

# Kapitel 6

## Nichtlineare Ausgleichsprobleme

Hier betrachten wir kurz Verfahren zur Lösung eines überbestimmten Systems von  $N$  nichtlinearen Gleichungen zur Bestimmung von  $n < N$  Unbekannten  $x_1, x_2, \dots, x_n$  aus  $N$  Meßdaten  $(z_k, y_k)$

$$f_i(z_i; x_1, \dots, x_n) = y_i.$$

Typischerweise kann ein solches Gleichungssystem nicht exakt gelöst werden. Man versucht stattdessen, die  $x_1, \dots, x_n$ , so zu bestimmen, daß für

$$r_i = y_i - f_i(z_i; x_1, \dots, x_n), \quad (6.1)$$

$$r = [r_1, \dots, r_N]^T \text{ und } x = [x_1, \dots, x_n]^T$$

$$F(x) = r^T r$$

minimal wird (siehe Methode der kleinsten Quadrate, Kapitel 4).

Die notwendige Bedingung zur Minimierung der Funktion  $F$  ist für  $j = 1, \dots, n$

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial F(x)}{\partial x_j} \\ &= \sum_{i=1}^N (f_i(z_i; x_1, \dots, x_n) - y_i) \frac{\partial f_i(z_i; x_1, \dots, x_n)}{\partial x_j}, \end{aligned}$$

ein System von  $n$  nichtlinearen Gleichungen für die Unbekannten  $x_j$ . Ein solches System kann i.a. nur iterativ gelöst werden.

Daher führt man das Problem durch Linearisierung der Fehlergleichungen (6.1) auf eine Folge von linearen Ausgleichsproblemen zurück. Ausgehend von einem Startvektor  $x^{(0)} = [x_1^{(0)}, \dots, x_n^{(0)}]^T$  bestimmt man weitere Näherungslösungen  $x^{(1)}, x^{(2)}, \dots$  wie folgt: Für  $x^{(i)}$  berechne man die Lösung  $s^{(i)}$  des linearen Ausgleichsproblems

$$\min_{s \in \mathbb{R}^N} \|r(x^{(i)}) - J_f(x^{(i)})s\|_2^2 \quad (6.2)$$

mit der Jacobi-Matrix von  $x \mapsto f(z; x)$  für festes  $z = [z_1, \dots, z_N]^T$

$$J_f(x) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1}(x) & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n}(x) \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial f_N}{\partial x_1}(x) & \dots & \frac{\partial f_N}{\partial x_n}(x) \end{bmatrix}$$

und

$$r(x) = \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_N \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} f_1(z_1; x_1, \dots, x_n) \\ \vdots \\ f_N(z_N; x_1, \dots, x_n) \end{bmatrix}.$$

Dies kann wie bei der Methode der kleinsten Quadrate beschrieben, mittels der QR-Zerlegung von  $J_f$  geschehen. Der Vektor

$$x^{(i+1)} = x^{(i)} + s^{(i)}$$

ist dann im günstigsten Fall eine bessere Näherung an die gesuchte Lösung.

Das Iterationsverfahren bezeichnet man als Gauß-Newton-Methode, da die Korrektur  $s^{(i)}$  nach der von Gauß verwendeten Methode der kleinsten Quadrate ermittelt wurde und sich die linearisierten Fehlergleichungen im Sonderfall  $N = n$  auf die linearen Gleichungen reduzieren, die in der Methode von Newton zur Lösung von nichtlinearen Gleichungen auftreten.

Zur Konvergenzanalyse können wir das Gauß-Newton-Verfahren mit Hilfe der Normalengleichung als Fixpunktiteration schreiben. Es ist nämlich

$$x^{(i+1)} = x^{(i)} + (J_f(x^{(i)})^T J_f(x^{(i)}))^{-1} J_f(x^{(i)})^T r =: \varphi(x^{(i)}).$$

Wird das Minimum in  $x^{(*)}$  angenommen, so gilt dort  $J_f(x^{(*)})^T r^{(*)} = 0$ . Für die Ableitung von  $\varphi$  im Fixpunkt  $x^{(*)}$  ergibt sich damit

$$\begin{aligned} \varphi'_{x^{(*)}}(h) &= h + 0 + (J_f(x^{(*)})^T J_f(x^{(*)}))^{-1} (f''_{x^{(*)}}(h) r^{(*)} + J_f(x^{(*)})^T J_f(x^{(*)}) h) \\ &= (J_f(x^{(*)})^T J_f(x^{(*)}))^{-1} f''_{x^{(*)}}(h) r^{(*)}, \end{aligned}$$

wobei  $r^{(*)}$  das minimale Residuum ist, und  $f''_x$  die Ableitung der Abbildung  $x \mapsto J_f(x)$ .

Die Norm der Abbildung  $\varphi'_{x^{(*)}}$  ist insbesondere dann kleiner als 1, wenn  $r^{(*)}$  hinreichend klein ist, d.h. wenn das Modell und die Meßwerte gut zusammenpassen. Das Problem heißt *konsistent*, wenn sogar  $r^{(*)} = 0$ . In diesem Fall ist das Verfahren quadratisch konvergent (dreimalige Differenzierbarkeit von  $f$  vorausgesetzt).<sup>1</sup>

Die mit der Gauß-Newton-Methode gebildete Folge von Vektoren  $x^{(k)}$  braucht bei ungeeigneter Wahl des Startvektors oder bei kritischen Ausgleichsproblemen nicht gegen die gesuchte Lösung des nichtlinearen Problems zu konvergieren. Um stets eine gegen die Lösung konvergierende Folge von Vektoren  $x^{(k)}$  zu konstruieren, sollte

$$F(x^{(k+1)}) < F(x^{(k)}) \tag{6.3}$$

erfüllt sein. Dazu muß in jedem Schritt eine Abstiegsrichtung  $v^{(k)}$  bekannt sein, so daß mit

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + t v^{(k)}, \quad t > 0$$

die Bedingung (6.3) erfüllt ist. Eine Abstiegsrichtung stellt der negative Gradient der Funktion  $F(x)$  im Punkt  $x^{(k)}$  dar. Diese Richtung ist mittels

$$v^{(k)} = -(J_f^{(k)})^T r^{(k)}$$

---

<sup>1</sup>Genauere Schranken finden sich z.B. in Deuffhard/Hohmann, Numerische Mathematik I.

berechenbar, wobei  $J^{(k)}$  die Jacobi-Matrix und  $r^{(k)}$  den Residuenvektor für  $x^{(k)}$  bezeichnen. Wird der Parameter  $t$  so bestimmt, daß

$$F(x^{(k+1)}) = \min_t F(x^{(k)} + tv^{(k)})$$

gilt, spricht man von der Methode des steilsten Abstiegs, welche in der Regel sehr langsam gegen die gesuchte Lösung konvergiert.

Eine andere, besser geeignete Abstiegsrichtung ist die bei der Gauß-Newton-Methode berechnete Korrekturvektor  $s^{(k)}$ . Der Vektor

$$x^{(i+1)} = x^{(i)} + 2^{-k}s^{(i)}, \quad k = 0, 1, 2, 3, \dots$$

für welchen zum ersten Mal  $F(x^{(i+1)}) < F(x^{(i)})$  gilt, ist dann eine bessere Näherung an die gesuchte Lösung. Bei ungünstiger Wahl des Startvektors  $x^{(0)}$  kann die Konvergenz der Folge  $x^{(k)}$  zu Beginn der Iteration sehr langsam sein. In der Nähe des Lösungsvektors  $x$  ist die Konvergenz annähernd quadratisch.

Eine effizientere Methode stammt von Marquardt. Um eine günstigere Abstiegsrichtung zu bestimmen, betrachtet er die Aufgabe, mit  $C = J^{(k)}$  und  $d = r^{(k)}$  den Vektor  $v$  als Lösung des Extremalproblems

$$\|Cv + d\|_2^2 + \lambda^2 \|v\|_2^2 = \min, \quad \lambda > 0 \quad (6.4)$$

zu bestimmen. Bei gegebenem Wert der Parameters  $\lambda$  ist  $v$  die Lösung des Systems von Fehlergleichungen nach der Methode der kleinsten Quadrate

$$\tilde{C}v + \tilde{d} = \tilde{\rho} \quad \text{mit} \quad \tilde{C} := \begin{pmatrix} C \\ \lambda I \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{(N+n) \times n}, \tilde{d} := \begin{pmatrix} d \\ 0 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{N+n}, \tilde{\rho} \in \mathbb{R}^{N+n}. \quad (6.5)$$

Für jedes  $\lambda > 0$  hat die Matrix  $\tilde{C}$  den Maximalrang  $n$  unabhängig vom Rang von  $C$ . Im Vergleich zur Gauß-Newton Methode wurde jenes Fehlergleichungssystem (6.2) um  $n$  Gleichungen erweitert und auf diese Weise regularisiert. Der Lösungsvektor  $v$  besitzt folgende Eigenschaften:

1. Der Vektor  $v = v^{(k+1)}$  ist eine Abstiegsrichtung (solange  $\nabla F(x^{(k)}) \neq 0$  ist).
2. Die euklidische Norm  $\|v\|_2$  des Vektors ist mit zunehmendem  $\lambda$  eine monoton abnehmende Funktion.

Im Verfahren von Marquardt zur Minimierung der Summe der Quadrate der Residuen wird die euklidische Norm des Vektors  $v^{(k+1)}$  durch den Parameter  $\lambda$  so gesteuert, daß mit

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + v^{(k+1)}, \quad F(x^{(k+1)}) < F(x^{(k)}), \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (6.6)$$

gilt. Die Wahl des Wertes  $\lambda$  erfolgt auf Grund des Rechenablaufes. Ist die Bedingung (6.6) für das momentane  $\lambda$  erfüllt, dann soll  $\lambda$  für den nachfolgenden Schritt verkleinert werden, beispielsweise halbiert. Ist aber (6.6) für das momentane  $\lambda$  nicht erfüllt, soll  $\lambda$  solange vergrößert, beispielsweise verdoppelt werden, bis ein Vektor  $v^{(k+1)}$  resultiert,

für den die Bedingung gilt. Selbstverständlich muß mit dem Startvektor  $x^{(0)}$  auch ein Startwert  $\lambda^{(0)}$  vorgegeben werden. Ein problemabhängiger Vorschlag ist

$$\lambda^{(0)} = \|C^{(0)}\|_F / \sqrt{nN} = \sqrt{\frac{1}{nN} \sum_{i,j} (c_{ij}^{(0)})^2}$$

mit der Frobenius-Norm der Matrix  $C^{(0)}$  zum Startvektor  $x^{(0)}$ .

Ein Iterationsschritt des Verfahrens von Marquardt erfordert die Berechnung des Vektors  $v^{(k+1)}$  aus dem Fehlergleichungssystem (6.5) für möglicherweise mehrere Werte des Parameters  $\lambda$ . Um diesen Schritt möglichst effizient zu gestalten, erfolgt die Behandlung von (6.5) in zwei Teilen. In einem vorbereitenden Teilschritt werden die ersten  $N$  von  $\lambda$  unabhängigen Fehlergleichungen mit einer orthogonalen Matrix  $Q_1$  so transformiert, daß

$$Q_1^T \tilde{C} = \begin{pmatrix} R_1 \\ 0_1 \\ \lambda I \end{pmatrix}, \quad Q_1^T \tilde{d} = \begin{pmatrix} \hat{d}_1 \\ \hat{d}_2 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad R_1 \in \mathbb{R}^{n \times n}, 0_1 \in \mathbb{R}^{(N-n) \times n} \quad (6.7)$$

gilt. Unter der Annahme, daß  $C$  Maximalrang hat, ist  $R_1$  eine reguläre obere Dreiecksmatrix, und die Transformation kann entweder mit der Methode von Givens oder Householder erfolgen. Auf jeden Fall bleiben die letzten  $n$  Fehlergleichungen unverändert. Ausgehend von (6.7) wird zu gegebenem  $\lambda$  mit einer orthogonalen Matrix  $Q_2$  die Transformation beendet, um die Matrizen und Vektoren

$$Q_2^T Q_1^T \tilde{C} = \begin{pmatrix} R_2 \\ 0_1 \\ 0_2 \end{pmatrix}, \quad Q_2^T Q_1^T \tilde{d} = \begin{pmatrix} \tilde{d}_1 \\ \hat{d}_2 \\ \hat{d}_3 \end{pmatrix}, \quad R_2, 0_2 \in \mathbb{R}^{n \times n}$$

zu erhalten. Der gesuchte Vektor  $v^{(k+1)}$  ergibt sich aus  $R_2 v^{(k+1)} + \tilde{d}_1 = 0$  mit der stets regulären oberen Dreiecksmatrix  $R_2$  durch den Prozeß des Rückwärtseinsetzens. Muß der Wert  $\lambda$  vergrößert werden, so ist nur der zweite Teilschritt zu wiederholen. Dazu sind  $R_1$  und  $\hat{d}_1$  als Ergebnis der ersten Teils abzuspeichern. Da die Nullmatrix  $0_1$  und der Teilvektor  $\hat{d}_2$  von (6.7) für den zweiten Teilschritt bedeutungslos sind, kann er sowohl speicherökonomisch als auch sehr effizient durchgeführt werden. Die sehr spezielle Struktur der noch zu behandelnden Fehlergleichungen des zweiten Teilschrittes weist auf die Anwendung der Givens-Transformation hin.