Regularisierung

Christian Gollwitzer

Experimentalphysik V

June 21, 2007

Inverse Probleme

- Bei vielen Problemen ist die Umkehrung numerisch instabil
- Wärmeleitgleichung, reelle Laplacetransformation, dynamische Lichtstreuung, Radontransformation, Polynominterpolation
- Vorwärtsproblem meist einfach lösbar
- Umkehrung liefert schlechtkonditionierte Systeme

Schlechtkonditionierte Systeme

Beispiel: Hilbertmatrix $H_{ij} = \frac{1}{i+j-1}$ (Polynominterpolation)

$$\begin{pmatrix} 1.00000 & 0.50000 & 0.33333 & 0.25000 & 0.20000 \\ 0.50000 & 0.33333 & 0.25000 & 0.20000 & 0.16667 \\ 0.33333 & 0.25000 & 0.20000 & 0.16667 & 0.14286 \\ 0.25000 & 0.20000 & 0.16667 & 0.14286 & 0.12500 \\ 0.20000 & 0.16667 & 0.14286 & 0.12500 & 0.11111 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5.0000 \\ 3.5500 \\ 2.8143 \\ 2.3464 \\ 2.0175 \end{pmatrix}$$

Schlechtkonditionierte Systeme

Beispiel: Hilbertmatrix $H_{ij} = \frac{1}{i+j-1}$ (Polynominterpolation)

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \end{pmatrix} \overset{H}{\Rightarrow} \begin{pmatrix} 5.0000 \\ 3.5500 \\ 2.8143 \\ 2.3464 \\ 2.0175 \end{pmatrix} \underset{\Rightarrow}{\overset{<1\text{‰ Fehler}}{(1.34 \cdot 10^{-4})}} \begin{pmatrix} 5.0000 \\ 3.5501 \\ 2.8138 \\ 2.3472 \\ 2.0171 \end{pmatrix} \overset{H^{-1}}{\Rightarrow}$$

Schlechtkonditionierte Systeme

Beispiel: Hilbertmatrix $H_{ij} = \frac{1}{i+j-1}$ (Polynominterpolation)

$$\begin{pmatrix}1\\2\\3\\4\\5\end{pmatrix} \overset{H}{\Rightarrow} \begin{pmatrix}5.0000\\3.5500\\2.8143\\2.3464\\2.0175\end{pmatrix} \underset{\Rightarrow}{\overset{<1\text{‰ Fehler}}{(1.34\cdot 10^{-4})}} \begin{pmatrix}5.0000\\3.5501\\2.8138\\2.3472\\2.0171\end{pmatrix} \overset{H^{-1}}{\Rightarrow} \begin{pmatrix}-0.87758\\37.48941\\-150.93957\\237.32707\\-109.42850\end{pmatrix}$$

Schlechtkonditionierte Systeme

Grund für überraschendes Ergebnis: Große *Konditionszahl* C

$$C = ||A|| \cdot ||A^{-1}||$$

Für 5x5-Hilbertmatrix: $C = 4.6 \cdot 10^5$

Lineares Fitproblem

Fitten von Datenpunkten $(x_1, y_1), (x_2, y_2) \ldots$ mit einer Gleichung der Form $a_1 f_1(x) + a_2 f_2(x) + a_3 f_3(x) + \ldots$
Setze

$$A = \begin{pmatrix} f_1(x_1) & f_2(x_1) & \ldots \\ f_1(x_2) & f_2(x_2) & \ldots \\ \ldots & \ldots & \ldots \end{pmatrix} \quad \alpha = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \ldots \end{pmatrix} \quad \mathbf{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \ldots \end{pmatrix}$$

Ergibt ein »Fast-Gleichungssystem« $A\alpha \approx y$

Linear Least Squares und Tikhonov

$A\alpha = y$ hat **keine Lösung**: Fitkurve geht nicht durch alle Datenpunkte
Löse stattdessen (**QR-Zerlegung**)

$$||A\alpha - y|| = \chi = \min!$$

ergibt die Parameter in α (LLS)

Linear Least Squares und Tikhonov

$A\alpha = y$ hat **keine Lösung**: Fitkurve geht nicht durch alle Datenpunkte
Löse stattdessen (**QR-Zerlegung**)

$$||A\alpha - y|| = \chi = \text{min!}$$

ergibt die Parameter in α (LLS)   Tikhonov:

$$||A\alpha - y|| + h||\alpha|| = \text{min!}$$

$$\begin{pmatrix} & A & \\ h & 0 & \cdots \\ 0 & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & h \end{pmatrix} \alpha \approx \begin{pmatrix} y \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

Linear Least Squares und Tikhonov

```
function retval=tikhonov(A, y, h)
  % returns: Tikhonov-Loesung |A*x-y|+h*|y| = min.
  % h: Tikhonovparameter

  C = vertcat(A, h*eye(columns(A)));
  r = vertcat(y, zeros(columns(A), 1));
  [Q, R] = qr (C);
  retval = R\ ( Q\ r);
endfunction

H=hilb(5);
y=[5.0000 3.5501 2.8138 2.3472 2.0171]';
tikhonov(H, y, 1.34e-4)
```

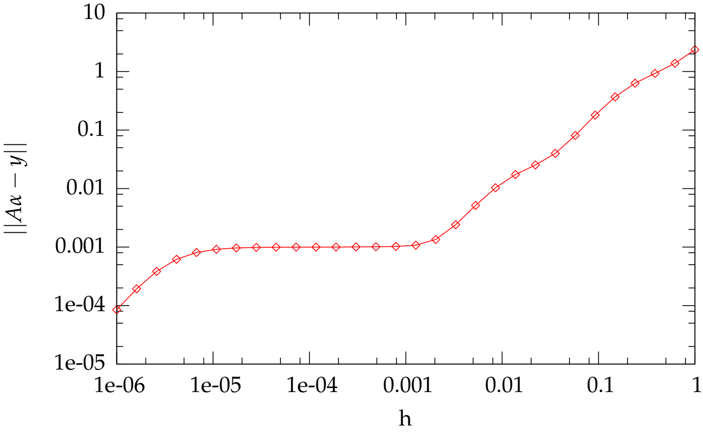
Tikhonov-Regularisierung der Hilbertmatrix

Wahl des Regularisierungsparameters h

$$
\begin{array}{cccc}
h = 0 & h = 10^{-5} & h = 10^{-3} & h = 10^{1} \\
\begin{pmatrix} -0.87774 \\ 37.49126 \\ -150.94605 \\ 237.33571 \\ -109.43239 \end{pmatrix} &
\begin{pmatrix} 0.81627 \\ 5.47308 \\ -12.06562 \\ 26.83581 \\ -6.19945 \end{pmatrix} &
\begin{pmatrix} 1.0244 \\ 1.7602 \\ 3.3581 \\ 4.2194 \\ 4.6064 \end{pmatrix} &
\begin{pmatrix} 0.084914 \\ 0.050694 \\ 0.037076 \\ 0.029465 \\ 0.024532 \end{pmatrix}
\end{array}
$$

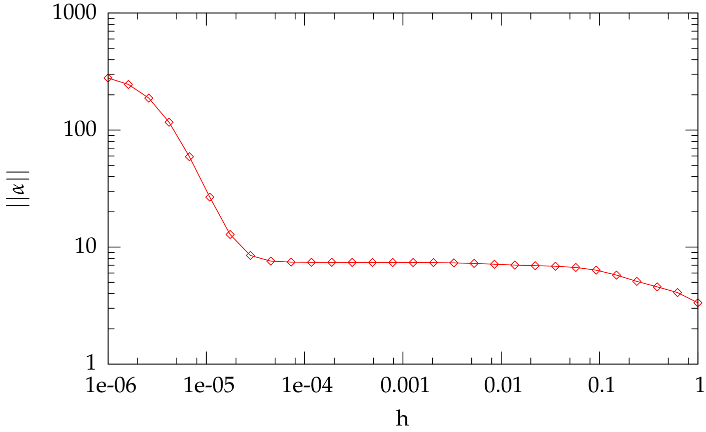
Wahl des Regularisierungsparameters – L-plot

Tikhonov spielt Fitabweichung $||A\alpha - y||$ gegen $||\alpha||$ aus



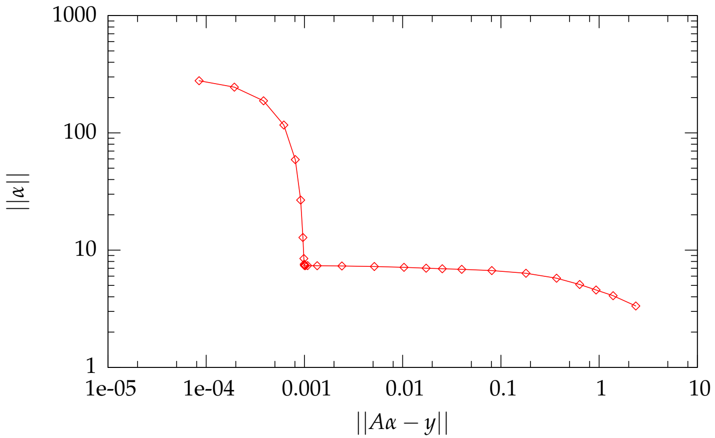
Wahl des Regularisierungsparameters – L-plot

Tikhonov spielt Fitabweichung $||A\alpha - y||$ gegen $||\alpha||$ aus



Wahl des Regularisierungsparameters – L-plot

Tikhonov spielt Fitabweichung $||A\alpha - y||$ gegen $||\alpha||$ aus



Wahl des Regularisierungsparameters – L-plot

Tikhonov spielt Fitabweichung $||A\alpha - y||$ gegen $||\alpha||$ aus
Punkt mit größter Krümmung

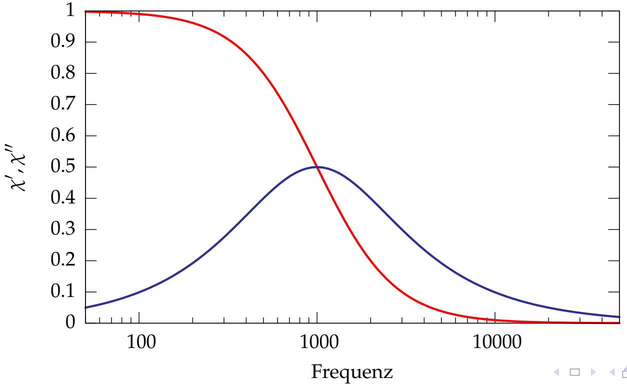
$$h = 1.34 \cdot 10^{-4}$$
$$y_h = \begin{pmatrix} 1.0031 \\ 1.9868 \\ 2.9271 \\ 4.2451 \\ 4.8317 \end{pmatrix}$$

Fehler 4,1%

Analyse von Wechselfeld-Magnetisierungskurven

Debye-Modell für Relaxation:

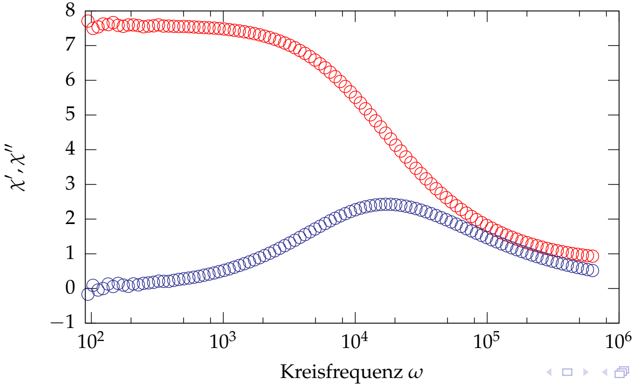
$$\chi(\omega) = \frac{\chi_0}{1 + i\omega\tau}$$



Analyse von Wechselfeld-Magnetisierungskurven

Debye-Modell für Relaxation:

$$\chi(\omega) = \frac{\chi_0}{1 + i\omega\tau}$$



Fredholmsche Integralgleichung

Verteilung $g(\tau)$

$$\chi(\omega) = \int_0^\infty \frac{g(\tau)}{1 + i\omega\tau} \mathrm{d}\tau$$

Problem: Gegeben Messwerte $\chi(\omega)$, gesucht $g(\tau)$

Fredholmsche Integralgleichung

Verteilung $g(\tau)$

$$\chi(\omega) = \int_0^\infty \frac{g(\tau)}{1 + i\omega\tau} \mathrm{d}\tau$$

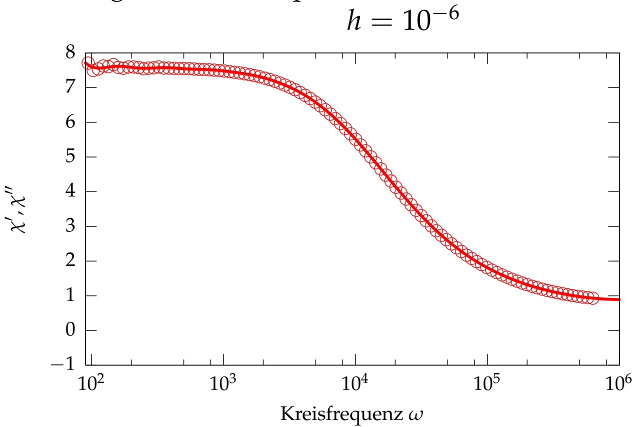
Problem: Gegeben Messwerte $\chi(\omega)$, gesucht $g(\tau)$
$\Rightarrow$ Fredholmsche Integralgleichung 1. Art
Diskretisierung:

$$\chi(\omega_i) = \sum_{j=0}^{N} \frac{1}{1 + i\omega_i\tau_j} \cdot g_j \Rightarrow \; \vec{\chi} = A\vec{g}$$

Lineares Gleichungssystem, A schlecht konditioniert (10^{19})

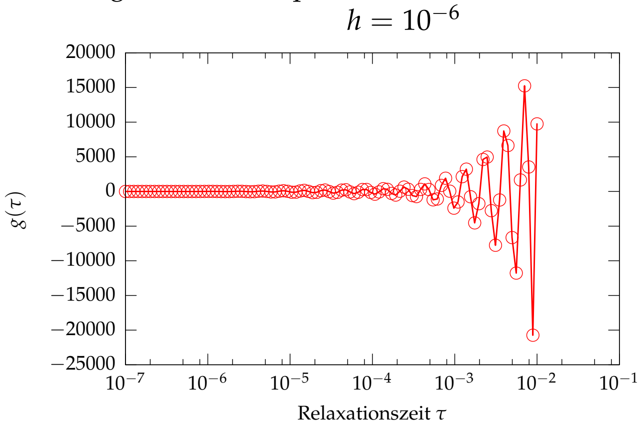
Cross-Validation

Vorhersagekraft der Fitparameter als Maß



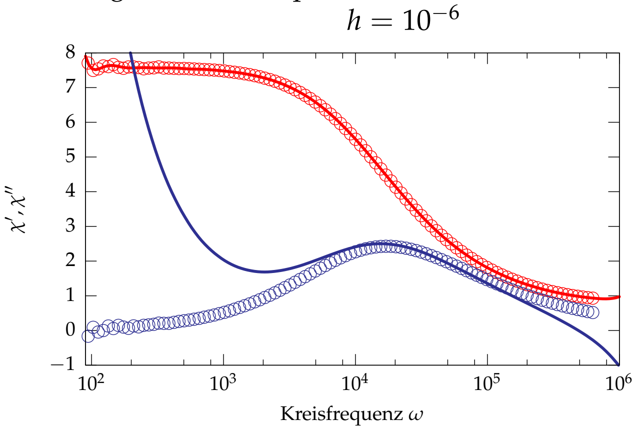
Cross-Validation

Vorhersagekraft der Fitparameter als Maß



Cross-Validation

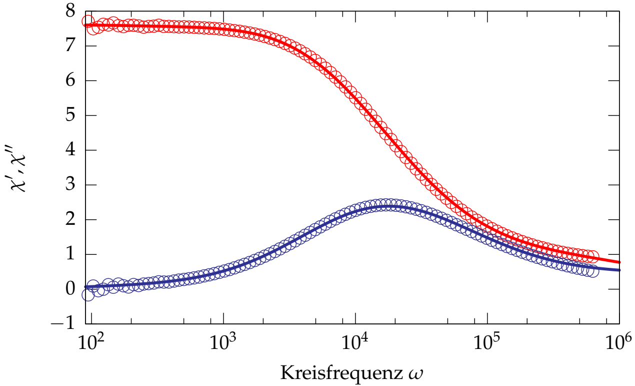
Vorhersagekraft der Fitparameter als Maß



Cross-Validation

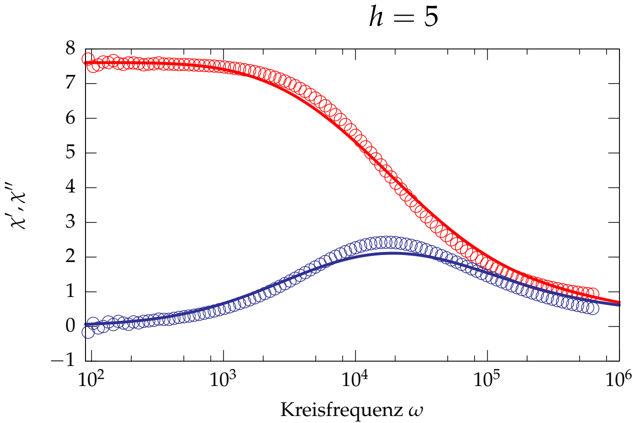
Vorhersagekraft der Fitparameter als Maß

$$h = 1$$



Cross-Validation

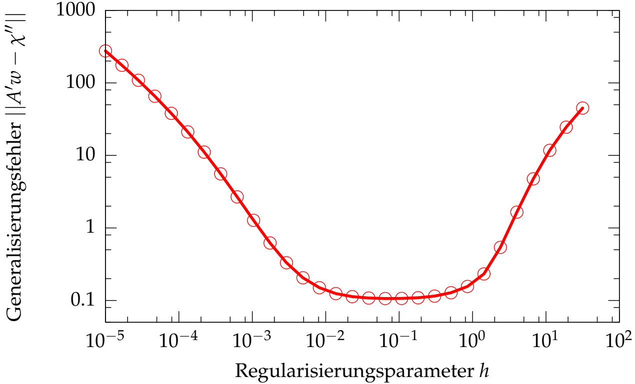
Vorhersagekraft der Fitparameter als Maß



Cross-Validation

Vorhersagekraft der Fitparameter als Maß

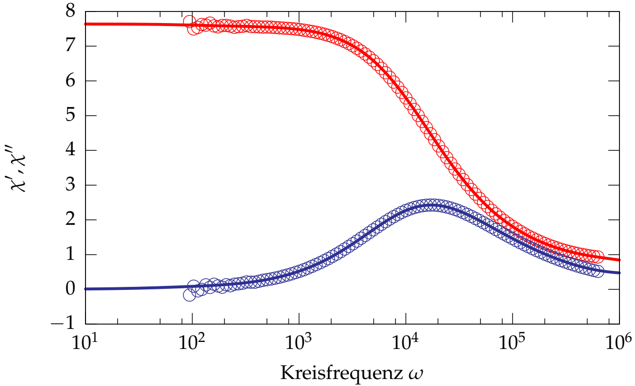
$$h = 0.065623$$



Cross-Validation

Vorhersagekraft der Fitparameter als Maß

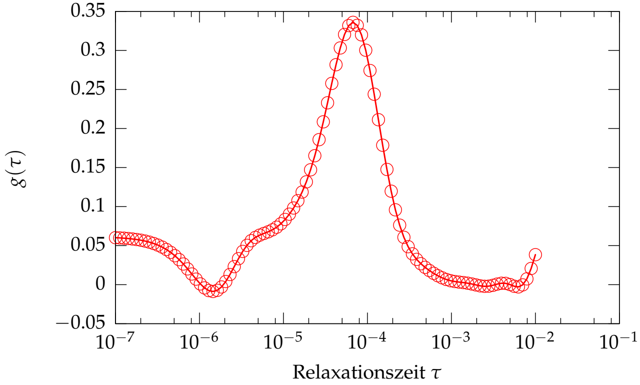
$$h = 0.065623$$



Cross-Validation

Vorhersagekraft der Fitparameter als Maß

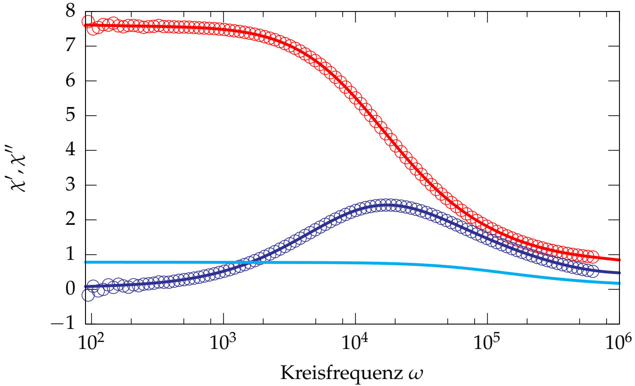
$$h = 0.065623$$



Cross-Validation

Vorhersagekraft der Fitparameter als Maß

$$h = 0.065623$$



Literatur

- A. Neumaier: Solving ill-conditioned and singular linear systems: A tutorial on regularization
- Per Christian Hansen: Matlab Regularization Toolbox
- Institute of Physics: Inverse Problems
- British Inverse Problems Society
- GNU Octave