Numerische Mathematik für Maschinenbauer Nichtlineare Ausgleichsrechnung

A. Reusken

K.-H. Brakhage, Saskia Dietze, Thomas Jankuhn

Institut für Geometrie und Praktische Mathematik
RWTH Aachen

Sommersemester 2018

Heute in der Vorlesung

Themen:

Dahmen & Reusken Kap 6.1-6.3

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

Was Sie mitnehmen sollten:

- ► Wie ist die Problemstellung bei einem nichtlinearen Ausgleichsproblem
- ► Wie funktioniert das Gauß-Newton-Verfahren
- ► Wie funktioniert das Levenberg-Marquardt-Verfahren
- ► Wichtige (Konvergenz-)Eigenschaften dieser Methoden

Satz 5.31.

Annahmen:

ightharpoonup Lipschitz-stetig auf Ω mit einer Konstanten γ

$$||f'(x) - f'(y)|| \le \gamma ||x - y||, \quad x, y \in \Omega.$$

Ein solches γ existiert, wenn f zweimal stetig differenzierbar ist.

Zur Erinnerung: Lineares Ausgleichsproblem (Beispiel 4.2.)

In der Fourieranalyse wird eine T-periodische Funktion f durch eine Linearkombination der T-periodischen trigonometrischen Polynome

$$1, \cos(ct), \sin(ct), \cos(2ct), \sin(2ct), \dots, \cos(Nct), \sin(Nct)$$

mit $c:=rac{2\,\pi}{T}$ in der Form

$$g_N(t) = rac{1}{2} \, lpha_0 + \sum_{k=1}^N \left(lpha_k \, \cos(k \, c \, t) + eta_k \, \sin(k \, c \, t)
ight)$$

approximiert.

Zur Erinnerung: Lineares Ausgleichsproblem (Beispiel 4.2.)

Annahme:

Nicht f, sondern nur eine Reihe vom Meßdaten

$$b_i \approx f(t_i), \quad 0 < t_1 < t_2 < \dots < t_m < T,$$

ist bekannt, wobei m > 2N + 1.

Daraus ergibt sich der

Ansatz zur Bestimmung der Koeffizienten

$$x = (\alpha_0, \alpha_1, \beta_1, \alpha_2, \beta_2, \dots, \alpha_N, \beta_N)^T$$
:

$$x^* = rg\min_{x \in \mathbb{R}^{2\,N+1}} \sum_{i=1}^m \left(g_N(t_i) - b_i
ight)^2.$$

Lineares vs. nichtlineares Ausgleichsproblem

Definition

Zu gegebenen $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ und $b \in \mathbb{R}^m$, bestimme $x^* \in \mathbb{R}^n$, für das

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

gilt. Diese Problemstellung heißt das lineare Ausgleichsproblem.

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...

Differentialgleichung einer gedämpften Schwingung:

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

mit Masse m, Dämpfungskonstante b und Federkonstante D.

Lösungen haben die nichtlineare Form:

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

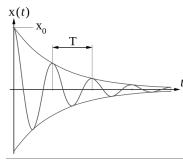
wobei:

$$u_0 \longrightarrow \mathsf{Anfangswert}$$

$$arphi_0 \longrightarrow \mathsf{Nullphasenwinkel}$$

$$\delta \longrightarrow \mathsf{Abklingkonstante}$$

 $\omega_d \longrightarrow {\sf Eigenkreisfrequenz}$



Quelle: wikipedia

Einleitung

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

IGPM, RWTH Aachen

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

mit Parametern x_1, \ldots, x_4 .

Gesucht:

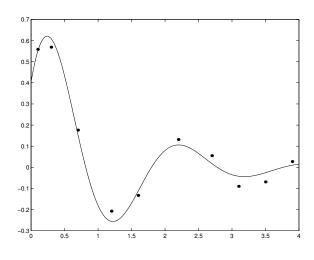
Parameter
$$x_1,\ldots,x_4$$
, so dass die Summe der Fehlerquadrate $\sum\limits_{i=0}^{10}\left(x_1\,e^{-x_2\,t_i}\,\sin(x_3\,t_i+x_4)-b_i
ight)^2=\|F(x)\|_2^2$

minimal wird. Hierbei ist $F: \mathbb{R}^4 \to \mathbb{R}^{10}$ nicht linear in x_2, x_3, x_4 definiert

$$F_i(x) = F_i(x_1, x_2, x_3, x_4)$$

 $= x_1 e^{-x_2 t_i} \sin(x_3 t_i + x_4) - b_i, i = 1, \dots, 10.$ Numerische Mathematik

Berechnete Lösung des nichtlinearen Ausgleichsproblems:



Definition

Definiert man allgemein die Abbildung (m>n)

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

kann das nichtlineare Ausgleichsproblem wie folgt formuliert werden:

Nichtlineares Ausgleichsproblem

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

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

oder, äquivalent,

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

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

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, wenn die folgenden zwei Bedingungen erfüllt sind:

Levenberg-Marquardt-Verfahren

- 1. $\nabla \phi(x^*) = 0$ (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

$$abla \phi(x) = F'(x)^T F(x),$$

$$\phi''(x) = F'(x)^T F'(x) + \sum_{i=1}^m F_i(x) F''_i(x),$$

mit Jacobi-Matrix $F'(x) \in \mathbb{R}^{m \times n}$ und Hesse-Matrizen $F_i''(x) := \left(\frac{\partial^2 F_i(x)}{\partial x_j \partial x_k}\right)_{1 \leq i,k \leq n} \in \mathbb{R}^{n \times n}$

Das Gauß-Newton-Verfahren

Nichtlineares Ausgleichsproblem (lokal)

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

$$x^* = \arg\min_{x \in U} \|F(x)\|_2.$$

Ansatz:

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

Zur Erinnerung:

ullet Wir bezeichnen die Lösung am Iterationsschritt k mit $x^k=(x_1^k,\ldots,x_n^k)^T\in\mathbb{R}^n.$

► Taylor-Entwicklung

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

Das Gauß-Newton-Verfahren

Ansatz:

Einleitung

Ersetze F(x) in $\min_{x \in U} \|F(x)\|_2$, durch lineare Approximation

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

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

Finde
$$s^k \in \mathbb{R}^n$$
, so dass

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

Anschließend berechnen wir $x^{k+1} = x^k + s^k$

Bei $U
eq \mathbb{R}^n$ liegt ein lokales, ansonsten ein globales Problem vor.

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 , so dass

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

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

Beachte

- Schritt 2 erfordert die Lösung eines linearen Ausgleichsproblems (Normalgleichung, QR-Zerlegung)
- Falls F'(x) nicht vollen Rang hat, hat das Ausgleichsproblem keine eindeutige Lösung.

Bemerkungen

- "Analogie" nichtlineare Gleichungssysteme.
- lacktriangleright In einem kritischen Punkt x^* von ϕ muss die Ableitung

$$\nabla \phi(x) = F'(x)^T F(x)$$

gleich Null $\in \mathbb{R}^{m \times n}$ sein.

Als Abbruchkriterium für das Verfahren wird daher

$$||F'(x^k)^T F(x^k)||_2 \le \varepsilon$$

häufig benutzt, wobei ε eine vorgegeben Toleranz ist.

- ▶ Der Erfolg des Gauß-Newton-Verfahrens hängt von der Wahl des Startwerts ab (vgl. Newton-Verfahren).
- ▶ Die Bedingung Rang(F'(x)) = n kann man weglassen, wenn der Zusatz "mit minimaler 2-Norm" aufgenommen wird.

Analyse der Gauß-Newton-Methode

Sei x^* ein kritischer Punkt von ϕ , der in einer Umgebung U eindeutig ist.

Annahme:

$$\operatorname{Rang}(F'(x)) = n$$
 für alle $x \in U$.

Für $x^k \in U$ hat das lineare Ausgleichsproblem die eindeutige Lösung

$$s^k = -[F'(x^k)^T F'(x^k)]^{-1} F'(x^k)^T F(x^k)$$

Levenberg-Marquardt-Verfahren

Analyse der Gauß-Newton-Methode

Gauß-Newton-Verfahren

Deshalb gilt für die Gauß-Newton-Iteration:

$$\begin{split} x^{k+1} &= x^k - [F'(x^k)^T \, F'(x^k)]^{-1} \, F'(x^k)^T \, F(x^k) \\ &= x^k - [F'(x^k)^T \, F'(x^k)]^{-1} \, \nabla \phi(x^k) \\ &= \Phi(x^k) \; , \end{split}$$

mit

Einleitung

$$\Phi(x) := x - [F'(x)^T F'(x)]^{-1} \nabla \phi(x) .$$

Es gilt:

$$x = \Phi(x) \Leftrightarrow
abla \phi(x) = 0 \Leftrightarrow x = x^*.$$

Die Gauß-Newton-Methode ist also eine Fixpunktiteration.

Zusammenfassung

Einleitung

Lösen Sie das nichtlineare Ausgleichsproblem

$$x^* = \arg\min_{x \in [0, 2\pi]} \|F(x)\|_2,$$

wobei

$$F(x) := egin{pmatrix} a+r\cos(x)\ r\sin(x) \end{pmatrix}, ext{ mit } a>r>0.$$

► Für die Jacobi-Matrix erhält man

$$F'(x) = r \left(rac{-\sin(x)}{\cos(x)}
ight), \quad F'(x)^T \, F'(x) = r^2.$$

► Außerdem ergibt sich

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

IGPM, RWTH Aachen

und damit

$$\nabla \phi(x) = -a \, r \, \sin(x).$$

Numerische Mathematik

▶ Für die Iterationsfunktion zu F erhält man schließlich

$$\Phi(x) = x - (F'(x)^T F'(x))^{-1} \nabla \phi(x^k)$$
$$= x + \frac{a}{r} \sin(x)$$

- \blacktriangleright Es gibt zwei kritische Punkte von ϕ $x^* = 0$ (lokales Maximum), $x^* = \pi$ (lokales Minimum).
- ▶ In den kritischen Punkten $x^* = 0$, $x^* = \pi$ gilt $|\Phi'(x^*)| = \left|1 + rac{a}{r}\cos(x^*)
 ight|.$

IGPM, RWTH Aachen

und damit

$$|\Phi'(x^*)|=rac{a+r}{r}>1$$
 für $x^*=0$ (lokales Max) $|\Phi'(x^*)|=rac{a-r}{r}=rac{a}{r}-1$ für $x^*=\pi$ (lokales Min)

Numerische Mathematik

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 < 2 r),

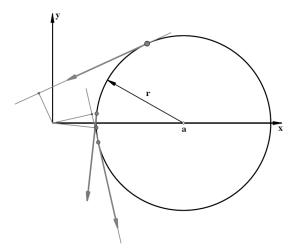
Falls a=r liegt sogar quadratische Konvergenz vor.

oder

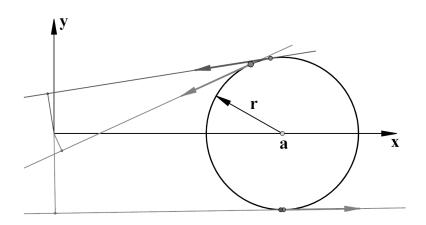
3. das lokale Minimum ist auch abstoßend (wenn a > 2r).

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

Konvergenter Fall



Divergenter Fall



Folgerung 6.6.

Für die allgemeine Gauß-Newton-Iterationsfunktion Φ gilt

$$\|\Phi'(x^*)\|_A =
ho(K) \|F(x^*)\|_2 ,$$

 $\|\Phi'(x^*)\| \ge
ho(K) \|F(x^*)\|_2 ,$

mit

$$K := A^{-1} \left(\sum_{i=1}^m rac{F_i(x^*)}{\|F(x^*)\|_2} F_i''(x^*)
ight) A^{-1}$$

für jede Operatornorm $\|\cdot\|$.

Hieraus kann man folgendes schließen:

Im Normalfall ist $F(x^*) \neq 0$, $K \neq 0$ und deshalb $\Phi'(x^*) \neq 0$.

Falls die Gauß-Newton-Methode konvergiert, ist die Konvergenz im allgemeinen nicht schneller als linear.

Folgerung 6.6.

Wenn der kritische Punkt x^* ein lokales Maximum oder ein Sattelpunkt ist, gilt

$$\rho(K) \|F(x^*)\|_2 \ge 1$$

und deshalb

$$\|\Phi'(x^*)\| \ge 1$$

für jede Operatornorm $\|\cdot\|$.

Das Verfahren bewahrt uns also davor, einen "falschen" kritischen Punkt zu finden.

Beachte

Solche kritischen Punkte sind für das Gauß-Newton-Verfahren also abstoßend, was günstig ist, weil ein (lokales) Minimum gesucht wird.

Die Größe $\rho(K) \|F(x^*)\|_2$ ist entscheidend für die lokale Konvergenz des Gauß-Newton-Verfahrens.

Für ein lokales Minimum x^* der Funktion ϕ ist die lokale Konvergenz des Gauß-Newton-Verfahrens gesichert, falls die Bedingung

$$\rho(K) \|F(x^*)\|_2 < 1$$

erfüllt ist.

Sei x^* ein lokales Minimum von ϕ , wofür gilt:

$$\rho(K) \|F(x^*)\|_2 > 1.$$

Dann ist $\|\Phi'(x^*)\| > 1$ für jede Operatornorm $\|\cdot\|$.

Ein lokales Minimum von ϕ kann für die Gauß-Newton-Methode also abstoßend sein.

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

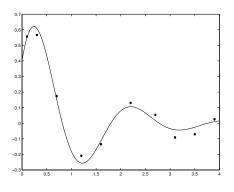
k	$ F(x^k) _2$	$\ \nabla\phi(x^k)\ _2$	$\ \nabla \phi(x^k)\ _2 / \ \nabla \phi(x^{k-1})\ _2$
0	0.35035332090089	1.45e-01	-
1	0.34106434131008	1.33e-01	0.91
2	0.22208131421995	4.88e-02	0.37
3	0.16802866234936	1.02e-01	2.08
4	0.09190056278958	1.80e-01	0.18
5	0.08902339976144	1.18e-03	0.07
6	0.08895515308450	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.

Die berechneten Parameterwerte x^* aus dem 12 Iterationsschritt liefern die Lösung

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

die im folgenden Plot dargestellt ist.



IGPM, RWTH Aachen

Levenberg-Marquardt-Verfahren

Zur Erinnerung:

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

$$F'(x^k)^T F'(x^k) s^k = -F'(x^k)^T F(x^k)$$

Idee:

Einführung einer "Regularisierung"

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

wobei $\mu > 0$ ein zu wählender Parameter ist.

Bemerkungen

Lineares Ausgleichsproblem (Gauß-Newton)

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

wird ersetzt durch

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

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 $\binom{F'(x^k)}{uI}$ hat immer vollen Rang.

Bemerkungen

Weitere günstige Eigenschaft

Es gilt

$$||s^k||_2 \le \frac{||F(x^k)||_2}{\mu},$$

d.h. μ "groß" \Rightarrow Korrektur s^k "klein".

Die Methode erlaubt eine Dämpfungsstrategie.

- ► Wahl der Korrektur in der Praxis heuristisch
 - lacksquare basierend auf Residuum $\|F(x^k)\|_2^2 \|F(x^k+s^k)\|_2^2$
- ► Levenberg-Marquardt-Verfahren kann auch als Fixpunktiteration formuliert werden

$$\Phi_{\mu}(x) = x - [F'(x)^T F'(x) + \mu^2 I]^{-1} \nabla \phi(x).$$

Konvergenzordnung wie bei der Gauß-Newton-Methode.

Geeignete Wahl von μ : Einzugsbereich wird vergrößert.

Levenberg-Marquardt-Methode

Algorithmus 6.10. (Levenberg-Marquardt)

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

Für $k = 0, 1, 2, \ldots$:

- 1. Berechne $oldsymbol{F}(x^k),\,oldsymbol{F'}(x^k)$
- 2. Löse das lineare Ausgleichsproblem

$$s^k = rg \min_{s \in \mathbb{R}^n} \left\| inom{F'(x^k)}{\mu I} \ s + inom{F(x^k)}{\emptyset}
ight\|_2.$$

3. Teste, ob die Korrektur s^k akzeptabel ist. Wenn nein, dann

wird μ vergrößert und Schritt 2 wiederholt.

- 4. Setze $x^{k+1} = x^k + s^k$.
- 5. Sind bestimmte Kriterien erfüllt sind, wird μ verkleinert.

Zusammenfassung

- Beim Gauß-Newton-Verfahren wird das nichtlineare Ausgleichsproblem über eine Folge linearer Ausgleichsprobleme gelöst.
- Lokale Konvergenz im allgemeinen nur 1. Ordnung, falls $F(x^*) = 0$, sogar von 2. Ordnung.
- ► Es kann lokale Divergenz auftreten.
- lacktriangle Matrix $F'(x^k)$ kann Rang < n haben.
- ► Bei Levenberg-Marquardt:
 - ightharpoonup Parameter μ zur Vergrößerung des Einzugbereichs.
 - lacksquare Matrix $inom{F'(x^k)}{\mu I}$ hat $\mathsf{Rang} = n.$

Verständnisfragen

Es sei $F: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ mit m > n.

Wir betrachten das (nichtlineare) Ausgleichsproblem:

Bestimme $x^* \in \mathbb{R}^n$ so, dass $x^* = rg \min_{x \in \mathbb{R}^n} \|F(x)\|_2$.

- f Die Gauß-Newton-Methode ist immer konvergent in einer hinreichend kleinen Umgebung von x^* .
- Beim Levenberg-Marquardt-Verfahren hat die Matrix des linearisierten Ausgleichsproblems in jedem Schritt stets vollen Rang.
- Die Gauß-Newton-Methode kann man als Fixpunktiteration darstellen.
- f Die Konvergenzordnung der Gauß-Newton-Methode ist in der Regel 2.

	linear	\rightarrow	nichtlinear	Verfahren
Gleichung	$A \in \mathbb{R}^{n \times n}, \ x, b \in \mathbb{R}^n$		$f: \mathbb{R}^n o \mathbb{R}^n$	$f(x) \approx f(x^k) + f'(x^k) (x - x^k) \stackrel{!}{=} 0$
	A x = b	\rightarrow		Newton-Verfahren:
	⇔	7	f(x) = 0	$f'(x^k) s^k = -f(x^k)$
	f(x) = A x - b = 0			$x^{k+1} = x^k + s^k$
+	↓		↓	+
Ausgleich	$A \in \mathbb{R}^{m \times n}, \ x \in \mathbb{R}^n, \ b \in \mathbb{R}^m$	\rightarrow	$F: \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^n$	$F(x) \approx F(x^k) + F'(x^k)(x - x^k)$
	$\ Ax-b\ \to \min$		globales/lokales Problem	Gauß-Newton-Verfahren
	genauer		$x^* = \arg\min_{x \in \mathbb{R}^n} \ F(x)\ $	$s^k = \arg\min_{s \in \mathbb{R}^n} \ F'(x^k) s + F(x^k)\ $
	$x^* = \arg\min_{x \in \mathbb{R}^n} \ A x - b\ $		$x^* = \arg\min_{x \in U} \ F(x)\ $	$x^{k+1} = x^k + s^k$

Beim Levenberg-Marquardt-Verfahren wird an Stelle des $s^{m{k}}$'s des Gauß-Newton-Verfahren

$$s^k = \arg\min_{s \in \mathbb{R}^n} \left\| egin{pmatrix} F'(x^k) \\ \mu I \end{pmatrix} s + egin{pmatrix} F(x^k) \\ 0 \end{pmatrix} \right\|$$

verwendet.

Einleitung