Computerphysik WS 2015/2016

Prof. Dr. Roland Netz, FU Berlin

Übungsblatt 7: Nichtlineare Ausgleichsrechnung

Julian Kappler, Alexander Schlaich
26. November 2015

Allgemeine Hinweise

Abgabetermin für die Lösungen ist

- **Sonntag, 06.12., 24:00 Uhr.**

Aufgabe 7: Radioaktiver Zerfall eines Isotopengemisches (20 Punkte)

Eine Methode zur Charakterisierung von Gesteinsproben ist die Radiometrie. Dabei wird der natürlich vorkommende Anteil von Radionukliden und der ihrer Zerfallsprodukte gemessen. Da die Halbwertszeiten der radioaktiven Elemente bekannt sind, kann daraus das Alter einer Probe berechnet werden. Bei der sogenannten Uran-Blei-Datierung[1] verwendet man den Zerfall der Uran-Isotope zu Blei, wobei die 4,5 Milliarden Jahre (^{238}U $\rightarrow$ ^{206}Pb) bzw. 704 Millionen Jahre (^{235}U $\rightarrow$ ^{207}Pb) betragen.

7.1 Erzeugen des Datensatzes (3 Punkte)

Wir generieren nun im Folgenden einen Datensatz, welcher die Gesamtmenge an Uran als Funktion der Zeit beschreibt. Um statistische Schwankungen zu berücksichtigen addieren wir zu jedem Datenpunkt eine normalverteilte Zufallszahl.

Im Folgenden verwenden wir als Zeitskala immer Milliarden Jahre (10^9 Jahre).

- 7.1.1 (2 Punkte): Erzeugen Sie einen Datensatz (T, N), wobei T ein `np.array` der Zeit von 0 bis 10 in Schritten von 0.05 sein sollte. Im `np.array` N ist das zur jeweiligen Zeit noch vorhande Uran gespeichert, das mithilfe der Formel

$$N(t) = N_{238}(t=0)2^{-t/\tau_{238}} + N_{235}(t=0)2^{-t/\tau_{235}} + R(t), \tag{1}$$

  wobei τ_{235} bzw. τ_{238} die jeweiligen Halbwertszeiten sind, berechnet werden soll.

  Hinweis: Eine normalverteilte Zufallszahl $R(t)$ für jeden Datenpunkt können Sie mittels `np.random.normal` erzeugen. Dabei sollten Sie als Erwartungswert 0 und als Standardabweichung 10^{-3} verwenden. Für die Anfangswerte nehmen wir an, dass wir eine Gesteinsprobe mit Isotopenanteilen $N_{238}(t=0) = 0.1$ und $N_{235}(t=0) = 0.9$ gefunden haben, $t = 0$ bezeichnet die Gegenwart.

- 7.1.2 (1 Punkt): Plotten Sie den resultierenden Datensatz (T,N) sowohl in einem linearen als auch in einem halblogarithmischen log-über-linear Graphen.

[1] `https://de.wikipedia.org/wiki/Uran-Blei-Datierung`

In den folgenden Aufgaben sollen nun die Parameter (N_{238},τ_{238},N_{235},τ_{235}) wieder aus dem eben erzeugten Datensatz extrahiert werden.

7.2 Lineare Ausgleichsrechnung (4 Punkte)

Im halblogarithmischen Graph sollten Sie in unterschiedlichen Zeitbereichen zwei Geraden ausmachen können, die jeweils der Dominanz eines der Summanden in Gleichung (1) geschuldet sind.

- 7.2.1 (3 Punkte): Lösen Sie das lineare Ausgleichsproblem für

$$y = a_0 + a_1 t \tag{2}$$

  mit Teilen des Datensatzes $(T, \log(N))$: Wählen Sie dazu nach Augenmaß die zwei Bereiche, in denen der Datensatz sich näherungsweise wie eine Gerade verhält. Verwenden Sie für jeden der Bereiche eine Funktion wie auf Blatt 6, welche das Normalengleichungssystem

$$\mathbf{A}^T\mathbf{A}\mathbf{a} = \mathbf{A}^T\mathbf{y} \tag{3}$$

  löst.

- 7.2.2 (1 Punkt): Stellen Sie Ihre Fitresultate sowie (T,N) in einem gemeinsamen halblogarithmischen Plot dar. Welche Halbwertszeiten erhalten Sie aus den zwei Fits?

7.3 Nichtlineares Ausgleichsproblem (11 Punkte)

Für Ansatzfunktionen $f(a_1,...,a_m,x)$, die nicht-linear in den Parametern a_i sind, lässt sich eine Ausgleichsrechnung für n Wertepaare (x_i, y_i), $i = 1, ..., n$, nach dem Gauß-Newton-Verfahren durchführen. Hierbei sollen die a_i so bestimmt werden, dass das Fehlerfunktional $E\left(\mathbf{a}\right) = \left\|\boldsymbol{g}\left(\mathbf{a}\right)\right\|_2^2$ mit

$$g_i \equiv y_i - f\left(a_1,...,a_m,x_i\right) \tag{4}$$

minimal wird. Man geht dazu iterativ vor: Von einem Startpunkt $\boldsymbol{a}^{(0)}$ ausgehend wird jeweils der nächste Wert $\boldsymbol{a}^{(k+1)}$ aus dem Vorherigen durch $\mathbf{a}^{(k+1)} = \mathbf{a}^{(k)} + \boldsymbol{\delta}^{(k)}$ berechnet, wobei $\boldsymbol{\delta}^{(k)}$ durch

$$\min \left\| \boldsymbol{g}\left(\mathbf{a}^{(k)}\right) - J\left(\mathbf{a}^{(k)}\right)\boldsymbol{\delta}^{(k)} \right\|_2^2 \tag{5}$$

mit der Jacobi-Matrix

$$J(\boldsymbol{a}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f(x_1)}{\partial a_1} & \dots & \frac{\partial f(x_1)}{\partial a_m} \\ . & \dots & . \\ \frac{\partial f(x_n)}{\partial a_1} & \dots & \frac{\partial f(x_n)}{\partial a_m} \end{pmatrix} \tag{6}$$

definiert ist. Gleichung (5) folgt dabei durch lineare Approximation der Funktion $\boldsymbol{g}$ um $\boldsymbol{a}^{(k)}$. So führt man das nichtlineare Ausgleichsproblem auf eine Folge von linearen Ausgleichsproblemen zurück.

- 7.3.1 (2 Punkte): Implementieren Sie die entsprechende Funktionen `f(T,params)`, `g(T,N,f,params)` für eine Summe aus zwei Exponentialfunktionen,

$$f(t) = N_0 2^{-t/\tau_0} + N_1 2^{-t/\tau_2}. \tag{7}$$

  Hinweis: `params` ist hierbei eine Liste oder ein Array mit den 4 Parametern (N_0,$1/\tau_0$,N_1,$1/\tau_1$), die durch Ausgleichsrechnung aus einem Datensatz (T, N) bestimmt werden sollen und hier also $\boldsymbol{a}$ entsprechen.

- 7.3.2 (2 Punkte): Implementieren Sie die Jacobi-Matrix als Funktion `J(T,params)`. Rückgabewert sollte ein zweidimensionales Array sein.

- 7.3.3 (2 Punkte): Implementieren Sie das Gauß-Newton Verfahren
`GN(T, N, g, J, initial_params=[.5, .5, .5, 1.5], tol=1e-9, max_iterations = 1000).`

  Hinweis: Verwenden Sie als Konvergenzkriterium $\left(\boldsymbol{\delta}^{(k)}\right)^2 < \mathrm{tol}^2$. Beachten Sie, dass die Angabe für die Standardanfangswerte $(N_0, 1/\tau_0, N_1, 1/\tau_1) = (0.5,\ 0.5,\ 0.5,\ 1.5)$ meint.

- 7.3.4 (1 Punkt): Verwenden Sie die Standardanfangswerte und lösen Sie das nichtlineare Ausgleichsproblem für die in 7.1.1 erzeugten Daten. Welche Werte erhalten Sie für Halbwertszeiten und Isotopenanteile? Plotten Sie Ihre Ausgleichsfunktion f zusammen mit dem Datensatz (T, N) in einem halblogarithmischen Graphen.

- 7.3.5 (1 Punkt): Verwenden Sie nun `[.5, .9, .5, 1.5]` als `initial_params`. Was beobachten Sie?

Erweitern Sie Ihr Programm so, dass die Anpassung der Parameter $\mathbf{a}$ gedämpft erfolgen kann. Bestimmen Sie dazu in jedem Iterationsschritt das kleinste n mit $n = 0,\ 1,\ 2,\ ...,$ für das mit $\mathbf{a}^{(k+1)} = \mathbf{a}^{(k)} + 2^{-n}\boldsymbol{\delta}^{(k)}$ der Fehler $\left\|\mathbf{g}\left(\mathbf{a}^{(k+1)}\right)\right\|_2^2$ im nächsten Iterationsschritt $k+1$ kleiner als der Fehler $\left\|\mathbf{g}\left(\mathbf{a}^{(k)}\right)\right\|_2^2$ im aktuellen Schritt k ist. Das Abbruchkriterium für die Iteration mit Dämpfung soll dann $2^{-n} \cdot \left\|\boldsymbol{\delta}^{(k)}\right\|_2 < 10^{-9}$ sein.

- 7.3.6 (2 Punkte): Implementieren Sie das gedämpfte Gauß-Newton Verfahren.

- 7.3.7 (1 Punkt): Wiederholen Sie die Fits aus 7.3.4 und 7.3.5 und plotten Sie Ihre Resultate. Was beobachten Sie?

7.4 Vergleich mit natürlicher Isotopenhäufigkeit auf der Erde (2 Punkte)

Wir wollen schließlich noch Aussagen über die Gesteinsprobe hinsichtlich ihres Alters und ihrer Herkunft treffen. Natürliche Uranvorkommen auf der Erde haben aktuell Isotopenanteile $N_{238} = 0.9927$ und $N_{235} = 0.0072$. Im Folgenden nehmen wir an, dass in der Natur kein Uran erzeugt wird und natürliches Uran nur durch die zwei obigen Zerfälle verschwindet.

- 7.4.1 (1 Punkt): Stellen Sie das Verhältnis $N_{235}(t)/N_{238}(t)$ für Zeiten von vor 4.5 Millarden Jahren (ungefähres Alter der Erde) bis in 5 Milliarden Jahren in einem halblogarithmischen Graphen dar.

  Hinweis: Verwenden Sie für die Halbwertszeiten die am Anfang des Blattes gegebenen Werte und die gegenwärtigen natürlichen Häufigkeiten.

- 7.4.2 (1 Punkt): Zu welchem Zeitpunkt wäre das Isotopenverhältnis N_{235}/N_{238} auf der Erde gleich dem Isotopenverhältnis der Probe? Würden Sie vermuten, dass es sich um eine Gesteinsprobe aus der Frühzeit der Erde handelt?