4 Ausgleichsrechnung

4.1 Lineare Ausgleichsrechnung

▷ K. Nipp / D. Stoffer [1], Kap. 5, Par. 9.2

4.2 Nichtlineare Ausgleichsprobleme

Gegeben seien die *Fehlergleichungen*

$$\underline{f}(x) - \underline{c} = \underline{r} \tag{4.1}$$

bzw. $f_i(x_1, \dots, x_n) - c_i = r_i,\ i = 1, \dots, m$, mit $m \geq n$, wobei c_i die Messwerte und r_i die Residuen sind.

Gesucht ist $x \in \mathbb{R}^n$ so, dass $\|\underline{r}\|_2$ minimal ist.

Eine notwendige Bedingung damit

$$S(x) := \|\underline{r}\|_2{}^2 = \underline{r}^T\underline{r} = \sum_{i=1}^{m} [f_i(x_1, \dots, x_n) - c_i]^2$$

minimal ist, ist

$$\frac{1}{2}\frac{\partial S(x)}{\partial x_j} = \sum_{i=1}^{m} \underbrace{[f_i(x_1, \dots, x_n) - c_i]}_{=r_i} \underbrace{\frac{\partial f_i(x_1, \dots, x_n)}{\partial x_j}}_{=:a_{ij}(x)} = 0,\ j = 1, \dots, n\,,$$

bzw.

$$\sum_{i=1}^{m} (A^T(x))_{ji}\, r_i = 0 \tag{4.2}$$

bzw.

$$A^T(x)\underline{f}(x) = A^T(x)\underline{c}\,.$$

Dieses System von n nichtlinearen Gleichungen für $x_1, \dots, x_n$ (Normalgleichungen) ist schwierig zu lösen. Der Zugang über die Normalgleichungen ist wie im linearen Fall nicht geeignet. Besser ist wieder der direkte Zugang über die Fehlergleichungen. Wir stellen zwei Verfahren vor.

A) Gauss-Newton-Methode

Sei eine Näherung x^0 bekannt. Wir verwenden den Korrekturansatz $x = x^0 + \xi$.

Linearisierung der Fehlergleichungen:
Die Taylorentwicklung

$$\underline{f}(x) = \underline{f}(x^0 + \xi) = \underbrace{\underline{f}(x^0)}_{=:\underline{f}^0} + \underbrace{\frac{\partial \underline{f}}{\partial x}(x^0)}_{=:A^0}\, \xi + \text{h.o.t.},$$

wobei $A^0 \in \mathbb{R}^{m\times n}$ die Jacobi-Matrix an der Stelle x_0 ist, eingesetzt in die Fehlergleichungen (4.1) und das Weglassen der h.o.t. (Terme höherer Ordnung in ξ) ergibt die *linearisierten Fehlergleichungen*

$$A^0\xi + \underbrace{\underline{f}^0 - \underline{c}}_{=:\underline{d}^0} = \underline{\rho}^0\,.$$

Das ist ein *lineares* Ausgleichsproblem, welches mit einer der üblichen Methoden gelöst werden kann. Dies ergibt ein ξ^1 und damit die 'verbesserte' Näherung $x^1 = x^0 + \xi^1$. Wiederholt man diesen Schritt für $k = 2, \ldots, \max$, bis das Abbruchkriterium $\|\xi^k\| \leq TOL$ erfüllt ist, erhält man eine Approximation für das nichtlineare Ausgleichsproblem (4.1), da dann $\underline{\rho}^k \cong \underline{d}^k = \underline{r}^k$ gilt.

Bemerkung:

- Bei einem ungeeignetem Startwert x^0 brauchen die Iterierten x^k *nicht* gegen die gesuchte Lösung $\widetilde{x}$ der Fehlergleichungen zu konvergieren.
- Die Konvergenz der Iterierten x^k gegen $\widetilde{x}$ kann erzwungen werden, indem $S(x^k) < S(x^{k-1}),\ k = 1, 2, \ldots$, gefordert wird (*Minimierungsverfahren*).

B) Minimierungsverfahren

Wunsch:

$$S(x^k) < S(x^{k-1}), \qquad k = 1, 2, \ldots.$$

Der Gradient von $S(x)$, grad $S(x) = \left(\frac{\partial S(x)}{\partial x_1}, \ldots, \frac{\partial S(x)}{\partial x_n}\right)^T$, zeigt in die Richtung der stärksten Zunahme von $S(x)$ im Punkt x. Es gilt (vergl. (4.2)):

$$-\text{grad}\, S\left(x^{k-1}\right) = -2\left[A^{k-1}\right]^T \underline{r}^{k-1} =: v^k.$$

Wir suchen das Minimum in Richtung der stärksten Abnahme:

$$S\left(x^k\right) = \min_t S\left(x^{k-1} + t\, v^k\right).$$

Dieses Verfahren heisst *Methode des steilsten Abstiegs*. Der optimale Wert von t kann z.B. näherungsweise mit einem Suchverfahren gefunden werden.

Problem: In der Regel konvergieren die Iterierten x^k sehr langsam gegen das Minimum von S.

Eine *Verbesserung* erreicht man, indem man die Gauss-Newton-Methode zu einem Minimierungsalgorithmus ausbaut.

Es gilt: ξ^{k+1} ist eine Abstiegsrichtung für die Näherung x^k, solange grad $S(x^k) \neq 0$ ist.
Beweis: siehe H.R. Schwarz [2], p. 369.

Algorithmus: (*Gauss-Newton-Methode mit Minimierung*)

$$x^0;\, TOL,\, \overline{TOL}$$

Für $k = 0, 1, \dots$

Berechne ξ^{k+1} mit einem Gauss-Newton-Schritt und prüfe für die Werte $t = 1, \frac{1}{2}, \frac{1}{4}, \dots$, ob für

$$y := x^k + t\,\xi^{k+1}$$

die Bedingung $S(y) < S(x^k)$ erfüllt ist (Abbruch, falls $|S(y) - S(x^k)| < \overline{TOL}$). Sobald dies gilt, setze

$$x^{k+1} := y\,.$$

Abbruchkriterium: $\|x^{k+1} - x^k\| \leq \|x^{k+1}\| \cdot TOL + TOL$

Bemerkungen:

- Mit dieser Methode ist die Konvergenz der Folge x^k sichergestellt. Bei ungünstigem x^0 kann die Konvergenz am Anfang langsam sein, in der Nähe des gesuchten x ist sie aber 'fast' quadratisch.

- Effizienter ist die *Methode von Marquardt* aufgrund ihrer günstigeren Abstiegsrichtung (siehe H.R Schwarz [2], p.370).