Numerisches Rechnen

Nichtlineare Ausgleichsrechnung

M. Grepl

J. Berger & R. O'Connor

Institut für Geometrie und Praktische Mathematik
RWTH Aachen

Wintersemester 2015/16

Vorlesungsinhalt

4. Nichtlineare Gleichungssysteme, iterative Lösungsverfahren
   geg.: $\boldsymbol{f} : \mathbb{R}^{\boldsymbol{n}} \to \mathbb{R}^{\boldsymbol{n}}$;
   ges.: $\boldsymbol{x}^* \in \mathbb{R}^{\boldsymbol{n}}$, so dass $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^*) = \mathbf{0}$
5. **Nichtlineare Ausgleichsrechnung**
   geg.: $\boldsymbol{F} : \mathbb{R}^{\boldsymbol{n}} \to \mathbb{R}^{\boldsymbol{m}}$;
   ges.: $\boldsymbol{x}^* \in \mathbb{R}^{\boldsymbol{n}}$, so dass $\boldsymbol{x}^* = \arg\min_{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^{\boldsymbol{n}}} \|\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})\|_{\mathbf{2}}$
6. Interpolation
   geg.: Stützstellen und zugehörige Daten
   $$(\boldsymbol{x}_0, \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_0)),\ (\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_1)), \ldots,\ (\boldsymbol{x}_n, \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_n));$$
   ges.: Polynom $\boldsymbol{P}_{\boldsymbol{n}} \in \boldsymbol{\Pi}_{\boldsymbol{n}}$, so dass
   $$\boldsymbol{P}_{\boldsymbol{n}}(\boldsymbol{x}_j) = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_j),\ \boldsymbol{j} = 0, \ldots, \boldsymbol{n}$$

Übersicht

Themen: Dahmen & Reusken Kap. 6.1-6.3

- Das nichtlineare Ausgleichsproblem
- Gauß-Newton-Verfahren
- Levenberg-Marquardt-Verfahren

Was Sie mitnehmen sollten:

- Unterschied lineares vs. nichtlineares Ausgleichsproblem
- Lösungsverfahren: vom linearen zum nichtlinearen Fall
- Unterschied Newton- vs. Gauß-Newton-Verfahren

Zur Erinnerung: Lineares Ausgleichsproblem

Polynomial Data-Fitting

Gegeben:

- m Messungen an den Punkten $y_1, y_2, \ldots, y_m$ mit zugehörigen Daten $z_1, z_2, \ldots, z_m$.
- Polynom $(n-1)$-ter Ordnung (wobei $n < m$)

$$f(y) = c_0 + c_1\, y + \ldots + c_{n-1}\, y^{n-1}$$

Gesucht:

- Koeffizienten $c_0,\ c_1,\ \ldots,\ c_{n-1}$, so dass die Summe der Fehlerquadrate

$$\sum_{i=1}^{m} (f(y_i) - z_i)^2$$

minimal wird.

Zur Erinnerung: Lineares Ausgleichsproblem

In Matrix-Vektor Notation

$$\|A\,x^* - b\|_2 = \min_{x \in \mathbb{R}^n} \|A\,x - b\|_2$$

mit

$$A = \begin{bmatrix} 1 & y_1 & \cdots & y_1^{n-1} \\ 1 & y_2 & \cdots & y_2^{n-1} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & y_m & \cdots & y_m^{n-1} \end{bmatrix}, \quad x = \begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \vdots \\ c_{n-1} \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \\ \vdots \\ z_m \end{bmatrix}$$

Wesentliche Eigenschaft

Die unbekannten Koeffizienten/Parameter tauchen linear auf

bzw.

es lassen sich entsprechende Parameter definieren/identifizieren.

Beim nichtlinearen Ausgleichsproblem ist dies nicht mehr möglich. . .

Beispiel 6.1

Differentialgleichung einer gedämpften Schwingung:

$$m\,u'' + b\,u' + D\,u = 0,$$

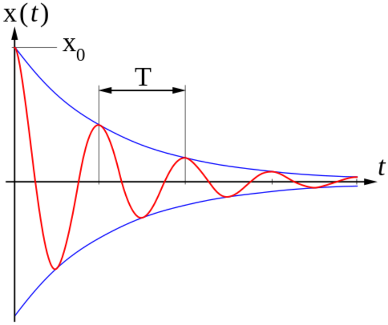
mit Masse m, Dämpfungskonstante b und Federkonstante D.

Lösungen haben die Form:

$$u(t) = u_0 e^{-\delta t} \sin(\omega_d\, t + \varphi_0),$$

wobei:

u_0	...	Anfangswert
φ_0	...	Nullphasenwinkel
δ	...	Abklingkonstante
ω_d	...	ged. Eigenkreisfrequenz



Quelle: wikipedia

Beispiel 6.1

Gegeben:

- 10 Messungen an den Punkten $t_1, t_2, \ldots, t_{10}$ mit zugehörigen Daten $b_1, b_2, \ldots, b_{10}$.
- Modell einer gedämpften Schwingung

$$y(t; x_1, x_2, x_3, x_4) = x_1 e^{-x_2 t} \sin(x_3 t + x_4)$$

mit Parametern $x_1, \ldots, x_4$.

Gesucht:

- Parameter $x_1, \ldots, x_4$, so dass die Summe der Fehlerquadrate

$$\sum_{i=1}^{10} (x_1 e^{-x_2 t_i} \sin(x_3 t_i + x_4) - b_i)^2 = \|F(x)\|_2^2$$

minimal wird. Hierbei ist $F : \mathbb{R}^4 \to \mathbb{R}^{10}$ definiert durch

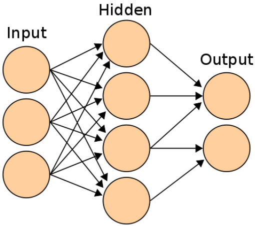
$$\begin{aligned} F_i(x) &= F_i(x_1, x_2, x_3, x_4) \\ &= x_1 e^{-x_2 t_i} \sin(x_3 t_i + x_4) - b_i, \quad i = 1, \ldots, 10. \end{aligned}$$

Neuronale Netze

- Mehrlagiges Perzeptron
  - n_k Neuronen in der k-ten Schicht
  - Aktivierungsfunktion eines Neurons: skalare Abbildung $\phi : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ (single input-single output map)
- Ausgang des j-ten Neurons der $(k+1)$-ten Schicht

$$x_{k+1}^j = \phi\left(u_k^{0j} + \sum_{s=1}^{n_k} x_k^s u_k^{sj}\right), \quad j = 1, \ldots, n_{k+1},$$

wobei u_k^{sj} die zu bestimmenden Gewichte sind.



Neuronale Netze

- Mehrlagiges Perzeptron mit N Schichten: parameterabhängige Abbildung h, die den Eingangsvektor x_0 in den Ausgangsvektor $x_N = h(u, x_0)$ abbildet, wobei

$$u = \{u_k^{sj} \,|\, k = 0, \ldots, N-1, s = 0, \ldots, n_k, j = 1, \ldots, n_{k+1}\}$$

- Gegeben seien m Eingabe-/Ausgabedaten $(y_1, z_1), \ldots,$ (y_m, z_m) eines physikalischen Systems.
- **Lernverfahren**: Minimiere Ausgabefehler

$$\min_u \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m} \|z_i - h(u, y_i)\|^2$$

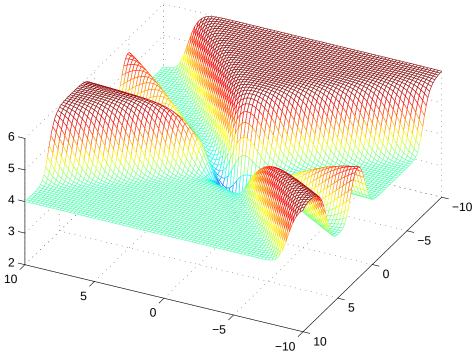
- Typische Aktivierungsfunktionen der Neuronen

$$\phi(\xi) = \frac{1}{1+e^{-\xi}}, \quad \phi(\xi) = \tanh(\xi)$$

Neuronale Netze – Beispiel

Lernverfahren ($m = 5$, Gewichte u_0, u_1)

$$\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{5} (z_i - \phi(u_1 y_i + u_0))^2$$



Definition

Definiert man allgemein die Abbildung $(m > n)$

$$F : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m, \quad F_i(x) := y(t_i; x) - b_i, \quad i = 1, \ldots, m,$$

kann das *nichtlineare Ausgleichsproblem* wie folgt formuliert werden:

Nichtlineares Ausgleichsproblem

Bestimme $x^* \in \mathbb{R}^n$, so dass

$$\|F(x^*)\|_2 = \min_{x \in \mathbb{R}^n} \|F(x)\|_2,$$

oder, äquivalent,

$$\phi(x^*) = \min_{x \in \mathbb{R}^n} \phi(x),$$

wobei $\phi : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, $\phi(x) := \frac{1}{2}\|F(x)\|_2^2 = \frac{1}{2}F(x)^T F(x)$.

Definition

Zur Erinnerung: Die Funktion

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

hat in einem Punkt x^* ein *lokales Minimum* genau dann, wenn die folgenden zwei Bedingungen erfüllt sind:

1. $\nabla\phi(x^*) = \mathbf{0}$ (d.h., x^* ist kritischer Punkt von ϕ),
2. $\phi''(x^*) \in \mathbb{R}^{n\times n}$ ist symmetrisch positiv definit.

Es läßt sich durch Nachrechnen bestätigen, dass

$$\begin{aligned} \nabla\phi(x) &= F'(x)^T F(x), \\ \phi''(x) &= F'(x)^T F'(x) + \sum_{i=1}^{m} F_i(x) F_i''(x), \end{aligned}$$

mit Jacobi-Matrix $F'(x) \in \mathbb{R}^{m\times n}$ und

Hesse-Matrix $F_i''(x) := \left(\frac{\partial^2 F_i(x)}{\partial x_j \partial x_k}\right)_{1\le j,k\le n} \in \mathbb{R}^{n\times n}$

Das Gauß-Newton-Verfahren

Nichtlineares Ausgleichsproblem

Gegeben $F : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$, bestimme $x^* \in \mathbb{R}^n$ so dass

$$\|F(x^*)\|_2 = \min_{x \in \mathbb{R}^n} \|F(x)\|_2.$$

Ansatz:

1. Ersetze $F(x)$ durch lineare Approximation (Taylorentwicklung)
2. Schrittweise Annäherung an x^* durch Lösung linearer Probleme in jedem Schritt

Zur Erinnerung:

- Wir bezeichnen die Lösung am Iterationsschritt k mit

$$x^k = (x_1^k, \ldots, x_n^k)^T \in \mathbb{R}^n.$$

- Taylorentwicklung

$$F(x) = F(x^k) + F'(x^k)(x - x^k) + \mathcal{O}(\|x - x^k\|_2^2).$$

Das Gauß-Newton-Verfahren

Ansatz: Ersetze $F(x)$ in

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} \|F(x)\|_2,$$

durch lineare Approximation

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} \|\underbrace{F(x^k)}_{\in\mathbb{R}^m}+\underbrace{F'(x^k)}_{\in\mathbb{R}^{m\times n}}\underbrace{(x-x^k)}_{=s\in\mathbb{R}^n}\|_2,$$

Wir setzen $s = x - x^k$ (bzw. $s^k = x^{k+1} - x^k$) und erhalten das *lineare Ausgleichsproblem*: N6.1

Finde $s^k \in \mathbb{R}^n$ mit minimaler 2-Norm, so dass

$$\|F'(x^k)s^k + F(x^k)\|_2 = \min_{s\in\mathbb{R}^n} \|F'(x^k)s + F(x^k)\|_2$$

Anschließend berechnen wir

$$x^{k+1} = x^k + s^k.$$

Das Gauß-Newton-Verfahren

Insgesamt erhält man folgendes Verfahren:

Algorithmus 6.3 (Gauß-Newton).

Wähle Startwert x^0.

Für $k = 0, 1, 2, \ldots$:

1. Berechne $F(x^k), F'(x^k)$.
2. Finde $s^k \in \mathbb{R}^n$ mit minimaler 2-Norm, so dass
$$\|F'(x^k)s^k + F(x^k)\|_2 = \min_{s \in \mathbb{R}^n} \|F'(x^k)s + F(x^k)\|_2$$
3. Setze $x^{k+1} = x^k + s^k$.

Beachte:

- Schritt 2 erfordert die Lösung eines linearen Ausgleichsproblems (Normalgleichung, QR-Zerlegung, SVD)

Bemerkungen

- "Analogie" nichtlineare Gleichungssysteme. N6.2
- In einem kritischen Punkt x^* von ϕ muss die Ableitung $\nabla\phi(x) = F'(x)^T F(x)$ Null sein. Als Abbruchkriterium für das Verfahren wird daher häufig
$$\|F'(x^k)^T F(x^k)\|_2 \leq \varepsilon$$
benutzt, wobei ε eine vorgegeben Toleranz ist.
- Der Erfolg des Gauß-Newton-Verfahrens hängt von der Wahl des Startwerts ab (vgl. Newton-Verfahren).
- Den Zusatz "mit minimaler 2-Norm" kann man weglassen, wenn $\text{Rang}(F'(x)) = n$ gilt (vgl. SVD).
- Analyse Gauß-Newton, Vergleich mit Newton-Verfahren N6.3
- Vergleich lineares vs. nichtlineares Ausgleichsproblem N6.4(1-4)

Beispiel 6.4.

Lösen Sie das nichtlineare Ausgleichsproblem **N6.5**

$$\min_{x \in \mathbb{R}} \|F(x)\|_2,$$

wobei

$$F(x) := \begin{pmatrix} a + r\cos x \\ r\sin x \end{pmatrix}, \text{ mit } a > r > 0, \;\; x \in [0, 2\pi].$$

- Für die Jacobi-Matrix erhält man

$$F'(x) = r \begin{pmatrix} -\sin x \\ \cos x \end{pmatrix}, \quad F'(x)^T F'(x) = r^2.$$

- Außerdem ergibt sich

$$\phi(x) = \tfrac{1}{2}\|F(x)\|_2^2 = \tfrac{1}{2}(a^2 + 2ar\cos x + r^2)$$

und damit

$$\nabla\phi(x) = -ra\sin x.$$

Beispiel 6.4.

- Für die Iterationsfunktion zu $\boldsymbol{F}$ erhält man schließlich

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\Phi}(x) &= x - \left(F'(x)^T F'(x)\right)^{-1} \nabla\phi(x^k) \\ &= x + \frac{a}{r}\sin x \end{aligned}$$

- Es gibt zwei kritische Punkte von ϕ

$$\begin{aligned} x^* &= 0 \quad \text{(lokales Maximum)}, \\ x^* &= \pi \quad \text{(lokales Minimum)}. \end{aligned}$$

- In den kritischen Punkten $x^* = 0$, $x^* = \pi$ gilt

$$|\Phi'(x^*)| = |1 + \frac{a}{r}\cos x^*|.$$

und damit

$$\begin{aligned} |\Phi'(x^*)| &= \tfrac{a+r}{r} > 1 && \text{für } x^* = 0 \text{ (lokales Max)} \\ |\Phi'(x^*)| &= \tfrac{a-r}{r} = \tfrac{a}{r} - 1 && \text{für } x^* = \pi \text{ (lokales Min)} \end{aligned}$$

Beispiel 6.4.

Das Gauß-Newton-Verfahren hat in diesem Beispiel folgende Eigenschaften:

1. Das lokale Maximum ist abstoßend
2. Die Methode ist *linear* konvergent in einer Umgebung des lokalen Minimums (wenn $a < 2r$), oder
3. das lokale Minimum ist auch abstoßend (wenn $a > 2r$).

Mann kann zeigen, dass ähnliche Eigenschaften in einem allgemeinen Rahmen gültig sind.

Beispiel 6.7.

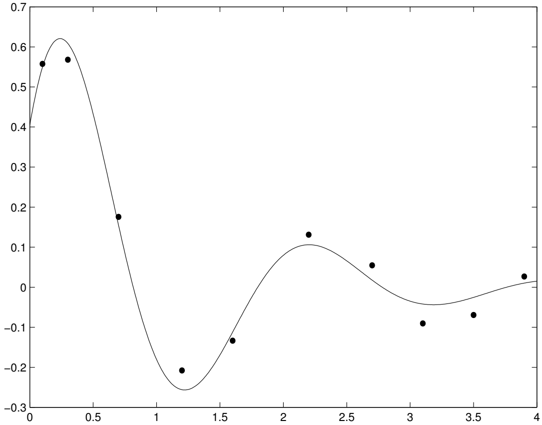
Das Gauß-Newton-Verfahren angewandt auf das Problem der gedämpften Schwingung in Beispiel 6.1.

k	$\|F(x^k)\|_2$	$\|\nabla\phi(x^k)\|_2$	$\|\nabla\phi(x^k)\|_2/\|\nabla\phi(x^{k-1})\|_2$
0	0.35035332090089	1.45e−01	-
1	0.34106434131008	1.33e−01	0.91
2	0.22208131421995	4.88e−02	0.37
3	0.16802866234936	1.02e−01	2.08
4	0.09190056278958	1.80e−01	0.18
5	0.08902339976144	1.18e−03	0.07
6	0.08895515308450	3.81e−04	0.32
7	0.08894991006370	1.15e−04	0.30
8	0.08894937563528	4.07e−05	0.35
9	0.08894931422207	1.38e−05	0.34
10	0.08894930687791	4.85e−06	0.35
11	0.08894930599062	1.68e−06	0.35
12	0.08894930588306	5.87e−07	0.35

In der letzten Spalte der Tabelle sieht man das lineare Konvergenzverhalten des Gauß-Newton-Verfahrens.

Beispiel 6.7.

Die berechneten Parameterwerte $x^* = x^{12}$ liefern die Lösung $y(t; x^*) = x_1^* e^{-x_2^* t} \sin(x_3^* t + x_4^*)$ im folgenden Plot.



Levenberg-Marquardt-Verfahren

Zur Erinnerung: Berechnung der Korrektur (bzw. Schrittweite) beim Gauß-Newton-Verfahren

$$F'(x)^T F'(x)\, s = -F'(x)^T\, F(x)$$

Idee: Einführung einer Dämpfung

$$[F'(x)^T F'(x) + \mu^2 I]\, s = -F'(x)^T\, F(x),$$

wobei $\mu > 0$ ein zu wählender Parameter ist. Wir erhalten annähernd für

- μ gross: Gradientenverfahren (Verfahren des steilsten Abstiegs)
- μ klein: Gauß-Newton-Verfahren

Variante: Berechne Schrittweite aus

$$[F'(x)^T F'(x) + \mu^2\, \mathrm{diag}(F'(x)^T F'(x))]\, s = -F'(x)^T\, F(x),$$

Bemerkungen

Lineares Ausgleichsproblem (Gauß-Newton)

$$\min_{s\in\mathbb{R}^n} \|F'(x^k)s + F(x^k)\|_2$$

wird ersetzt durch

$$\min_{s\in\mathbb{R}^n} \left(\|F'(x^k)s + F(x^k)\|_2^2 + \mu^2\|s\|_2^2\right),$$

oder, äquivalent,

$$\min_{s\in\mathbb{R}^n} \left\| \begin{pmatrix} F'(x^k) \\ \mu I \end{pmatrix} s + \begin{pmatrix} F(x^k) \\ \emptyset \end{pmatrix} \right\|_2 .$$

Neue Annäherung: $x^{k+1} = x^k + s^k$

Großer Vorteil: die Matrix $\begin{pmatrix} F'(x^k) \\ \mu I \end{pmatrix}$ hat *immer vollen Rang.*

Bemerkungen

- Für die Korrektur s^k gilt
$$\|s^k\|_2 \leq \frac{\|F(x^k)\|_2}{\mu},$$
d.h. man kann durch eine geeignete Wahl von μ eine "zu große" Korrektur s^k vermeiden.

- Wahl der Korrektur in der Praxis heuristisch
  - basierend auf Residuum $\|F(x^k)\|_2^2 - \|F(x^k + s^k)\|_2^2$
  - algebraisch (Quotientenregel)

- Levenberg-Marquardt-Verfahren kann auch als Fixpunktiteration formuliert werden
$$\begin{aligned}\Phi_\mu(x) &= x - [F'(x)^T F'(x) + \mu^2 I]^{-1} F'(x)^T F(x) \\ &= x - [F'(x)^T F'(x) + \mu^2 I]^{-1} \nabla \phi(x).\end{aligned}$$

Zusammenfassung

Algorithmus 6.10 (Levenberg-Marquardt)

Wähle Startwert x^0 und Anfangswert für den Parameter μ.

Für $k = 0, 1, 2, \dots$:

1. Berechne $F(x^k)$, $F'(x^k)$
2. Löse das lineare Ausgleichsproblem

$$s^k = \arg \min_{s \in \mathbb{R}^n} \left\| \begin{pmatrix} F'(x^k) \\ \mu I \end{pmatrix} s + \begin{pmatrix} F(x^k) \\ \emptyset \end{pmatrix} \right\|_2 .$$

3. Teste, ob die Korrektur s^k akzeptabel ist. Wenn nein, dann wird μ angepaßt und Schritt 2 wiederholt.
   Wenn ja, dann:
4. Setze $x^{k+1} = x^k + s^k$.