\operatorname{argmin}} \frac{1}{2}\|F(x)\|_2^2$$

$\Rightarrow \frac{1}{2}$ und $\cdot^2$ bringen mathematische Vereinfachung

Newton-Verfahren für a^*:

$$x_{k+1} = x_k - (D \operatorname{grad}\Phi(x_k))^{-1} \operatorname{grad}\Phi(x_k)$$

Dann $x_k \xrightarrow{k \to \infty} a^*$

Aber $D\operatorname{grad}\Phi = H_\Phi(x)$, also sind die Berechnungen sehr mühsam, weswegen man normalerweise nicht dieses Verfahren benutzt

Idee: Löse ein einfacheres lstsq. Problem:

$$F(x) \overset{\text{Taylor}}{\approx} F(x_0) + DF(x_0)\underbrace{(x - x_0)}_{= s}$$

Dann: $\|F(x)\|_2 \approx \|\underbrace{F(x_0)}_{=: -b} + \underbrace{DF(x_0)}_{=: A} s\|_2$

womit wir das Problem auf ein lineares Ausgleichsproblem reduziert haben

$$\|As - b\|_2 \qquad s = x - x_0$$

Somit: $\underset{x}{\operatorname{argmin}} \|F(x)\|_2 \approx x_0 + \underset{s}{\operatorname{argmin}} \|As - b\|_2$

Gauss-Newton-Methode: (iteratives Verfahren um Genauigkeit zu erhöhen)

x_0 : Startwert

$$s^* = \underset{s}{\operatorname{argmin}} \|DF(x_k)s - (-F(x_k))\|_2$$

$$x_{k+1} = x_k + s^*$$

Trick:

$$f_a(t) = C \cdot e^{\alpha t_i} \overset{!}{\approx} y_i \qquad \{y_i, t_i\}_{i=1}^{m}$$

Lineare oder nicht-lineare Ausgleichsrechnung?

$$\log(y_i) \overset{!}{\approx} \log(Ce^{\alpha t})$$
$$= \log(C) + \log(e^{\alpha t})$$
$$= \log(C) + \alpha t$$

↳ lineare Ausgleichsrechnung

$$\underbrace{\begin{pmatrix} \log(y_1) \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix}}_{=:b} \overset{!}{\approx} \underbrace{\begin{pmatrix} t_1 & 1 \\ \vdots & \vdots \\ t_m & 1 \end{pmatrix}}_{=:A} \cdot \underbrace{\begin{pmatrix} \alpha \\ \log(C) \end{pmatrix}}_{=:a}$$

Example: Michaelis-Menton model for reaction speed (y) versus concentration (x)

$$f(x;\beta) = \frac{\beta_1 x}{\beta_2 + x} \; ; \; E(y_i) = f(x_i;\beta)$$

$$\rightsquigarrow \frac{1}{E(y)} = \frac{\beta_2 + x}{\beta_1 x} = \underbrace{\frac{1}{\beta_1}}_{=:\tilde{\beta}_1} + \underbrace{\frac{\beta_2}{\beta_1}}_{=:\tilde{\beta}_2} \cdot \underbrace{\frac{1}{x}}_{=:\tilde{x}}$$ suggests transformation

of data: $y \longmapsto \frac{1}{y}$ (approx. linearalize problem)

$x \longmapsto \frac{1}{x}$