geg.: **Messwerte** $\mathbf{y} = (y_1, \ldots, y_N)^T$ an Stellen $\mathbf{x} = (x_1, \ldots, x_N)^T$

Modell:

$$f : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}, \qquad (z, \boldsymbol{\alpha}) \mapsto f(z, \boldsymbol{\alpha})$$

mit **Modellparametern** $\boldsymbol{\alpha} := (\alpha_1, \ldots, \alpha_m)^T$

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\alpha}) &:= (f(x_1, \boldsymbol{\alpha}), \ldots, f(x_N, \boldsymbol{\alpha}))^T \in \mathbb{R}^N \\ f_{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\alpha}) &:= (f_{\alpha_1}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\alpha}), \ldots, f_{\alpha_m}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\alpha})) \in \mathbb{R}^{N \times m} \end{aligned}$$

Methode der kleinsten Fehlerquadrate (least squares):

Parameter $\boldsymbol{\alpha}$ so wählen, dass die Fehlerquadratsumme

$$\sum_{i=1}^{N} (f(x_i, \boldsymbol{\alpha}) - y_i)^2 = \| f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\alpha}) - \mathbf{y} \|_2^2$$

minimal wird.

Modellfunktion f ist **linear** in $\boldsymbol{\alpha}$, d.h.

$$f(\mathbf{x},\boldsymbol{\alpha}) = A\boldsymbol{\alpha} + \boldsymbol{\mu}, \quad f_{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{x},\boldsymbol{\alpha}) = A$$

$$\rightsquigarrow \quad \min_{\boldsymbol{\alpha}} \|f(\mathbf{x},\boldsymbol{\alpha}) - \mathbf{y}\|_2^2 = \min_{\boldsymbol{\alpha}} \|A\boldsymbol{\alpha} - (\mathbf{y} - \boldsymbol{\mu})\|_2^2$$

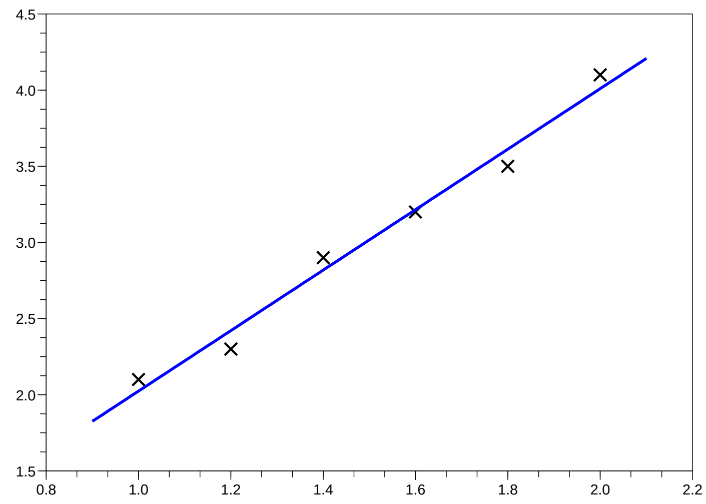
Modell: *Ausgleichsgerade*

$$f(z,\boldsymbol{\alpha}) = \alpha_1 \cdot 1 + \alpha_2 \cdot z$$

hier:

$$A \equiv A(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} 1 & x_1 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_N \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2)^T, \ \boldsymbol{\mu} = (0,\ldots,0)^T \in \mathbb{R}^N$$



Methode funktioniert gut, wenn Messfehler alle von gleicher Größenordnung sind!

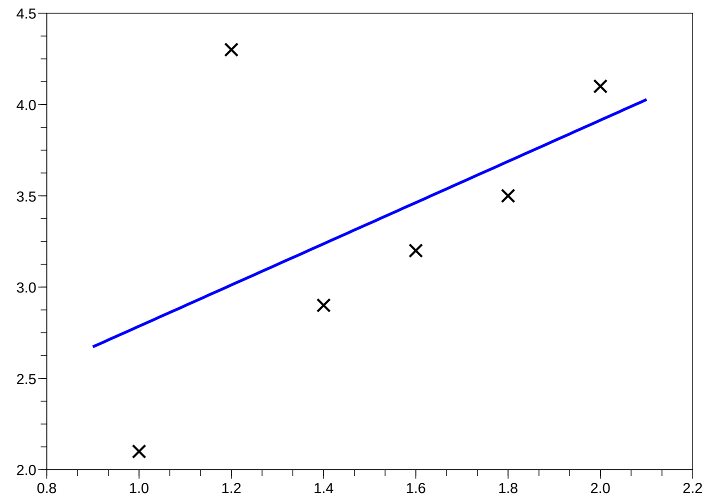
- Problem bei Ausreißern

→ **Strategie**:

gewichtete Fehlerquadrat-summe:

$$R(\boldsymbol{\alpha}) := \sum_{i=1}^{N} w_i^2 \left(f(x_i,\boldsymbol{\alpha}) - y_i\right)^2$$

mit Gewichten $w_i > 0$



$$\rightsquigarrow \qquad \min_{\boldsymbol{\alpha}} R(\boldsymbol{\alpha}) = \min_{\boldsymbol{\alpha}} \|W f(\mathbf{x},\boldsymbol{\alpha}) - W\mathbf{y}\|_2^2$$

wobei $W := \mathrm{diag}(\mathbf{w})$ und $\mathbf{w} := (w_1, \ldots, w_N)^T$

- Wahl des Modells und der Gewichte?

Gewichtetes lineares AGP in Matrix–Vektor–Notation:

$$\min_{\boldsymbol{\alpha}} \| W f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\alpha}) - W \mathbf{y} \|_2^2 = \min_{\boldsymbol{\alpha}} \| W A \boldsymbol{\alpha} - W (\mathbf{y} - \boldsymbol{\mu}) \|_2^2$$

mit

$$\mathbf{A} = (\varphi_1(\mathbf{x}), \ldots, \varphi_m(\mathbf{x})), \quad \varphi_k(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \varphi_k(x_1) \\ \vdots \\ \varphi_k(x_N) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_N \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{W} = \mathrm{diag}(w_1, \ldots, w_N) = \begin{pmatrix} w_1 & \ldots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \ldots & w_N \end{pmatrix}$$

Lösung: QR-Zerlegung (oder Normalengleichung)

Lösung in SciLab: `alpha = (W*A) \ (W*(y-mu))`

Modellfunktion f ist **nicht–linear** in $\boldsymbol{\alpha}$

→ **Strategie**: **Linearisierung** durch Taylorentwicklung

$$\begin{array}{rcccccl} f(\mathbf{x},\boldsymbol{\alpha}) & \approx & f(\mathbf{x},\bar{\boldsymbol{\alpha}}) & + & f_{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{x},\bar{\boldsymbol{\alpha}}) & \cdot\Delta\boldsymbol{\alpha}, & \qquad \boldsymbol{\alpha} = \bar{\boldsymbol{\alpha}} + \Delta\boldsymbol{\alpha} \\ & =: & \boldsymbol{\mu} & + & A & \cdot\Delta\boldsymbol{\alpha} & \end{array}$$

$$\begin{aligned} R(\boldsymbol{\alpha}) &= \|Wf(\mathbf{x},\boldsymbol{\alpha}) - W\mathbf{y}\|_2^2 \\ &\approx \|WA\Delta\boldsymbol{\alpha} - W(\mathbf{y}-\boldsymbol{\mu})\|_2^2 =: \bar{R}(\Delta\boldsymbol{\alpha}) \end{aligned}$$

Methode:

wähle geeigneten Startwert für $\bar{\boldsymbol{\alpha}}$

(1) löse lineares AGP $\min_{\Delta\boldsymbol{\alpha}} \bar{R}(\Delta\boldsymbol{\alpha})$

(2) setze $\bar{\boldsymbol{\alpha}} \leftarrow \bar{\boldsymbol{\alpha}} + \Delta\boldsymbol{\alpha}$ und **aktualisiere** A **und** $\boldsymbol{\mu}$

wiederhole (1)&(2) bis $\|\Delta\boldsymbol{\alpha}\|_2 \leq \tau$ oder iter $= 100$

Modell:

$$f(z,\boldsymbol{\alpha}) = \alpha_1 e^{\alpha_2 z} \cos(2\pi z), \quad \boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2)^T$$

offensichtlich ist f **nicht–linear** in $\boldsymbol{\alpha}$ $\rightsquigarrow$ **Linearisierung**

$$\begin{aligned}
f_{\boldsymbol{\alpha}}(\mathbf{x},\boldsymbol{\alpha}) &= \left(f_{\alpha_1}(\mathbf{x},\boldsymbol{\alpha}) \quad f_{\alpha_2}(\mathbf{x},\boldsymbol{\alpha})\right) \\
&= \begin{pmatrix} e^{\alpha_2 x_1}\cos(2\pi x_1) & \alpha_1 x_1 e^{\alpha_2 x_1}\cos(2\pi x_1) \\ \vdots & \vdots \\ e^{\alpha_2 x_N}\cos(2\pi x_N) & \alpha_1 x_N e^{\alpha_2 x_N}\cos(2\pi x_N) \end{pmatrix} \\
&= \left(e^{\alpha_2 \mathbf{x}} .* \cos(2\pi\mathbf{x}) \quad \alpha_1 \mathbf{x} .* e^{\alpha_2 \mathbf{x}} .* \cos(2\pi\mathbf{x})\right)
\end{aligned}$$