



Programmierblatt 2.

Besprechungswoche: 03.11. – 07.11.2025

Wir wollen uns in diesem Blatt der numerischen Lösung von Ausgleichsproblemen widmen, welche im Allgemeinen benutzt werden, wenn man überbestimmte Probleme der Form

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) \approx \mathbf{y}$$

mit gegebener Funktion $\mathbf{f} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ und gegebenen Daten $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^m$ mit $m > n$ und unbekannten Parametern $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ betrachten möchte. Dabei sollen die unbekannten Parameter so bestimmt werden, dass das nichtlineare Ausgleichsproblem minimiert wird,

$$\|\mathbf{f}(\mathbf{x}) - \mathbf{y}\|_2 \rightarrow \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n}. \quad (1)$$

Beispielsweise genügt die Auslenkung eines gedämpften Federpendels der Beziehung

$$s(t) = e^{-\beta t} (s_0 \cos \omega t + (s_0 \beta + \dot{s}_0) \omega^{-1} \sin \omega t),$$

wobei die s_0 die Anfangsauslenkung, $\dot{s}_0$ die Anfangsgeschwindigkeit, β den Dämpfungsfaktor sowie $\omega = \sqrt{\omega_0^2 - \beta^2}$ die gedämpfte Schwingungsfrequenz bezeichne. Dabei hängt der Dämpfungsfaktor β vom Medium ab, in welchem die Masse schwingt. Ist die ungedämpfte Schwingungsfrequenz $\omega_0 \in \mathbb{R}$ bekannt, so kann man den Dämpfungsfaktor sowie die Anfangsauslenkung und die Anfangsgeschwindigkeit aus experimentellen Messungen $s_j \approx s(t_j)$, $j = 1, \dots, M$, rekonstruieren. Dafür definiert man $\mathbf{f} : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^M$ und $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^M$ durch

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) := \mathbf{f} \left(\begin{bmatrix} s_0 \\ \dot{s}_0 \\ \beta \end{bmatrix} \right) := \begin{bmatrix} e^{-\beta t_1} (s_0 \cos \omega t_1 + (s_0 \beta + \dot{s}_0) \omega^{-1} \sin \omega t_1) \\ \vdots \\ e^{-\beta t_M} (s_0 \cos \omega t_M + (s_0 \beta + \dot{s}_0) \omega^{-1} \sin \omega t_M) \end{bmatrix} \quad \text{und} \quad \mathbf{y} = \begin{bmatrix} s_1 \\ \vdots \\ s_M \end{bmatrix}$$

und löst für diese (1).

Für den Spezialfall $\beta = 0$ erhalten wir das ungedämpfte Federpendel, mit der Gleichung

$$s(t) = s_0 \cos \omega_0 t + \dot{s}_0 \omega_0^{-1} \sin \omega_0 t,$$

wobei s_0 die Anfangsauslenkung, $\dot{s}_0$ die Anfangsgeschwindigkeit und ω_0 die ungedämpfte Schwingungsfrequenz sind. Nehmen wir wieder an, dass die ungedämpfte Schwingungsfrequenz $\omega_0 \in \mathbb{R}$ bekannt ist, so kann man die Anfangsauslenkung und die Anfangsgeschwindigkeit aus experimentellen Messungen $s_j \approx s(t_j)$, $j = 1, \dots, M$, rekonstruieren. Dafür definieren wir $\mathbf{f} : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^M$, $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{M \times 2}$ und $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^M$ durch

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) := \mathbf{f} \left(\begin{bmatrix} s_0 \\ \dot{s}_0 \end{bmatrix} \right) := \mathbf{A} \begin{bmatrix} s_0 \\ \dot{s}_0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{A} := \begin{bmatrix} \cos \omega_0 t_1 & \omega_0^{-1} \sin \omega_0 t_1 \\ \vdots & \vdots \\ \cos \omega_0 t_M & \omega_0^{-1} \sin \omega_0 t_M \end{bmatrix} \quad \text{und} \quad \mathbf{y} = \begin{bmatrix} s_1 \\ \vdots \\ s_M \end{bmatrix}$$

und lösen damit (1). Das heisst wir haben in diesem Fall ein lineares Ausgleichsproblem zu minimieren,

$$\|\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_2 \rightarrow \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n}. \quad (2)$$

Lineares Ausgleichsproblem

Wir betrachten nun weiterführend zuerst das lineare Ausgleichsproblem (2). Dieses lässt sich entweder mit der *QR-Zerlegung* oder dem *CGLS-Verfahren* leicht lösen.

Aufgabe 1. Schreiben Sie eine Methode

```
function x = qrls(A, y),
```

welche die Lösung des linearen Ausgleichsproblems (2) mittels der QR-Zerlegung $A = QR$ durch $Rx = Q^T y$ berechnet (vgl. Einführung in die Numerik).

Hinweis. Verwenden Sie dafür die Routinen von MATLAB (*qr*-Funktion und **-Solver).

Aufgabe 2. Schreiben Sie eine Methode

```
function xs = cglsl(A, y, x0, tol, maxIter),
```

welche das CGLS-Verfahren gemäss Skript implementiert. Dabei geben Sie alle Iterationen der x_k als Spalten in der Matrix xs zurück.

Aufgabe 3. Laden Sie die Datei `prog02data.zip` herunter und testen Sie Ihre Implementierungen mit der enthaltenen Datei `data02_a03.mat`. Die Datei enthält die Spalten-Arrays t und s mit Werten

$$s_j \approx g_x(t_j) := \sum_{k=1}^8 x_k t_j^{k-1} \quad \text{für } j = 1, \dots, M$$

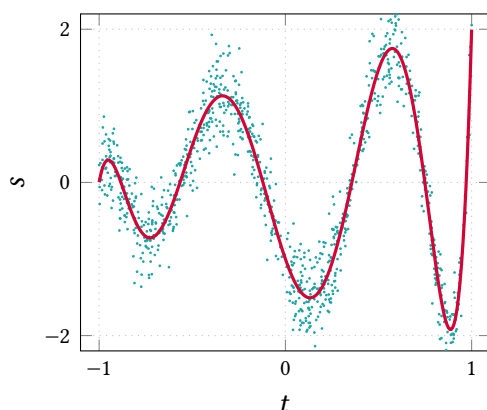
und einem geeigneten Parameter $x \in \mathbb{R}^8$. Bestimmen Sie den Parameter $x \in \mathbb{R}^8$ mit der QR-Zerlegung und auch dem CGLS-Verfahren; für das CGLS-Verfahren benutzen Sie die Werte $\text{tol} = 10^{-12}$, $\text{maxIter} = 25$ und $x_0 = [0 \ \dots \ 0]^T$. Stellen Sie die Messpunkte (t_j, s_j) sowie ihre Annäherung $(t, g_x(t))$ für $t \in [-1, 1]$ graphisch dar.

Hinweis. Sie sollten auf circa $(x_1, \dots, x_8) \approx (-1, -7, 18, 56, -48, -112, 32, 64)$ kommen.

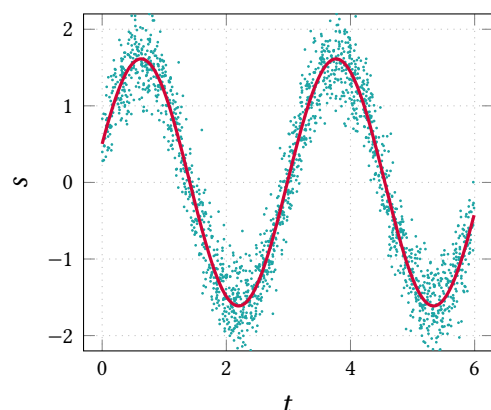
Aufgabe 4. In der Datei `data02_a04.mat` finden Sie Messungen der Auslenkungen s_j eines ungedämpften Federpendels zu den Zeiten t_j , $j = 1, \dots, M$. Bestimmen Sie die Anfangsauslenkung s_0 und die Anfangsgeschwindigkeit $\dot{s}_0$ mithilfe des CGLS-Verfahrens unter der Annahme, dass die ungedämpfte Schwingungsfrequenz $\omega_0 = 2$ ist. Benutzen Sie dabei $\text{tol} = 10^{-9}$, $\text{maxIter} = 20$ und $x_0 = [2 \ 1]^T$. Stellen Sie die Messpunkte (t_j, s_j) sowie ihre Annäherung graphisch dar.

Hinweis. Sie sollten auf circa $(s_0, \dot{s}_0) \approx (.5, 3)$ kommen.

Aufgabe 3



Aufgabe 4



Nichtlineares Ausgleichsproblem

Während das lineare Ausgleichsproblem (2) mittels einer QR-Zerlegung noch direkt gelöst werden kann, ist das für das nichtlineare Ausgleichsproblem (1) nicht mehr der Fall. Dieses kann in Allgemeinen daher nur iterativ gelöst werden. In der Vorlesung behandeln wir dafür das *Gauss-Newton*- sowie das *Levenberg-Marquardt-Verfahren*.

Im Levenberg-Marquardt-Verfahren müssen möglicherweise Optimierungsprobleme mit Nebenbedingungen gelöst werden. Ist $\mathbf{r}_k = \mathbf{y} - \mathbf{f}(\mathbf{x}_k)$ das Residuum im k -ten Schritt, dann suchen wir $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^n$, so dass

$$\|\mathbf{r}_k - \mathbf{f}'(\mathbf{x}_k)\mathbf{d}\|_2^2 = \min_{\mathbf{h} \in \mathbb{R}^n, \|\mathbf{h}\|_2 \leq \Delta} \|\mathbf{r}_k - \mathbf{f}'(\mathbf{x}_k)\mathbf{h}\|_2^2.$$

Liegt dabei das Minimum des Optimierungsproblems ohne Nebenbedingungen ausserhalb eines Kreises mit Radius Δ , muss das Minimum mit Nebenbedingungen aufgrund der Konvexität des Problems auf dem Rand des Kreises liegen. Solche Optimierungsprobleme mit Gleichheitsnebenbedingungen lassen sich mit der Methode der *Lagrange-Multiplikatoren* lösen. Iterativ lassen sich die Näherungen an den Lagrange-Multiplikator im k -ten Schritt mit dem *Hebden-Verfahren* berechnen. Für eine detaillierte Herleitung siehe [1].

Algorithmus Hebden-Verfahren

Input: $\mathbf{f}, \mathbf{f}', \mathbf{x}_k, \mathbf{y}$, Startwert $\lambda^{(0)} \in \mathbb{R}$, Nebenbedingung $\Delta \in \mathbb{R}$, Genauigkeit `tol`
Output: Näherungen an den Lagrange-Multiplikator λ_k

- 1: Setze $\mathbf{A} := \mathbf{f}'(\mathbf{x}_k)$, $\mathbf{b} := \mathbf{y} - \mathbf{f}(\mathbf{x}_k)$, $j := 0$
- 2: Setze $\mathbf{h} := (\mathbf{A}^\top \mathbf{A} + \lambda^{(j)} \mathbf{I})^{-1} \mathbf{A}^\top \mathbf{b}$
- 3: Setze $\mathbf{g} := (\mathbf{A}^\top \mathbf{A} + \lambda^{(j)} \mathbf{I})^{-1} \mathbf{h}$
- 4: Setze $\lambda^{(j+1)} := \lambda^{(j)} - \frac{\|\mathbf{h}\|_2^2 \frac{1 - \|\mathbf{h}\|_2 / \Delta}{\mathbf{h}^\top \mathbf{g}}}{\|\mathbf{h}\|_2^2}$
- 5: **if** $|\lambda^{(j+1)} - \lambda^{(j)}| < \text{tol}$ **then**
- 6: setze $\lambda_k := \lambda^{(j+1)}$
- 7: **break**;
- 8: **else**
- 9: erhöhe $j := j + 1$ und gehe nach 2.
- 10: **end if**

Aufgabe 5. Schreiben Sie eine Methode

```
function xs = GaussNewton(f, Df, x0, y, tol, maxIter),
```

welche das Gauss-Newton-Verfahren gemäss Skript implementiert. Dabei geben Sie alle Iterationen der $\mathbf{x}_k$ als Spalten in der Matrix `xs` zurück.

*Hinweis. Verwenden Sie, dass in MATLAB $\mathbf{x} = \mathbf{A} \backslash \mathbf{b}$ für überbestimmte Gleichungssysteme $\mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{b}$ stattdessen intern direkt die Normalengleichung $\mathbf{x} = (\mathbf{A}' * \mathbf{A}) \backslash \mathbf{A}' * \mathbf{b}$ mit der QR-Zerlegung löst.*

Aufgabe 6. Schreiben Sie eine Methode

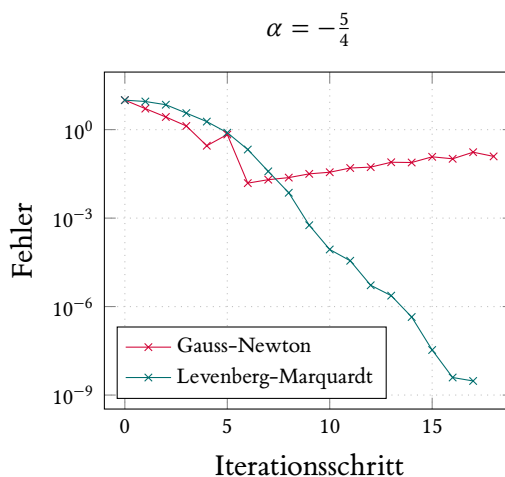
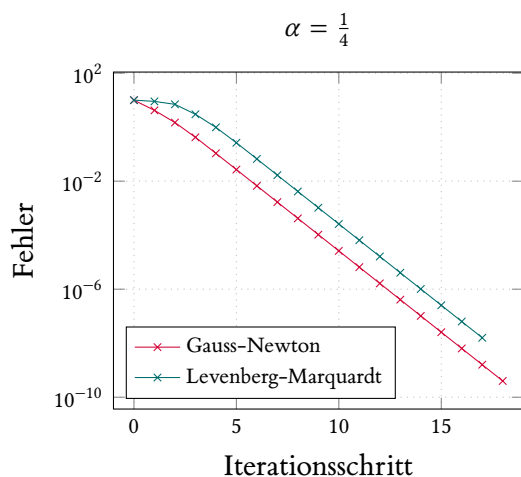
```
function xs = levenbergMarquardt(f, Df, x0, y, tol, maxIter, ...  
                                mus, Delta0),
```

welche das Levenberg-Marquardt-Verfahren gemäss Skript implementiert. Dabei geben Sie alle Iterationen der $\mathbf{x}_k$ als Spalten in der Matrix `xs` zurück. Berechnen Sie jeweils in jedem Schritt zuerst das Minimum ohne Nebenbedingung und dann, falls nötig, den Lagrange-Multiplikator λ_k mit dem Hebden-Verfahren (siehe oben) und damit das Minimum mit der Nebenbedingung. Setzen Sie den Lagrange-Multiplikator-Startwert für das Hebden-Verfahren jeweils als $\lambda^{(0)} = \Delta$.

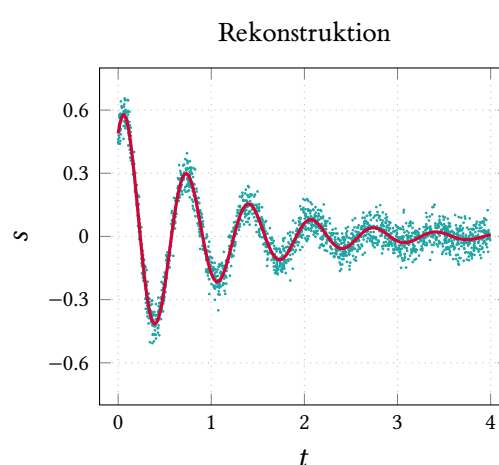
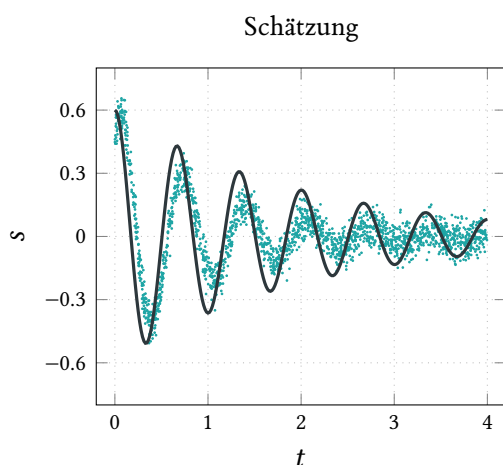
Aufgabe 7. Testen Sie Ihre Implementierungen des Gauss-Newton- respektive des Levenberg-Marquardt-Verfahrens mit den Parametern $\text{tol} = 10^{-9}$, $\text{maxIter} = 18$ sowie (für das Levenberg-Marquardt-Verfahren) $\mu^- = \frac{1}{4}$, $\mu^+ = \frac{1}{2}$ und $\Delta_0 = 1$ für das folgende Problem:

$$f_\alpha(x) := \begin{bmatrix} x \\ \alpha x^2 + x \end{bmatrix}, \quad y := \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix} \quad \text{mit Lösung } 0 = \arg \min_{x \in \mathbb{R}} \|f_\alpha(x) - y\|_2 \text{ wenn } \alpha < \frac{1}{2}.$$

Dabei wählen Sie einmal $\alpha = \frac{1}{4}$ und einmal $\alpha = -\frac{5}{4}$. Als Startwert setzen Sie jeweils $x_0 = 10$. Plotten Sie den Fehler zur analytischen Lösung $x = 0$ gegen den Iterationsschritt.



Aufgabe 8. In der Datei `data02_a08.mat` finden Sie Messungen der Auslenkungen s_j eines gedämpften Federpendels zu den Zeiten t_j , $j = 1, \dots, M$, wobei wir wissen, dass die ungedämpfte Schwingungsfrequenz $\omega_0 = 3\pi$ ist. Die Datei enthält weiter auch die function handles `f` und `Df`, welche die Funktion `f` und ihre Ableitung `f'` für das gedämpfte Federpendel und deren Messungen gemäß der ersten Seite implementieren. Benutzen Sie Ihr Levenberg-Marquardt-Verfahren mit den Parametern $\text{tol} = 10^{-10}$, $\text{maxIter} = 13$ sowie $\mu^- = \frac{3}{10}$, $\mu^+ = \frac{6}{10}$ und $\Delta_0 = 0.42$ um die Anfangsauslenkung, die Anfangsgeschwindigkeit sowie den Dämpfungsfaktor zu rekonstruieren. Als Startnäherung benutzen sie die Schätzung $(s_0, \dot{s}_0, \beta) \approx (.6, 0, .5)$. Stellen Sie schliesslich die Messpunkte (t_j, s_j) sowie ihre Annäherung graphisch dar. Um die Annäherung mit einem bestimmten Parameter `x` bei einem Vektor von Zeiten `t` auszuwerten, können Sie das function handle `sPar` verwenden; `sPar(x, t)`.



Literatur

- [1] Martin Hanke-Bourgeois. *Grundlagen der Numerischen Mathematik und des Wissenschaftlichen Rechnens*. Vieweg + Teubner Verlag, Wiesbaden, dritte Edition, 2009.