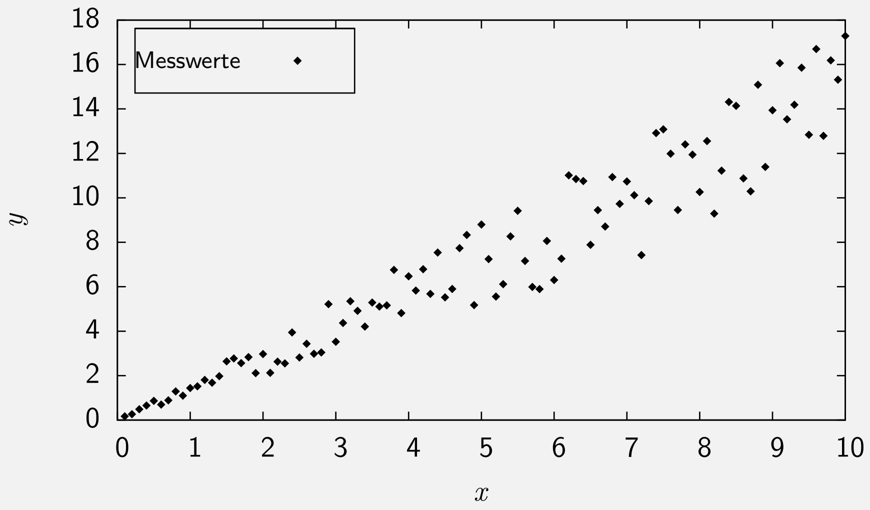
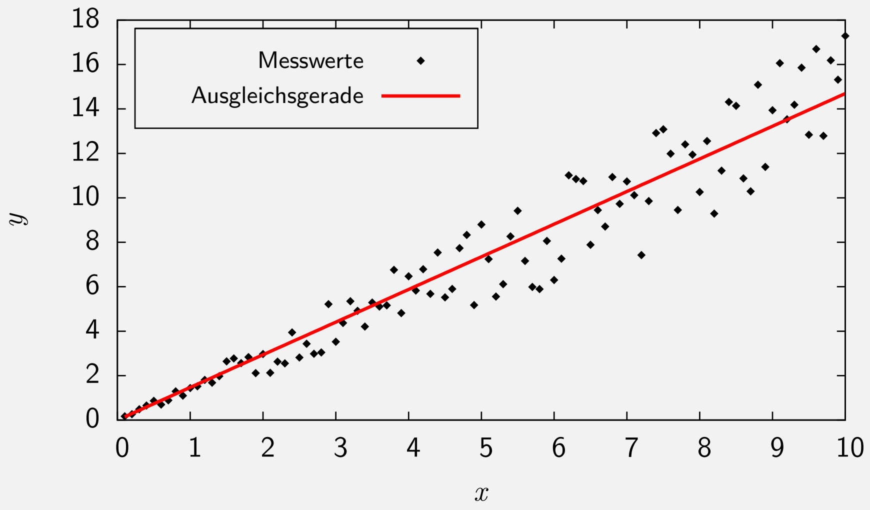
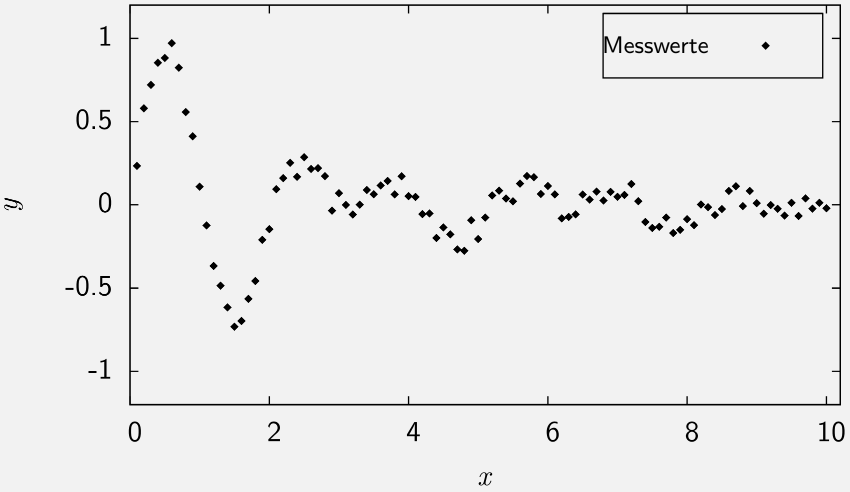
Seminar Numerische Verfahren: Nichtlineare Ausgleichsprobleme

Kazimir Menzel
Markus Pawellek

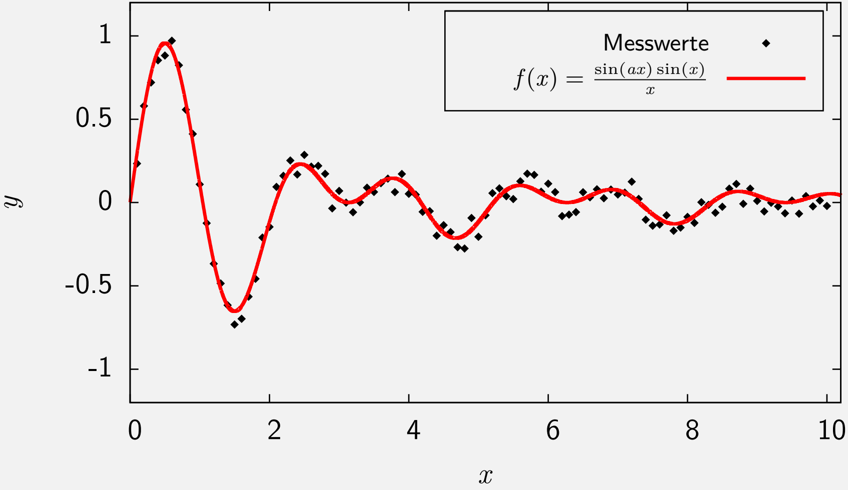
17. Mai 2016


Messwerte
18
16
14
12
10
8
6
4
2
0
y
0
1
2
3
4
5
6
7
8
9
10
x


Messwerte
Ausgleichsgerade
18
16
14
12
10
8
6
4
2
0
0
1
2
3
4
5
6
7
8
9
10
y
x



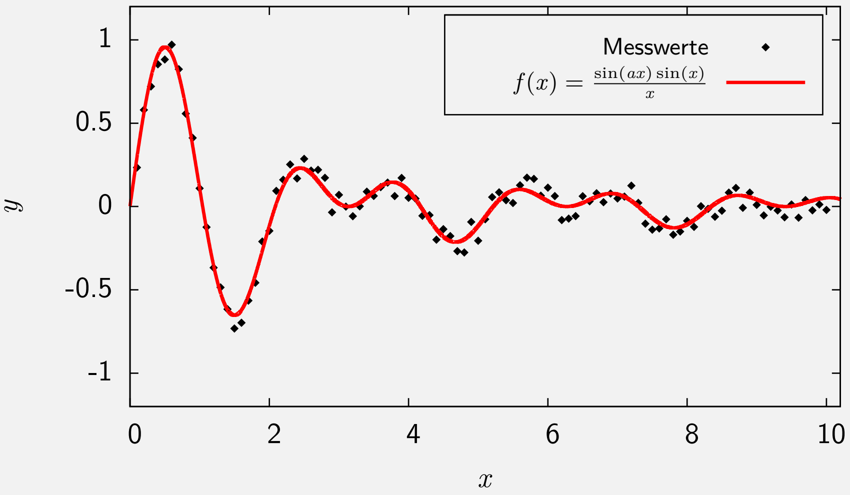
Messwerte
1
0.5
0
-0.5
-1
y
0
2
4
6
8
10
x



Messwerte
$f(x) = \frac{\sin(ax)\sin(x)}{x}$
1
0.5
0
-0.5
-1
0
2
4
6
8
10
x
y

Gliederung

Idee des Ausgleichsproblems



Das etwas allgemeinere Ausgleichsproblem

Ausgleichsproblem mit Methode der kleinsten Quadrate

Für $n, m \in \mathbb{N}, m \leq n$, eine gegebene Parametermenge $U \subset \mathbb{R}^m$ und eine gegebene Residuen-Funktion $r : U \longrightarrow \mathbb{R}^n$ ist das Ausgleichsproblem definiert durch

$$\min \left\{ \|r(\lambda)\|_2^2 \;\middle|\; \lambda \in U \right\}$$

Gauß-Newton-Verfahren

Bedingungen für Minimum

$$\nabla s(\lambda^\star) = 0$$

$$\mathrm{D}\left(\nabla s\right)\left(\lambda^\star\right) \text{ ist positiv definit}$$

Algorithmus: Gauß-Newton-Verfahren

Eingabe: $r : \mathbb{R}^m \longrightarrow \mathbb{R}^n, \quad \lambda^{(0)} \in \mathbb{R}^m$

(1) Setze $k = 0$.

(2) Berechne $r\left(\lambda^{(k)}\right), \mathrm{D}\, r\left(\lambda^{(k)}\right)$.

(3) Bestimme den Korrekturvektor $\xi^{(k)}$ gemäß

$$\left[(\mathrm{D}\, r)^{\mathrm{T}}\, \mathrm{D}\, r\right]\left(\lambda^{(k)}\right) \xi^{(k)} = -\left[(\mathrm{D}\, r)^{\mathrm{T}} r\right]\left(\lambda^{(k)}\right)$$

(4) Setze $\lambda^{(k+1)} = \lambda^{(k)} + \xi^{(k)}$.

(5) Setze $k = k + 1$.

(6) Gehe zu Schritt (2), wenn

$$k < k_{\mathrm{max}} \quad \wedge \quad \left\|\xi^{(k)}\right\|_2^2 > \delta_{\mathrm{min}}$$

Levenberg-Marquardt-Verfahren

korrigierte Normalengleichung

$$\left[(\mathrm{D}\, r)^{\mathrm{T}}\, \mathrm{D}\, r + \mu^2 \mathrm{I}\right] \left(\lambda^{(k)}\right) \xi^{(k)} = -\left[(\mathrm{D}\, r)^{\mathrm{T}} r\right] \left(\lambda^{(k)}\right)$$

- μ soll hier adaptiv gewählt werden
- obere und untere Schranken β_0, β_1 werden benötigt

Levenberg-Marquardt-Verfahren

relative Residualänderung

$$\varepsilon_\mu = \frac{\left\|r\left(\lambda^{(k)}\right)\right\|_2^2 - \left\|r\left(\lambda^{(k)} + \xi^{(k)}\right)\right\|_2^2}{\left\|r\left(\lambda^{(k)}\right)\right\|_2^2 - \left\|r\left(\lambda^{(k)}\right) + \mathrm{D}\, r\left(\lambda^{(k)}\right) \xi^{(k)}\right\|_2^2}$$

Algorithmus: Levenberg-Marquardt-Verfahren Teil 1

Eingabe: $r : \mathbb{R}^m \longrightarrow \mathbb{R}^n, \quad \lambda^{(0)} \in \mathbb{R}^m$

(1) Setze $k = 0$.

(2) Berechne $r\left(\lambda^{(k)}\right), \mathrm{D}\, r\left(\lambda^{(k)}\right)$.

(3) Bestimme den Korrekturvektor $\xi^{(k)}$ gemäß

$$\left[(\mathrm{D}\, r)^{\mathrm{T}}\, \mathrm{D}\, r + \mu^2 \mathrm{I}\right]\left(\lambda^{(k)}\right) \xi^{(k)} = -\left[(\mathrm{D}\, r)^{\mathrm{T}} r\right]\left(\lambda^{(k)}\right)$$

Algorithmus: Levenberg-Marquardt-Verfahren Teil 2

(1) Berechne ε_μ und teste, ob die Korrektur akzeptabel ist.

$$\varepsilon_\mu = \frac{\left\| r\left(\lambda^{(k)}\right) \right\|_2^2 - \left\| r\left(\lambda^{(k)} + \xi^{(k)}\right) \right\|_2^2}{\left\| r\left(\lambda^{(k)}\right) \right\|_2^2 - \left\| r\left(\lambda^{(k)}\right) + \mathrm{D}\, r\left(\lambda^{(k)}\right) \xi^{(k)} \right\|_2^2}$$

(i) Fall $\varepsilon_\mu \leq \beta_0$: Setze $\mu = 2\mu$ und gehe zu (3).
(ii) Fall $\varepsilon_\mu \geq \beta_1$: Setze $\mu = \frac{\mu}{2}$.

(2) Setze $\lambda^{(k+1)} = \lambda^{(k)} + \xi^{(k)}$.

(3) Setze $k = k + 1$.

(4) Gehe zu Schritt (2), wenn

$$k < k_{\max} \quad \wedge \quad \left\| \xi^{(k)} \right\|_2^2 > \delta_{\min}$$

Simulated Annealing

Algorithmus: Simulated Annealing

Eingabe: $r : \mathbb{R}^m \longrightarrow \mathbb{R}^n, \quad \lambda_0 \in \mathbb{R}^m$

(1) Berechne $c_0 = \|r(\lambda_0)\|_2^2$.

(2) Setze $T = T_0$ und $i = 0$.

(3) Bestimme einen zufälligen Parameter λ_1.

(4) Berechne $c_1 = \|r(\lambda_1)\|_2^2$.

(5) Fall $c_1 < c_2$: Setze $\lambda_0 = \lambda_1$.
Fall $c_1 \geq c_2$: Berechne

$$p = \exp\left(\frac{c_0 - c_1}{T}\right)$$

und setze $\lambda_0 = \lambda_1$ mit Wahrscheinlichkeit p.

(6) Setze $i = i + 1$ und gehe zu Schritt (3), wenn $i < i_{\max}$.

(7) Setze $T = \alpha T$ und gehe zu Schritt (3), wenn $T > T_{\min}$.

Fazit und Zusammenfassung

- es gibt selte eine geschlossene Form der Problemstellung

$$\implies \quad \text{iterative Verfahren werden benötigt}$$

- nichtlineare Ausgleichsprobleme erfordern je nach gewählter Parameterfunktion spezifische Verfahren

$$\implies \quad \text{adaptive Steuerung gewählter Parameter nötig}$$

- viele Verfahren finden nur lokale Minima
- Startwertproblem

Referenzen

- Hermann, *Numerische Mathematik*, 3.Auflage
- http://en.wikipedia.org/wiki/Gauss-Newton_algorithm
- http://en.wikipedia.org/wiki/Levenberg-Marquardt_algorithm
- http://en.wikipedia.org/wiki/Simulated_annealing
- Funken, *Numerik III*, Skript Universität Ulm, 2012/2013
- katrinaeg.com/simulated-annealing.html
- Kincaid und Cheney, *Numerical Analysis*, 3.Edition