Icke-linjär minsta-kvadratproblem

Ett icke-linjärt minsta-kvadrat-problem är ett optimeringsproblem utan bivillkor på formen

$$\min_x f(x) = \sum_{i=1}^{m} f_i(x)^2,$$

där objektfunktionen definieras via externa funktioner $\{f_i(x)\}$.

Problemet kallas "minsta-kvadrat" därför att vi minimerar summan av kvadraten på funktionerna.

Icke-linjär minsta-kvadrat parameterestimering

I ett parameterestimeringsproblem motsvarar funktionerna $f_i(x)$ skillnaden (residualen) mellan en basfunktion och ett mätvärde. Studera exempelvis datamängden

$$\begin{array}{ccccccc} t_i & : & 1 & 2 & 4 & 5 & 8 \\ y_i & : & 3 & 4 & 6 & 11 & 20 \end{array}$$

där t_i är tiden i år och y_i hundratal (antiloper). Om vi antar att dessa mätvärden följer ett exponentialförlopp skulle basfunktionen t ex bli $g(t) = x_1 e^{x_2 t}$ och residualerna

$$f_i(x) = g(t_i) - y_i = x_1 e^{x_2 t_i} - y_i.$$

Icke-linjära minsta-kvadrat-parameterestimeringsproblem är värda att studera av flera skäl, framför allt därför att de är så vanliga, men också p g a av deras speciella form.

Icke-linjär minsta-kvadrat-parameterestimering, forts.

Vi kommer att skriva problemet som

$$\min_x f(x) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m} f_i(x)^2 \equiv \frac{1}{2}F(x)^T F(x),$$

där F är en vektorvärd funktion

$$F(x) = [f_1(x)\ f_2(x)\ \ldots\ f_m(x)]^T.$$

Gradienten $\nabla f(x)$ går att härleda m h a kedjeregeln

$$\nabla f(x) = \nabla F(x) F(x) = J(x)^T F(x)$$

där $J(x) = \nabla F(x)^T$ är *jacobianen* till $F(x)$.

Detsamma gäller hessianen

$$\begin{array}{rcccc} \nabla^2 f(x) & = & \nabla F(x) \nabla F(x)^T & + & \sum_{i=1}^{m} f_i(x) \nabla^2 f_i(x) \\ & = & J(x)^T J(x) & + & Q(x). \end{array}$$

Icke-linjär minsta-kvadrat-parameterestimering, forts.

Notera att gradienten $\nabla f(x_*) = 0$ i ett av två fall:

- Då $F(x_*) = 0 \Rightarrow f(x_*) = 0$, vilket kallas att problemet har *nollresidual*. Då är dessutom hessianen

  $$\nabla^2 f(x_*) = J(x_*)^T J(x_*)$$

  positivt semi-definit. Om $J(x_*)$ har full rang är dessutom $\nabla^2 f(x_*)$ positivt definit. Skulle $J(x_*)$ vara rangdefekt sägs problemet vara *överparameteriserat*.

- Då $J(x)^T F(x) = 0$, dvs residualvektorn $F(x)$ är ortogonal mot gradientplanet som spänns upp av $J(x)$.

Icke-linjär minsta-kvadrat-parameterestimering, forts.

Notera att hessianen

$$\begin{array}{rcccc} \nabla^2 f(x) & = & \nabla F(x)\nabla F(x)^T & + & \sum_{i=1}^m f_i(x)\nabla^2 f_i(x) \\ & = & J(x)^T J(x) & + & Q(x). \end{array}$$

är en summa av två komponeneter, en med förstaderivateinformation och en med andraderivateinformation.

Om problemet har nollresidual kommer termen $Q(x)$ att vara nära noll nära lösningen. En metod som använder approximationen $Q(x) = 0$ kallas *Gauss-Newtons* metod och bestämmer sökriktningen som lösningen till Newtons ekvation

$$\nabla^2 f(x)p = -\nabla f(x)$$

med hessianen approximerad med $J(x)^T J(x)$:

$$J(x)^T J(x)p = -J(x)^T F(x).$$

Konvergens för Gauss-Newtons metod

Om $F(x_*) = 0$ är approximationen $Q(x) \approx 0$ bra, och Gauss-Newtons metod kommer att uppföra sig som Newtons metod nära lösningen, dvs konvergera snabbt om $J(x_*)$ har full rang. Detta utan kostnaden att beräkna andraderivatorna $\nabla^2 f_i(x)$.

Om $F(x_*)$ är "stor" och/eller krökningarna $\nabla^2 f_i(x)$ är stora, blir approximationen $Q(x) \approx 0$ dålig, och Gauss-Newtons metod kommer att konvergera långsammare än Newtons metod.

Levenberg-Marquardt

Andra metoder använder andra approximationer av $Q(x)$. En av de äldsta och mest använda i praktiken är

$$Q(x) \approx \lambda I,$$

där $\lambda \geq 0$ är en skalär. På detta vis fås sökriktningen genom att lösa det linjära systemet

$$(J(x)^T J(x) + \lambda I)p = -J(x)^T F(x).$$

Denna version av Gauss-Newtons metod kallas för *Levenberg-Marquardts* metod, och används ofta som trust-region-metod.

Både Gauss-Newton och Levenberg-Marquardt använder approxiationer av hessianen $\nabla^2 f(x)$. Om dessa approximationer är dåliga, kommer de att konvergera linjärt, dvs sämre än Newtons metod.

Annan härledning av Gauss-Newtons metod

Gauss-Newtons metod går att härleda på ett sätt till:

Om vi studerar det (typiskt överbestämda) linjära problemet

$$\min_p \|J(x)p + F(x)\|^2 = \|J(x)p - (-F(x))\|^2$$

så blir lösningen p lika med lösningen till normalekvationerna

$$p = -(J(x)^T J(x))^{-1} J(x)^T F(x),$$

vilket är sökriktningen i Gauss-Newtons metod. Denna beräknas naturligtvis med hjälp av lämplig faktorisering (QR eller SVD) *utan* att matrisen $J(x)^T J(x)$ bildas.

Statistisk tolkning av residualerna

Om residualerna tolkas statistiskt som "fel", dvs vi har en modell

$$y_i = x_1 e^{x_2 t_i} + \varepsilon_i$$

och felen ε_i antas vara oberoende normalfördelade $\in N(0, \sigma^2)$ blir våra uppskattade parameterar de bästa tänkbara ("maximum likelihood") givet våra mätvärden. Detta gör det möjligt att säga saker om konfidensintervall, göra hypotesprövning, etc.

Den informationen fås ur varians-kovariansmatrisen

$$D = \sigma^2 (\nabla^2 f(x_*))^{-1},$$

där diagonalelementen D_{ii} motsvarar variansen hos x_i och D_{ij} motsvarar kovariansen mellan x_i och x_j.

Ofta används approximationen $Q(x_*) = 0$, vilket gör att konfidensintervall m.m. också blir approximativa.

Ortogonal regression

När vi löser

$$\min_x \sum_{i=1}^{m} f_i(x)^2, \tag{1}$$

där $f_i(x) = g(t_i) - y_i$ är skillnaden mellan vår modell och våra mätvärden, så minimerar vi kvadraten på det *vertikala* avståndet. I andra sammanhang, t ex om vi antar att vi har fel även i den oberoende variabeln t_i, kan det vara rimligt att i stället minimera det *ortogonala* avståndet mellan vår modellfunktion och våra mätvärden.

Ortogonal regression, forts.

Det kan beskrivas som att vi löser

$$\min_{x,\delta} f(x) = \sum_{i=1}^{m} f_i(x; t_i + \delta_i)^2 + \|\delta\|^2, \tag{2}$$

där δ_i är felet i t_i och $f_i(x; t_i + \delta_i) = g_i(t_i + \delta_i) - y_i$.

Detta kräver dock att vi skriver om våra optimeringsalgoritmer för att lösa problem (2) i stället för problem (1).

Ortogonal regression, forts.

Det är dock möjligt att använda våra algoritmer för problem (1) om vi i stället utökar om våra delfunktioner f_i:

För vårt testexempel

$$y = g(t) = x_1 e^{x_2 t}$$

introducerar vi en punkt $(s_i, g(s_i))$ på kurvan för varje mätpunkt (t_i, y_i).

Om vi låter vår delfunktion f_i bli

$$f_i = \begin{bmatrix} g(t_i) - y_i \\ s_i - t_i \end{bmatrix},$$

och formulerar om vårt minimeringsproblem

$$\begin{aligned} \min_x f(x) &= \sum_{i=1}^{m} f_i(x)^2 \\ &\Downarrow \\ \min_x f(x) &= \sum_{i=1}^{m} f_i^T(x) f_i(x) \end{aligned}$$

så får vi samma lösning.