



FAKULTA MATEMATIKY, FYZIKY A INFORMATIKY  
UNIVERZITY KOMENSKÉHO, BRATISLAVA

---

METÓDY RIEŠENIA ÚLOH NELINEÁRNEJ REGRESIE  
S VEĽKÝMI REZÍDUAMI  
(DIPLOMOVÁ PRÁCA)

DANIELA FORÍŠEKOVÁ

---

Diplomový vedúci: Doc. RNDr. Milan Hamala, CSc.

Bratislava, 2007



Čestne prehlasujem, že som túto diplomovú prácu vypracovala samostatne s použitím citovaných zdrojov.

.....

## Abstrakt

Témou tejto práce sú metódy riešenia úloh nelineárnej regresie. Pri úlohách s veľkými reziduami klasické metódy nevykazujú dobré výsledky, keďže pri výpočte druhej derivácie danej funkcie zanedbávajú niektoré členy. Pri úlohách s malými reziduami sú tieto zanedbané výrazy blízke nule, ale pri veľkých reziduách sú nenulové a ich zanedbaním vznikajú značné chyby vo výpočtoch. Preto je pri úlohách s veľkými reziduami nutné aproximovať druhé derivácie iným spôsobom, napríklad pomocou kvázi-newtonovských aproximácií.

Cieľom tejto práce je spracovať prehľad o moderných metódach riešenia úloh nelineárnej regresie, vybrané metódy naprogramovať a realizovať na nich numerické experimenty.

# Obsah

Úvod	vii
<b>1 Nelineárna regresia</b>	<b>1</b>
1.1 Úvod do regresie	1
1.1.1 Odhad parametrov	2
1.2 Úloha nelineárnej regresie	2
1.2.1 Derivácie regresnej funkcie	3
1.2.2 Úlohy s malými reziduami	4
1.2.3 Úlohy s veľkými reziduami	4
<b>2 Metódy riešenia</b>	<b>5</b>
2.1 Úvod k metódam nelineárnej regresie	5
2.1.1 Spádové metódy	6
2.1.2 Newtonova metóda	7
2.1.3 Metódy s ohraničeným krokom a regularizačné metódy	7
2.2 Klasické metódy	8
2.2.1 Gauss-Newtonova metóda	8
2.2.2 Levenberg-Marquardtova metóda	9
2.3 Moderné metódy	10
2.3.1 Kvázinewtonovské metódy	10
2.3.2 Hybridná metóda	12
2.3.3 Broydenova metóda s interpoláciou	12
2.3.4 QN metóda s upravenou kvázinewtonovskou podmienkou	15
<b>3 Numerické experimenty</b>	<b>17</b>
3.1 Teoretický popis experimentov	17
3.1.1 Použité metódy	17
3.1.2 Použité funkcie	19
3.1.3 Popis algoritmov	19
3.2 Výsledky	21
3.3 Porovnanie metód	26
3.4 Porovnanie voľby dĺžky kroku	29

<i>OBSAH</i>	vi
<b>4 Záver</b>	<b>31</b>
<b>Výpis programu</b>	<b>32</b>
<b>Literatúra</b>	<b>38</b>

# Úvod

V tejto práci sa budeme zaoberať metódami riešenia úlohy nelineárnej regresie, ktorú môžeme zapísať v tvaroch:

$$\min F(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^m (f_i(\mathbf{x}))^2 = \frac{1}{2} \|\mathbf{f}(\mathbf{x})\|^2 = \frac{1}{2} \mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \mathbf{f}(\mathbf{x}).$$

kde  $\mathbf{f}$  je zadaná vektorová funkcia  $\mathbf{f} : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}^m$ ,  $m \geq n$ .

Všetky metódy na riešenie úloh nelineárnej optimalizácie patria medzi iteračné metódy. Zo zvoleného štartovacieho bodu  $\mathbf{x}_0$  generujú postupnosť bodov  $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots$ , ktorá by mala konvergovať k optimálnemu riešeniu. V týchto metódach je nutné v každej iterácii nejakým spôsobom aproximovať druhé derivácie funkcie  $F$ , keďže ich výpočet by bol časovo príliš náročný.

Pri klasických metódach sa Hessián aproximuje len jeho lineárnou zložkou, pričom sa zanedbáva časť obsahujúca reziduá. Tieto metódy sú vhodné pri úlohách s malými reziduami. Vtedy je zanedbaná zložka dostatočne malá na to, aby sa aproximácia Hessiánu príliš nelíšila od jeho skutočnej hodnoty.

Pri úlohách s veľkými reziduami je však zanedbaná zložka príliš veľká, a teda takáto aproximácia Hessiánu je pomerne nepresná. Klasické metódy konvergujú k optimálnemu riešeniu príliš pomaly, resp. vôbec nenájdu optimálne riešenie. Preto je pri takýchto úlohách potrebné aproximovať Hessián iným spôsobom tak, aby zahŕňal aj odhad reziduálnej zložky. To sa dá napríklad použitím kvázinewtonovských metód, ktoré vytvárajú aproximáciu Hessiánu postupne v niekoľkých iteráciách na základe informácií z predchádzajúcich iterácií.

Cieľom tejto práce je spracovať prehľad o moderných metódach riešenia úloh nelineárnej regresie, vybrané metódy naprogramovať a realizovať numerické experimenty.

Práca je členená nasledovne: v prvej časti sú zhrnuté teoretické podklady nelineárnej regresie. V druhej časti sú popísané niektoré metódy riešenia úloh nelineárnej regresie, pričom dôraz je hlavne na moderné metódy. Tretia časť obsahuje numerické experimenty, v ktorých sa porovnávajú klasické a moderné metódy na rôznych typoch úloh nelineárnej regresie.

# Kapitola 1

## Nelineárna regresia

### 1.1 Úvod do regresie

V štatistike sa často stretávame s problémom hľadania vzťahu medzi dvoma množinami premenných, z ktorých je aspoň jedna náhodná, resp. podlieha náhodným fluktuáciám a chybám merania. V regresných úlohách máme obvykle jednu závislú (vysvetľovanú) premennú  $y$ , ktorej vývoj chceme modelovať v závislosti od hodnôt nezávislých (vysvetľujúcich) premenných  $x_1, x_2, \dots, x_k$ . Hľadáme teda takú funkciu  $g$ , aby platilo

$$y \approx g(x_1, x_2, \dots, x_k) \quad (1.1)$$

Túto závislosť hľadáme na základe  $m$  nameraných hodnôt vysvetľujúcich premenných a vysvetľovanej premennej. Vo vzťahu (1.1) je rovnosť len približná, nakoľko zahŕňa aj spomínané fluktuácie, šum a chyby merania, kvôli ktorým nie je možné závislosť vyjadriť presne.

V praxi často vieme určiť typ (triedu) funkcie  $g$  podľa teoretických poznatkov (napr. vieme, že medzi danými premennými je polynomiálna alebo exponenciálna závislosť). Potom podľa nameraných hodnôt určujeme len parametre  $\theta \in \mathbb{R}^n$  tejto funkcie. Matematicky potom môžeme (1.1) upresniť:

$$y \approx g(x_1, x_2, \dots, x_k, \theta) \quad (1.2)$$

Napríklad pri polynomiálnej závislosti môže byť teoretický vzťah

$$y \approx \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2^2 \quad (1.3)$$

a určujeme len hodnotu parametra  $\theta = (\beta_0, \beta_1, \beta_2)^T$ . Príkladom exponenciálnej závislosti môže byť vzťah

$$y \approx \alpha e^{\beta x} \quad (1.4)$$

kde určujeme parameter  $\theta = (\alpha, \beta)^T$

Podľa tvaru funkcie  $g$  v závislosti od parametra  $\theta$  rozdeľujeme regresiu na lineárnu a nelineárnu. Pri lineárnej regresii závisí funkcia  $g$  od parametrov lineárne (vysvetľujúce premenné  $x_i$  sa môžu vyskytovať aj v mocninách, súčinoch



a pod.) O nelineárnej regresii hovoríme vtedy, ak je funkcia  $g$  nelineárna v parametri  $\theta$ , čiže podľa [BW88] aspoň jedna derivácia funkcie  $g$  podľa niektorého z parametrov  $\theta_i$  závisí aspoň od jedného parametra  $\theta_j$ .

Vzťah (1.3) je príkladom lineárnej závislosti (t.j. ide o úlohu lineárnej regresie), vzťah (1.4) je typickým príkladom nelineárnej závislosti (úloha nelineárnej regresie).

### 1.1.1 Odhad parametrov

Pri odhade parametrov  $\theta$  obvykle skúmame *reziduá*, teda rozdiely medzi nameranými hodnotami  $y_i$  a predpokladanými hodnotami  $g(\mathbf{x}^i, \theta)$ .

Na určenie parametrov  $\theta$  sa často využíva metóda najmenších štvorcov. V tejto metóde hľadáme odhad parametrov  $\theta$  tak, aby sa minimalizoval súčet druhých mocnín reziduí. Predpokladajme, že máme  $m$  pozorovaní  $(\mathbf{x}^i, y_i)$  a vzťah (1.2) v tvare

$$y_i = g(\mathbf{x}^i, \theta) + \varepsilon_i \quad i = 1, 2, \dots, m. \quad (1.5)$$

Pričom predpokladáme, že stredná hodnota  $E(\varepsilon_i) = 0$  a  $\theta \in \mathbb{R}^n$ . Potom odhad parametra  $\hat{\theta}$  pomocou metódy najmenších štvorcov nájdeme ako

$$\hat{\theta} = \text{Arg Min} \left( F(\theta) = \sum_{i=1}^m (f_i(\theta))^2 \mid \theta \in \mathbb{R}^n \right), \quad (1.6)$$

kde  $f_i = y_i - g(\mathbf{x}^i, \theta)$ . Často sa používa tvar (1.6) prenášobný konštantou  $1/2$

$$\hat{\theta} = \text{Arg Min} \left( F(\theta) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^m (f_i(\theta))^2 \mid \theta \in \mathbb{R}^n \right). \quad (1.7)$$

Keďže hľadáme argument minima, táto úprava nemení riešenie úlohy a je výhodná pri metódach, ktoré využívajú derivácie funkcie  $F$ .

V ďalšej časti budeme používať trochu zmenené označenie - pôvodnú premennú  $\theta$  nahradíme premennou  $\mathbf{x}$ , kvôli zachovaniu konzistencie označovania s už publikovanými prácami na túto tému.

## 1.2 Úloha nelineárnej regresie

V tejto práci sa budeme zaoberať metódami pre riešenie úlohy nelineárnej regresie. Majme zadanú vektorovú funkciu  $\mathbf{f} : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}^m$ , kde  $m \geq n$ . Chceme minimalizovať  $\|\mathbf{f}(\mathbf{x})\|$ , čo je ekvivalentné s riešením úlohy

$$\text{Min } F(x) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^m (f_i(\mathbf{x}))^2 \quad (1.8)$$

kde  $f_i : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}$ ,  $i = 1 \dots m$  sú jednotlivé zložky funkcie  $\mathbf{f}$ .

Úloha nelineárnej regresie je špeciálnym tvarom úlohy hľadania globálneho extrému danej funkcie

$$\text{Min } \{F(\mathbf{x}) | \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n\} \quad (1.9)$$

kde  $F : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}$ . Takáto úloha sa dá riešiť pomocou metód nelineárneho programovania za predpokladu, že funkcia  $F$  je konvexná. V opačnom prípade (čo je aj prípad úlohy nelineárnej regresie) sa vo všeobecnosti rieši veľmi ťažko. Väčšina metód nelineárneho programovania rieši len jednoduchší tvar úlohy - hľadanie lokálneho extrémum. Pri hľadaní lokálneho extrémum sa dajú využiť známe poznatky, že v bode minima  $x^*$  je  $F'(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$  a  $F''(\mathbf{x}^*) \succ \mathbf{0}$ .

Úlohy nelineárnej regresie sa dajú riešiť pomocou metód pre nelineárne programovanie, avšak efektívnejšie je riešenie pomocou špeciálnych metód pre úlohy nelineárnej regresie, ktoré vykazujú rýchlejšiu konvergenciu ako všeobecné metódy nelineárneho programovania.

### 1.2.1 Derivácie regresnej funkcie $F(\mathbf{x})$

Pri riešení úloh nelineárnej regresie sa často využíva rozvoj funkcie  $\mathbf{f}$  do *Taylorovho radu*, kde sú potrebné prvé, resp. druhé derivácie danej funkcie.

*Jakobián* funkcie  $\mathbf{f}$  je matica  $\mathbf{J}(\mathbf{x})$ , kde

$$(\mathbf{J}(\mathbf{x}))_{ij} = \frac{\partial f_i}{\partial x_j}(\mathbf{x}). \quad (1.10)$$

Pre funkciu  $F(\mathbf{x})$  definovanú podľa (1.8) potom platí

$$\frac{\partial F}{\partial x_j}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^m f_i(\mathbf{x}) \frac{\partial f_i}{\partial x_j}(\mathbf{x}) \quad (1.11)$$

a teda gradient funkcie  $F(\mathbf{x})$  je

$$\nabla F(\mathbf{x}) = \mathbf{F}'(\mathbf{x}) = \mathbf{J}(\mathbf{x})^\top \mathbf{f}(\mathbf{x}). \quad (1.12)$$

Pri výpočtoch budeme potrebovať často aj druhé derivácie. Vychádzajúc zo vzťahu (1.11) vidíme, že druhá parciálna derivácia a *Hessián* funkcie  $F(\mathbf{x})$  majú tvar

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x_j \partial x_k}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^m \left( \frac{\partial f_i}{\partial x_j}(\mathbf{x}) \frac{\partial f_i}{\partial x_k}(\mathbf{x}) + f_i(\mathbf{x}) \frac{\partial^2 f_i}{\partial x_j \partial x_k}(\mathbf{x}) \right) \quad (1.13)$$

$$\begin{aligned} \nabla^2 F(\mathbf{x}) = \mathbf{F}''(\mathbf{x}) &= \mathbf{J}(\mathbf{x})^\top \mathbf{J}(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^m f_i(\mathbf{x}) \mathbf{f}_i''(\mathbf{x}) \\ &= \mathbf{J}(\mathbf{x})^\top \mathbf{J}(\mathbf{x}) + \mathbf{A}(\mathbf{x}). \end{aligned} \quad (1.14)$$

Pri riešení úloh je však dosť výpočtovo náročné počítať presnú hodnotu  $\mathbf{A}(\mathbf{x})$ , preto sa v klasických metódach táto časť zanedbáva. Pri moderných metódach sa ju snažíme nejakým jednoduchším spôsobom aproximovať.

### 1.2.2 Úlohy s malými reziduami

Pri klasických metódach sa prepokladá, že reziduá  $f_i(\mathbf{x})$  sú dostatočne malé, a teda môžeme v (1.14) zanedbať člen  $\mathbf{A}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^m f_i(\mathbf{x})\mathbf{f}_i''(\mathbf{x})$ . Potom sa obvykle druhé derivácie aproximujú pomocou Jakobiánu, teda  $\nabla^2 F(\mathbf{x}) \approx \mathbf{J}(\mathbf{x})^\top \mathbf{J}(\mathbf{x})$ . Vo všeobecnosti sa nedá explicitne povedať, kedy ide o úlohu s malými reziduami. Závisí to od typu použitej funkcie, nameraných hodnôt a pod. Podrobnejšie sa týmto metódam budeme venovať v kapitole 2.2.

### 1.2.3 Úlohy s veľkými reziduami

Pri úlohách s veľkými reziduami je výraz  $\sum_{i=1}^m f_i(\mathbf{x})\mathbf{f}_i''(\mathbf{x})$  príliš veľký na to, aby sa zanedbal. Pri použití klasických metód v týchto prípadoch dostávame značne nepresné výsledky, resp. tieto metódy úplne zlyhávajú, keďže zanedbaním tohto členu dostaneme veľmi nepresnú aproximáciu  $\nabla^2 F(\mathbf{x})$ . Pri úlohách s veľkými reziduami je preto potrebné aproximovať druhé derivácie iným spôsobom, napríklad pomocou *kvázi-newtonovských* aproximácií. Týmto metódam je venovaná kapitola 2.3.

## Kapitola 2

# Metódy riešenia úloh nelineárnej regresie

### 2.1 Úvod k metódam nelineárnej regresie

V tejto kapitole sa budeme zaoberať rôznymi metódami riešenia úloh nelineárnej regresie. Pripomenieme, že máme zadanú vektorovú funkciu

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}^m, \quad m \geq n$$

a chceme nájsť  $\text{Arg Min } \|\mathbf{f}(\mathbf{x})\|^2$ .

To je ekvivalentné s hľadaním argumentu minima funkcie

$$F(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^m (f_i(\mathbf{x}))^2 = \frac{1}{2} \|\mathbf{f}(\mathbf{x})\|^2 = \frac{1}{2} \mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \mathbf{f}(\mathbf{x}).$$

Všetky metódy na riešenie úloh nelineárnej optimalizácie patria medzi iteračné metódy. Zo zvoleného štartovacieho bodu  $\mathbf{x}_0$  generujú postupnosť bodov  $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots$ , ktorá by mala konvergovať k optimálnemu riešeniu. Konvergencia k bodu minima sa zabezpečuje spádovou podmienkou:  $F(\mathbf{x}_{k+1}) < F(\mathbf{x}_k)$ . Táto podmienka zabezpečí pokles funkčnej hodnoty v každej iterácii, vďaka čomu by mala metóda skonvergovať do bodu lokálneho minima.

Pri iteračných metódach rozlišujeme rôznu rýchlosť konvergence k optimálnemu riešeniu, ktorú určujeme pomocou odchýlky  $\mathbf{e}_i = \mathbf{x}_i - \mathbf{x}^*$  ( $\mathbf{x}^*$  označuje optimálne riešenie), ako napr.

- *Lineárna konvergencia* ak  $\|\mathbf{e}_{i+1}\| \leq a\|\mathbf{e}_i\|$ ,  $0 < a < 1$
- *Superlineárna konvergencia* ak  $\frac{\|\mathbf{e}_{i+1}\|}{\|\mathbf{e}_i\|} \mapsto 0$  pre  $i \mapsto \infty$
- *Kvadratická konvergencia* ak  $\|\mathbf{e}_{i+1}\| = O(\|\mathbf{e}_i\|^2)$

Typická iterácia takejto metódy vyzerá:

- nájdenie smeru  $\mathbf{h}$ ,
- určenie vhodnej dĺžky kroku  $\lambda$  v tomto smere,
- výpočet novej iterácie: krok z pôvodného bodu v smere  $\mathbf{h}$  dĺžky  $\lambda$ .

Jednotlivé metódy riešenia úloh nelineárnej regresie sa líšia v spôsobe výpočtu smeru  $\mathbf{h}$  a dĺžky kroku  $\lambda$ .

V ďalšej časti predstavíme niektoré základné typy iteračných metód, z ktorých vychádza väčšina prakticky používaných metód.

### 2.1.1 Spádové metódy

Z rozvoja funkcie  $F$  do Taylorovho radu dostaneme

$$F(\mathbf{x} + \lambda\mathbf{h}) \approx F(\mathbf{x}) + \lambda\mathbf{h}^\top \nabla F(\mathbf{x}) \quad (2.1)$$

Hovoríme, že smer  $\mathbf{h}$  je spádový v danom bode  $\mathbf{x}$ , ak funkcia  $F(\mathbf{x} + \lambda\mathbf{h})$  je klesajúcou funkciou premennej  $\lambda$  v bode  $\lambda = 0$ . To znamená, že v bode  $\mathbf{x}$  je funkcia  $F(\mathbf{x})$  klesajúca v smere  $\mathbf{h}$ . Z Taylorovho rozvoja funkcie  $F$  dostaneme nasledujúcu definíciu spádového smeru:

Smer  $\mathbf{h}$  je spádový smer pre funkciu  $F$  v bode  $x$ , ak platí:

$$\mathbf{h}^\top \nabla F(\mathbf{x}) < 0. \quad (2.2)$$

Ak neexistuje smer  $\mathbf{h}$ , ktorý by spĺňal (2.2), potom nutne musí byť  $\nabla F(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ , a teda  $\mathbf{x}$  je stacionárny bod.

Najstrmší smer (t.j. smer, v ktorom zaznamenáme najväčší pokles) je smer  $\mathbf{h} = -\nabla F(\mathbf{x})$ . Metóda využívajúca v každej iterácii tento smer sa nazýva *gradientná metóda*. Aj keď táto metóda vyberá lokálne najlepší smer, jej konvergencia v blízkosti optimálneho riešenia je dosť pomalá (metóda konverguje lineárne). Gradientná metóda však vykazuje dobré výsledky v začiatkovej fáze riešenia, keď sa bod iterácie nachádza ďaleko od optimálneho riešenia. Na základe týchto poznatkov vznikli *hybridné metódy*. Tieto spájajú dve rôzne metódy riešenia. Jedna je vhodná v úvodnej fáze (ako napr. spomínaná gradientná metóda), druhá je vhodnejšia v závere, keď sa nachádzame blízko bodu minima. Problémom hybridných metód môže byť správne nastavenie podmienky, ktorá prepína medzi jednotlivými metódami.

Keď máme bod  $\mathbf{x}$  a k nemu prislúchajúci spádový smer  $\mathbf{h}$ , potrebujeme ešte určiť, ako ďaleko sa máme z bodu  $\mathbf{x}$  v smere  $\mathbf{h}$  posunúť v ďalšej iterácii. Obvykle sa používa *optimálny krok*, teda taká dĺžka kroku  $\lambda$ , ktorá minimalizuje funkciu  $\Phi(\lambda) = F(\mathbf{x} + \lambda\mathbf{h})$ . To znamená, že v smere  $\mathbf{h}$  sa posúvame dotedy, kým klesá funkčná hodnota funkcie  $F$ .

Typickým príkladom spádovej metódy pre úlohy nelineárnej regresie je Gauss-Newtonova metóda (popísaná v kapitole 2.2.1).

### 2.1.2 Newtonova metóda

Pri odvodení tejto metódy vychádzame z predpokladu, že  $\mathbf{x}^*$  je stacionárny bod, teda spĺňa  $\nabla F(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ . Z rozvoja do Taylorovho radu dostaneme

$$\nabla F(\mathbf{x} + \mathbf{h}) \approx \nabla F(\mathbf{x}) + \nabla^2 F(\mathbf{x})\mathbf{h}. \quad (2.3)$$

Keďže chceme v nasledujúcej iterácii dosiahnuť bod minima, hľadáme také  $\mathbf{h}$ , aby platilo  $\nabla F(\mathbf{x} + \mathbf{h}) = \mathbf{0}$ . Potom krok  $\mathbf{h}_n$  v Newtonovej metóde dostaneme ako riešenie nasledovnej rovnice:

$$\nabla^2 F(\mathbf{x})\mathbf{h}_n = -\nabla F(\mathbf{x}) \quad (2.4)$$

a ďalšia iterácia bude

$$\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i + \mathbf{h}_n. \quad (2.5)$$

Za predpokladu, že  $\mathbf{x}_i$  je blízko  $\mathbf{x}^*$  je Newtonova metóda veľmi dobrá, za určitých podmienok dosahuje až kvadratickú konvergenciu. Jej nevýhodou je veľká výpočtová náročnosť, keďže v každej iterácii je nutné počítať maticu druhých derivácií  $\nabla^2 F(\mathbf{x})$ .

### 2.1.3 Metódy s ohraničeným krokom a regularizačné metódy

V týchto metódach sa určuje optimálna dĺžka kroku v nasledujúcej iterácii súčasne s hľadaním optimálneho smeru.

Predpokladajme, že máme nasledovný model funkcie  $F$  v okolí bodu  $\mathbf{x}$ .

$$F(\mathbf{x} + \mathbf{h}) \approx F(\mathbf{x}) + \mathbf{h}^\top \mathbf{c} + \frac{1}{2} \mathbf{h}^\top \mathbf{B} \mathbf{h} = L(\mathbf{h}), \quad (2.6)$$

napríklad z rozvoja tejto funkcie do Taylorovho radu. Pre dostatočne malé  $\mathbf{h}$  je minimum funkcie  $L$  blízke minimu funkcie  $F$ , preto potrebujeme nejakým spôsobom obmedziť veľkosť nasledujúceho kroku. Pri metódach s ohraničeným krokom (tzv. *trust-region* metódach) predpokladáme, že tento model je dostatočne presný na  $\Delta$ -okolí bodu  $\mathbf{x}$  a určíme smer ďalšej iterácie ako minimum funkcie  $L$  na tomto  $\Delta$ -okolí bodu  $\mathbf{x}$ :

$$\mathbf{h} = \text{Arg Min} (L(\mathbf{h}) \mid \|\mathbf{h}\| < \Delta). \quad (2.7)$$

Pri regularizačných metódach pridáme k minimalizovanej funkcii ďalší člen, ktorý je rastúcou funkciou dĺžky kroku. Keď hľadáme argument minima, snažíme sa celý výraz minimalizovať a tým pádom sa nutne minimalizuje aj dĺžka kroku. V regularizačných metódach sa krok v ďalšej iterácii určí napr.:

$$\mathbf{h} = \text{Arg Min} \left( L(\mathbf{h}) + \frac{1}{2} \mu \mathbf{h}^\top \mathbf{h} \right). \quad (2.8)$$

Voľbou veľkosti parametra  $\mu \geq 0$  môžeme ovplyvniť výslednú dĺžku kroku.

Podrobnejšie sú tieto metódy spolu s dôkazmi uvedených tvrdení popísané napr. v [MNT04]. Medzi regularizačné metódy patrí aj Levenberg-Marquardtova metóda, popisovaná v kapitole 2.2.2.

## 2.2 Klasické metódy

Uvedieme tu niektoré klasické metódy, z ktorých sú odvodené mnohé moderné metódy riešenia úloh nelineárnej regresie. Klasické metódy sú vhodné na riešenie úloh s malými reziduami.

### 2.2.1 Gauss-Newtonova metóda

Táto metóda je základom pre mnohé efektívne metódy. V špecifických prípadoch môže Gauss-Newtonova metóda dosiahnuť aj kvadratickú konvergenciu podobne ako Newtonova metóda.

Gauss-Newtonova metóda je založená na lineárnej aproximácii funkcií  $f$  v okolí bodu  $\mathbf{x}$ . Z Taylorovho rozvoja dostávame

$$\mathbf{f}(\mathbf{x} + \mathbf{h}) \approx \mathbf{f}(\mathbf{x}) + \mathbf{J}(\mathbf{x})\mathbf{h} \quad (2.9)$$

potom

$$\begin{aligned} F(\mathbf{x} + \mathbf{h}) &= \frac{1}{2}\mathbf{f}(\mathbf{x} + \mathbf{h})^\top \mathbf{f}(\mathbf{x} + \mathbf{h}) \\ &\approx \frac{1}{2}(\mathbf{f}(\mathbf{x}) + \mathbf{J}(\mathbf{x})\mathbf{h})^\top (\mathbf{f}(\mathbf{x}) + \mathbf{J}(\mathbf{x})\mathbf{h}) \\ &= \frac{1}{2}\mathbf{f}^\top \mathbf{f} + \mathbf{h}^\top \mathbf{J}^\top \mathbf{f} + \frac{1}{2}\mathbf{h}^\top \mathbf{J}^\top \mathbf{J} \mathbf{h} \\ &\equiv L(\mathbf{h}), \end{aligned} \quad (2.10)$$

kde  $\mathbf{f} \equiv \mathbf{f}(\mathbf{x})$  a  $\mathbf{J} \equiv \mathbf{J}(\mathbf{x})$ . Smer v Gauss-Newtonovej metóde je definovaný ako

$$\mathbf{h}_{\text{gn}} = \text{Arg Min}(L(\mathbf{h})). \quad (2.11)$$

Pre gradient a Hessián funkcie  $L(\mathbf{h})$  platí

$$\nabla L(\mathbf{h}) = \mathbf{J}^\top \mathbf{f} + \mathbf{J}^\top \mathbf{J} \mathbf{h}, \quad \nabla^2 L(\mathbf{h}) = \mathbf{J}^\top \mathbf{J}. \quad (2.12)$$

Vidíme, že  $\nabla^2 L(\mathbf{h})$  nezávisí od  $\mathbf{h}$ , je symetrická a za predpokladu, že matica  $\mathbf{J}$  má plnú hodnotu, je  $\nabla^2 L(\mathbf{h})$  kladne definitná. Potom  $L(\mathbf{h})$  má jediné minimum, ktoré nájdeme ako riešenie rovnice

$$(\mathbf{J}^\top \mathbf{J})\mathbf{h}_{\text{gn}} = -\mathbf{J}^\top \mathbf{f}. \quad (2.13)$$

Keď porovnáme výpočet smeru v Gauss-Newtonovej metóde (2.13) so smerom Newtonovej metódy (2.4) vidíme, že rozdiel je jedine vo výpočte matice druhých derivácií. Pokiaľ je  $\mathbf{f}(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$ , potom  $\nabla^2 L(\mathbf{h}) \approx \nabla^2 F(\mathbf{x})$  pre  $\mathbf{x}$  blízko  $\mathbf{x}^*$ . Vtedy je krok Gauss-Newtonovej metódy takmer zhodný s krokom Newtonovej metódy, a teda Gauss-Newtonova metóda dosahuje kvadratickú rýchlosť konvergencie. Je zaujímavé, že rýchlosť konvergencie je ovplyvnená hodnotou funkcie  $F(\mathbf{x})$  v bode optimálneho riešenia.

Po určení spádového smeru ešte potrebujeme určiť, aký veľký krok sa má v tomto smere vykonať. V klasickej Gauss-Newtonovej metóde sa používa krok

$\lambda = 1$ . Neskôr sa táto metóda vylepšila pridaním optimálnej dĺžky kroku. Aby sme vedeli určiť optimálnu dĺžku kroku, sledujeme hodnoty funkcie  $F$  z bodu  $\mathbf{x}$  v smere  $\mathbf{h}$ . Hľadáme takú hodnotu  $\lambda$ , pre ktorú nadobúda funkcia  $F$  v tomto smere minimum, teda takú dĺžku kroku  $\lambda$ , ktorá minimalizuje funkciu  $\Phi(\lambda) = F(\mathbf{x} + \lambda\mathbf{h})$ . Keďže  $\mathbf{h}$  je spádový smer v bode  $\mathbf{x}$ , je zaručené, že na okolí bodu  $\mathbf{x}$  je funkcia  $F(\mathbf{x})$  klesajúca.

Existujú dva prístupy k hľadaniu optimálneho kroku. Pri presnom hľadaní sa snažíme v každej iterácii nájsť čo najpresnejšiu hodnotu optimálneho kroku. Toto je však časovo dosť náročné a pokiaľ sa nachádzame v danej iterácii ďaleko od optimálneho riešenia, nemusí byť presné určenie optimálneho kroku až také dôležité. Na základe týchto poznatkov sa v niektorých metódach využíva len približné určenie optimálneho kroku - krok  $\lambda$  určíme tak, aby nastal pokles vo funkčnej hodnote (ale nemusí to byť najväčší možný pokles).

Jedna iterácia v Gauss-Newtonovej metóde potom vyzerá

- Nájdienie smeru  $\mathbf{h}_{gn}$  ako riešenie rovnice (2.13),
- Určenie kroku  $\lambda$ ,
- Krok v danom smere:  $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \lambda\mathbf{h}_{gn}$ .

### 2.2.2 Levenberg-Marquardtova metóda

Levenberg a Marquardt navrhli zmeniť Gauss-Newtonovu metódu na regularizačnú metódu použitím parametra  $\mu \geq 0$ . Krok  $\mathbf{h}_{lm}$  v Levenberg-Marquardtovej metóde je definovaný ako riešenie nasledovnej rovnice

$$(\mathbf{J}^\top \mathbf{J} + \mu \mathbf{I})\mathbf{h}_{lm} = -\mathbf{J}^\top \mathbf{f}. \quad (2.14)$$

Pridanie parametra  $\mu$  má niekoľko významných efektov:

- Pre každé  $\mu \geq 0$  je matica koeficientov v rovnici (2.14) kladne definitná. Tým je zaručené, že smer  $\mathbf{h}_{lm}$  je spádový.
- Pre veľké hodnoty parametra  $\mu$  je  $\mathbf{h}_{lm} \approx -\frac{1}{\mu}\nabla F(\mathbf{x})$ , teda zodpovedá krátkemu kroku v smere najväčšieho spádu. Takýto krok je vhodný, keď sa nachádzame ďaleko od optimálneho riešenia (v začiatkovej fáze iterácií).
- Pre malé  $\mu$  je  $\mathbf{h}_{lm} \approx \mathbf{h}_{gn}$ , a teda je vhodný v záverečných fázach iterácií, keď sa nachádzame v blízkosti optimálneho riešenia.

Vidíme, že penalizačný parameter  $\mu$  ovplyvňuje nielen smer ale aj dĺžku kroku. Preto v Levenberg-Marquardtovej metóde nepotrebujeme výpočet optimálnej dĺžky kroku v každej iterácii. Počiatočná hodnota parametra  $\mu$  je zvolená užívateľom. V ďalších iteráciách sa táto hodnota mení v závislosti od pomeru prírastkov

$$\rho = \frac{F(\mathbf{x}) - F(\mathbf{x} + \mathbf{h}_{lm})}{L(0) - L(\mathbf{h}_{lm})}. \quad (2.15)$$



V menovateli je lineárna aproximácia funkcie  $F$  popísaná pri Gauss-Newtonovej metóde (2.10).

Veľká hodnota koeficientu  $\rho$  naznačuje, že  $L(\mathbf{h}_{lm})$  je dobrou aproximáciou funkcie  $F(\mathbf{x} + \mathbf{h}_{lm})$ . V tom prípade môžeme zmenšiť hodnotu  $\mu$ , aby sme sa dostali bližšie ku Gauss-Newtonovej iterácii a urýchlili tak konvergenciu k optimálnemu riešeniu.

Ak je hodnota  $\rho$  malá, prípadne aj záporná, poukazuje to na veľmi zlú aproximáciu  $F$  pomocou  $L(\mathbf{h}_{lm})$ . V tomto prípade by sa mala hodnota parametra  $\mu$  zväčšiť, aby sme dosiahli smer najväčšieho spádu a skrátili dĺžku kroku.

V praxi sa používa napríklad takáto stratégia zmeny veľkosti parametra  $\mu$ :

- ak  $\rho < 0.25$  tak  $\mu \mapsto 2\mu$
- ak  $0.25 \leq \rho \leq 0.75$  tak  $\mu$  sa nezmení
- ak  $\rho > 0.75$  tak  $\mu \mapsto \mu/3$ .

## 2.3 Moderné metódy

Základná myšlienka algoritmov založených na Gauss-Newtonovej metóde je aproximácia hessiánu (1.14) ( $\mathbf{J}^\top \mathbf{J} + \mathbf{A}$ ) výrazom  $\mathbf{J}^\top \mathbf{J}$ . Pri týchto metódach predpokladáme, že  $\mathbf{A} = \mathbf{A}(\mathbf{x})$  je malé v porovnaní s  $\mathbf{J}^\top \mathbf{J}$ . Takéto úlohy nazývame úlohy s malými reziduami. V opačnom prípade majú vyššie spomenuté algoritmy problémy nájsť optimálne riešenie; ich konvergencia je veľmi pomalá a pri niektorých prípadoch zlyhávajú úplne.

Pre efektívne riešenie úloh s veľkými reziduami je nutné zahrnúť informáciu o reziduálnej zložke obsiahnutú v  $\mathbf{A}(\mathbf{x})$  do aproximácie Hessiánu. Podľa (1.14)

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^m f_i(x) \mathbf{f}_i''(\mathbf{x}). \quad (2.16)$$

Pri presnom výpočte tohto výrazu je nutné vyčísliť  $mn^2$  druhých derivácií. Vo všeobecnosti je toto veľmi výpočtovo náročné, takisto aj nahradenie derivácií pomocou konečných diferencií.

Optimálne sa javí aproximovanie pomocou kvázinewtonovských metód. Na rozdiel od metód nelineárneho programovania nie je potrebné aproximovať celý Hessián, keďže časť  $\mathbf{J}^\top \mathbf{J}$  vieme presne vypočítať. Kvázinewtonovskú aproximáciu tak môžeme použiť len na  $\mathbf{A}(\mathbf{x})$ .

Ďalší možný spôsob je použiť hybridnú metódu, ktorá prepína medzi klasickou (napr. Levenberg - Marquardtovou) a kvázinewtonovskou metódou podľa toho, ktorá z týchto metód vykazuje pre danú funkciu lepšiu konvergenciu. Takáto metóda je popísaná v časti (2.3.2).

### 2.3.1 Kvázinewtonovské metódy

Základnou myšlienkou kvázinewtonovských metód (v ďalšom texte označované aj ako QN metódy) je aproximácia Hessovej (resp. inverznej Hessovej) matice

pomocou gradientov vypočítaných v jednotlivých iteráciách. Aproximáciou inverznej Hessovej matice odpadá v každej iterácii nutnosť riešiť sústavu lineárnych rovníc pri výpočte kroku. Označme aproximáciu Hessiánu v  $i$ -tej iterácii ako  $\mathbf{B}_i$  a inverzného Hessiánu ako  $\mathbf{H}_i$ . Potom pre  $\mathbf{B}_i, \mathbf{H}_i$  môžeme odvodiť nasledovnú kvázinewtonovskú podmienku, ktorú musia tieto aproximácie spĺňať:

$$\mathbf{H}_+ \mathbf{y} = \mathbf{p} \quad (2.17)$$

$$\mathbf{B}_+ \mathbf{p} = \mathbf{y} \quad (2.18)$$

kde  $\mathbf{y} = \nabla F_+ - \nabla F$  a  $\mathbf{p} = \mathbf{x}_+ - \mathbf{x}$  (dolným indexom  $+$  sa označuje hodnota danej premennej v nasledujúcej iterácii, t.j.  $\mathbf{x} \equiv \mathbf{x}_i$ ,  $\mathbf{x}_+ \equiv \mathbf{x}_{i+1}$ ).

Pri aproximácii v ďalšej iterácii využijeme hodnoty vypočítané v predchádzajúcej iterácii. Maticu  $\mathbf{H}$  aktualizujeme podľa vzťahu

$$\mathbf{H}_+ = \mathbf{H} + \Delta \mathbf{H}, \quad (2.19)$$

kde korekčná matica  $\Delta \mathbf{H}$  sa konštruuje pomocou známych vektorov  $\mathbf{p}, \mathbf{y}$  a matice  $\mathbf{H}$  tak, aby  $\mathbf{H}_+$  spĺňala kvázinewtonovskú podmienku (2.17).

Často využívané tvary korekčnej matice sú napr. tieto:

$$\text{DFP:} \quad \Delta \mathbf{H} = \frac{\mathbf{p}\mathbf{p}^\top}{\mathbf{p}^\top \mathbf{y}} - \frac{\mathbf{H}\mathbf{y}\mathbf{y}^\top \mathbf{H}}{\mathbf{y}^\top \mathbf{H}\mathbf{y}} \quad (2.20)$$

$$\text{BFGS:} \quad \Delta \mathbf{H} = \left( \mathbf{1} + \frac{\mathbf{y}^\top \mathbf{H}\mathbf{y}}{\mathbf{p}^\top \mathbf{y}} \right) \frac{\mathbf{p}\mathbf{p}^\top}{\mathbf{p}^\top \mathbf{y}} - \frac{\mathbf{H}\mathbf{y}\mathbf{p}^\top - \mathbf{p}\mathbf{y}^\top \mathbf{H}}{\mathbf{p}^\top \mathbf{y}} \quad (2.21)$$

$$\text{SR1:} \quad \Delta \mathbf{H} = \frac{(\mathbf{p} - \mathbf{H}\mathbf{y})(\mathbf{p} - \mathbf{H}\mathbf{y})^\top}{(\mathbf{p} - \mathbf{H}\mathbf{y})^\top \mathbf{y}} \quad (2.22)$$

Pri úlohách nelineárnej regresie však netreba aproximovať celý Hessián, keďže jeho lineárnu zložku vieme exaktne vypočítať. Majme aproximáciu  $\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{x})$  časti Hessiánu  $\mathbf{A}(\mathbf{x})$ . Potom aproximácia Hessiánu má tvar  $\mathbf{B} = \mathbf{J}^\top \mathbf{J} + \tilde{\mathbf{A}}$ . Aplikujeme na  $\mathbf{B}_{i+1}$  kvázinewtonovskú podmienku:

$$\mathbf{B}_+ \mathbf{p} = \mathbf{y} = \nabla F_+ - \nabla F \quad (2.23)$$

resp.

$$(\mathbf{J}_+^\top \mathbf{J}_+ + \tilde{\mathbf{A}}_+) \mathbf{p} = \mathbf{J}_+^\top \mathbf{f}_+ - \mathbf{J}^\top \mathbf{f} \quad (2.24)$$

Z toho dostávame analógiu kvázinewtonovskej podmienky pre  $\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{x})$ :

$$\tilde{\mathbf{A}}_+ \mathbf{p} = \tilde{\mathbf{y}}, \quad (2.25)$$

kde

$$\tilde{\mathbf{y}} = \mathbf{J}_+^\top \mathbf{f}_+ - \mathbf{J}^\top \mathbf{f} - \mathbf{J}_+^\top \mathbf{J}_+ \mathbf{p}. \quad (2.26)$$

Pri výpočte ďalšej iterácie sa potom pre konštrukciu korekčnej matice  $\Delta \mathbf{H}$  použije napr. niektorý zo vzťahov (2.20 - 2.22), v ktorom sa miesto  $\mathbf{y}$  dosadí  $\tilde{\mathbf{y}}$  z výrazu (2.26).

Kvázinewtonovské metódy na aproximáciu  $\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{x})$  nezaručujú konvergenciu ako u metód na aproximáciu celého Hessiánu. Dôvodom je fakt, že matica  $\mathbf{A}(\mathbf{x})$  nemusí byť kladne definitná (čo je jeden z predpokladov konvergenencie daných metód) a v skutočnosti je často aj singulárna. Keďže je však  $\mathbf{A}(\mathbf{x})$  symetrická, je logické požadovať, aby sa aj  $\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{x})$  upravovala ako symetrická matica, teda aby aj  $\Delta \mathbf{H}$  bola symetrická.

### 2.3.2 Hybridná metóda

Táto metóda kombinuje Levenberg - Marquardtovu metódu s kvázinewtonovskou metódou. Levenberg - Marquardtova metóda dosahuje kvadratickú konvergenciu, ak je v bode optimálneho riešenia  $F(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$  a lineárnu konvergenciu v ostatných prípadoch (dôkaz v [MNT04, str.22]), zatiaľ čo kvázinewtonovská metóda konverguje vo všetkých prípadoch superlineárne. Iterácie sa začínajú Levenberg - Marquardtovou metódou. Ak sa počas iterácií vyhodnotí  $F(\mathbf{x}^*)$  ako signifikantne nenulová hodnota, metóda prepne na kvázinewtonovský algoritmus, ktorý v tomto prípade dosahuje rýchlejšiu konvergenciu. Počas iterácií môže nastať aj situácia, kedy sa algoritmus prepne naspäť na Levenberg - Marquardtovu metódu.

Kritériom na zmenu metódy je splnenie podmienky

$$\|\nabla F(\mathbf{x})\|_\infty < 0.02F(\mathbf{x}) \quad (2.27)$$

v troch po sebe nasledujúcich iteráciách. Splnenie tejto podmienky naznačuje, že postupnosť konverguje k optimálnemu riešeniu, pre ktoré je  $\nabla F(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$  a  $F(\mathbf{x}^*)$  je signifikantne nenulové.

Pri kvázinewtonovskej metóde máme v danej iterácii aproximáciu  $\mathbf{B}$  Hessiánu  $\nabla^2 F(\mathbf{x})$  a krok  $\mathbf{h}_{qn}$  nájdeme riešením

$$\mathbf{B}\mathbf{h}_{qn} = -\nabla F(\mathbf{x}). \quad (2.28)$$

Na začiatku máme aproximáciu Hessiánu  $\mathbf{B} = \mathbf{I}$  a v ďalších iteráciách ju upravujeme pomocou BFGS metódy

$$\mathbf{B}_+ = \mathbf{B} + \frac{\mathbf{y}\mathbf{y}^\top}{\mathbf{p}^\top \mathbf{y}} - \frac{\mathbf{v}\mathbf{v}^\top}{\mathbf{p}^\top \mathbf{v}} \quad (2.29)$$

kde  $\mathbf{p} = \mathbf{x}_+ - \mathbf{x}$ ;  $\mathbf{y} = \mathbf{J}_+^\top \mathbf{J}_+ \mathbf{p} + (\mathbf{J}_+ - \mathbf{J})^\top \mathbf{f}(\mathbf{x}_+)$ ;  $\mathbf{v} = \mathbf{B}\mathbf{p}$ , pričom  $\mathbf{B}$  sa aktualizuje len za podmienky  $\mathbf{p}^\top \mathbf{y} > 0$ . Na rozdiel od (2.21) tu používame tzv. *priamy* tvar BFGS, teda aproximujeme Hessián a nie inverzný Hessián. Preto má vzorec (2.29) tvar podobný inverznej DFP (2.20) - ide o tzv. *komplementaritu* týchto vzorcov.

Pokiaľ kvázinewtonovská metóda nevykazuje dobrú konvergenciu, prepne sa algoritmus naspäť na Levenberg - Marquardtovu metódu. Keďže v bode minima je  $\|\nabla F(\mathbf{x}^*)\| = 0$ , dobrá konvergencia je indikovaná rapídym poklesom hodnoty  $\|\nabla F(\mathbf{x})\|$ . Ak tieto hodnoty neklesajú dostatočne rýchlo, algoritmus sa prepne na Levenberg - Marquardtovu metódu.

### 2.3.3 Broydenova metóda s interpoláciou

Táto metóda je prevzatá z článku [Eri97]. V tomto článku je popísaná kvázinewtonovská metóda, ktorá pre aproximáciu Hessiánu využíva Broydenovu triedu kvázinewtonovských aproximácií. Do tejto triedy aproximácií patria napr. aj spomínané BFGS a DFP metódy.

Majme aproximáciu Hessiánu  $\mathbf{B}$  a upravujme ju podľa vzťahu

$$\mathbf{B}_+ = \mathbf{B} + \Delta\mathbf{B}(\mathbf{p}, \mathbf{y}, \mathbf{B}), \quad (2.30)$$

kde  $\Delta\mathbf{B}$  je symetrická matica nízkeho stupňa. Broydenovu triedu kvázinewtonovských aproximácií môžeme zapísať v tvare

$$\Delta_1\mathbf{B}(\mathbf{p}, \mathbf{y}, \mathbf{B}, \Phi) = \frac{\mathbf{y}\mathbf{y}^\top}{\mathbf{p}^\top\mathbf{y}} - \frac{\mathbf{B}\mathbf{p}\mathbf{p}^\top\mathbf{B}^\top}{\mathbf{p}^\top\mathbf{B}\mathbf{p}} + \Phi(\mathbf{p}^\top\mathbf{B}\mathbf{p})\mathbf{u}\mathbf{u}^\top \quad (2.31)$$

$$\mathbf{u} = \frac{\mathbf{y}}{\mathbf{p}^\top\mathbf{y}} - \frac{\mathbf{B}\mathbf{p}}{\mathbf{p}^\top\mathbf{B}\mathbf{p}}. \quad (2.32)$$

Najpoužívanejšie hodnoty parametra  $\Phi$  sú

$$\text{BFGS:} \quad \Phi = 0 \quad (2.33)$$

$$\text{DFP:} \quad \Phi = 1 \quad (2.34)$$

$$\text{SR1:} \quad \Phi = \frac{\mathbf{p}^\top\mathbf{y}}{\mathbf{p}^\top\mathbf{y} - \mathbf{p}^\top\mathbf{B}\mathbf{p}}. \quad (2.35)$$

Broydenova parametrická trieda sa dá zapísať aj iným spôsobom:

$$\Delta_2\mathbf{B}(\mathbf{p}, \mathbf{y}, \mathbf{B}, \mathbf{v}) = \frac{(\mathbf{y} - \mathbf{B}\mathbf{p})\mathbf{v}^\top + \mathbf{v}(\mathbf{y} - \mathbf{B}\mathbf{p})^\top}{\mathbf{v}^\top\mathbf{p}} - \frac{\mathbf{p}^\top(\mathbf{y} - \mathbf{B}\mathbf{p})\mathbf{v}\mathbf{v}^\top}{(\mathbf{v}^\top\mathbf{p})^2} \quad (2.36)$$

a príslušné hodnoty parametra  $\mathbf{v}$  sú:

$$\text{BFGS:} \quad \mathbf{v} = \mathbf{y} + \left( \frac{\mathbf{p}^\top\mathbf{y}}{\mathbf{p}^\top\mathbf{B}\mathbf{p}} \right)^{\frac{1}{2}} \mathbf{B}\mathbf{p} \quad (2.37)$$

$$\text{DFP:} \quad \mathbf{v} = \mathbf{y} \quad (2.38)$$

$$\text{SR1:} \quad \mathbf{v} = \mathbf{y} - \mathbf{B}\mathbf{p}. \quad (2.39)$$

Pri úlohách nelineárnej regresie budeme aproximovať len nelineárnu časť  $\mathbf{A}(\mathbf{x})$  Hessiánu, jej aproximáciu v  $k$ -tej iterácii označme  $\mathbf{G}_k$ . V tejto metóde použijeme iný tvar kvázinewtonovskej podmienky (2.25, 2.26), a to

$$\mathbf{y}_k^\# = (\mathbf{J}_k - \mathbf{J}_{k-1})^\top \mathbf{f}_k = \mathbf{G}_{k+1}\mathbf{p}_k. \quad (2.40)$$

Jeho výhodou je, že neobsahuje lineárny člen  $\mathbf{J}^\top\mathbf{J}$ . Tento člen môže byť zle podmienený, čo má za následok nepresné aproximácie. Preto je výhodnejšie použiť tvar (2.40).

Pri riešení úloh potrebujeme zabezpečiť, aby prvky matice  $\mathbf{G}_k$  neboli príliš veľké. To sa zabezpečí oddelením veľkosti reziduálnej zložky od veľkosti funkcie  $\mathbf{f}$ , teda vo výpočtoch použijeme

$$\mathbf{y}_k^\# = (\mathbf{J}_k - \mathbf{J}_{k-1})^\top \frac{\mathbf{f}_k}{\|\mathbf{f}_k\|} \quad (2.41)$$

a potom aproximujeme Hessián pomocou

$$\mathbf{H}_k = (\mathbf{J}_k^\top \mathbf{J}_k) + \|\mathbf{f}_k\| \mathbf{G}_{k+1}. \quad (2.42)$$

V tejto metóde sa pri kvázinewtonovskej aproximácii nepoužíva pevne zvolený Broydenov parameter  $\Phi$ , ale aj tento parameter sa vo výpočte berie ako premenná. Keď sa  $\Phi$  môže pri výpočtoch meniť, dá sa často dosiahnuť oveľa rýchlejšia konvergencia ako pri metódach s pevne zvoleným parametrom  $\Phi$ . Na úpravu hodnoty tohto parametra využijeme informácie z predchádzajúcich krokov.

Keďže  $\mathbf{p}_k$  je ortogonálne na  $\mathbf{u}_k$ ,  $\Phi$  sa nedá určiť pomocou informácie obsiahnutej v  $\mathbf{p}_k$ . Namiesto toho použijeme informáciu z predchádzajúcej iterácie. Vieme ľahko aproximovať druhú deriváciu v smere  $\mathbf{p}_p = \mathbf{x}_k - \mathbf{x}_{k-2}$ . Túto informáciu potom využijeme pri určení optimálneho  $\Phi$  pre výpočet  $\mathbf{B}_{k+1}$ .

Pri tomto algoritme najskôr vypočítame pomocnú aproximáciu  $\overline{\mathbf{G}}_k$  s ľubovoľným parametrom  $\Phi$  ako

$$\overline{\mathbf{G}}_k = \mathbf{G}_k + \Delta_1 \mathbf{G}(\mathbf{p}_k, \mathbf{y}_k^\#, \mathbf{G}_k, \Phi), \quad (2.43)$$

následne vypočítame numerickú aproximáciu druhej derivácie v smere  $\mathbf{p}_k$ :

$$\mathbf{d}_p = 2 \frac{(\mathbf{f}_k)^\top (\mathbf{f}_p - (\mathbf{f}_k + \mathbf{J}_k \mathbf{p}_p))}{\|\mathbf{f}_k\|}. \quad (2.44)$$

Chceme určiť  $\Phi$  tak, aby platilo  $\mathbf{d}_p = \mathbf{p}_p^\top \mathbf{G}_{k+1} \mathbf{p}_p$ , z čoho dostaneme

$$\Phi = \frac{\mathbf{d}_p - \mathbf{p}_p^\top \overline{\mathbf{G}}_k \mathbf{p}_p}{\mathbf{p}_k^\top \mathbf{G}_k \mathbf{p}_k (\mathbf{p}_p^\top \mathbf{u}_k)^2}. \quad (2.45)$$

Novú hodnotu  $\mathbf{G}_{k+1}$  určíme ako

$$\mathbf{G}_{k+1} = \overline{\mathbf{G}}_k + \Phi (\mathbf{p}_k^\top \mathbf{G}_k \mathbf{p}_k) \mathbf{u}_k \mathbf{u}_k^\top \quad (2.46)$$

a výsledná aproximácia Hessiánu bude

$$\mathbf{H}_k = \mathbf{J}_k^\top \mathbf{J}_k + \|\mathbf{f}_k\| \mathbf{G}_{k+1}. \quad (2.47)$$

Smer  $\mathbf{h}$  určíme ako riešenie rovnice

$$\mathbf{H}_k \mathbf{h} = -\nabla F_k. \quad (2.48)$$

Dĺžku kroku  $\lambda$  určíme analogicky ako v predchádzajúcich metódach tak, aby sa minimalizovala funkčná hodnota funkcie  $F(\mathbf{x})$  v smere  $\mathbf{h}$ , teda ako tzv. optimálny krok.

Ďalšia iterácia potom bude

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \lambda \mathbf{h}. \quad (2.49)$$

### 2.3.4 QN metóda s upravenou kvázinewtonovskou podmienkou

Táto metóda je prevzatá z článku [ZXZ03]. Jeho autori v ňom predstavili nový tvar kvázinewtonovskej podmienky pre aproximáciu nelineárnej zložky Hessiánu, ktorý odvodili z upravenej kvázinewtonovskej podmienky pre aproximáciu celého Hessiánu.

Riešime úlohu nelineárnej regresie:

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} F(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{f}(\mathbf{x})^\top \mathbf{f}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^m (f_i(\mathbf{x}))^2. \quad (2.50)$$

Gradient a Hessián funkcie  $F$  majú tvar

$$\nabla F(\mathbf{x}) = \mathbf{J}(\mathbf{x})^\top \mathbf{f}(\mathbf{x}) \quad (2.51)$$

$$\nabla^2 F(\mathbf{x}) = \mathbf{J}(\mathbf{x})^\top \mathbf{J}(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^m f_i(x) \nabla^2 \mathbf{f}_i(x) \quad (2.52)$$

$$= \mathbf{J}(\mathbf{x})^\top \mathbf{J}(\mathbf{x}) + \mathbf{A}(x) \quad (2.53)$$

V  $k$ -tej iterácii aproximujeme Hessián pomocou

$$\mathbf{B}_k = \mathbf{J}(x_k)^\top \mathbf{J}(x_k) + \mathbf{G}_k. \quad (2.54)$$

Časť  $\mathbf{J}(x_k)^\top \mathbf{J}(x_k)$  vieme presne vypočítať a výraz  $\mathbf{G}_k$  je aproximáciou výrazu  $\mathbf{A}(\mathbf{x}_k)$ .

$\mathbf{G}_k$  môžeme aproximovať napr. pomocou (2.36):

$$\mathbf{G}_+ = \mathbf{G} + \Delta_2(\mathbf{p}, \mathbf{y}^\#, \mathbf{G}, \mathbf{v}) \quad (2.55)$$

kde

$$\Delta_2(\mathbf{p}, \mathbf{y}^\#, \mathbf{G}, \mathbf{v}) = \frac{(\mathbf{y}^\# - \mathbf{G}\mathbf{p})\mathbf{v}^\top + \mathbf{v}(\mathbf{y}^\# - \mathbf{G}\mathbf{p})^\top}{\mathbf{v}^\top \mathbf{p}} - \frac{\mathbf{p}^\top (\mathbf{y}^\# - \mathbf{G}\mathbf{p}) \mathbf{v} \mathbf{v}^\top}{(\mathbf{v}^\top \mathbf{p})^2}. \quad (2.56)$$

$\mathbf{y}^\#$  je aproximáciou  $\mathbf{A}\mathbf{p}$  z kvázinewtonovskej podmienky. Existuje viacero rôznych tvarov tejto podmienky, napr.

$$\mathbf{y}^\# = \mathbf{J}_+^\top \mathbf{f}_+ - \mathbf{J}^\top \mathbf{f}. \quad (2.57)$$

Takisto sa rozličné metódy odlišujú tvarom použitej funkcie  $\mathbf{v}$ , napr.

$$\mathbf{v} = \mathbf{y} + \tau \rho \mathbf{B}^s \mathbf{p}, \quad (2.58)$$

kde  $\mathbf{y} = \mathbf{y}^\# + (\mathbf{J}_+^\top \mathbf{J}_+) \mathbf{p}$ ,  $\mathbf{B}^s = \mathbf{G} + \mathbf{J}_+^\top \mathbf{J}_+$ ,  $\rho = \sqrt{\mathbf{p}^\top \mathbf{y} / \mathbf{p}^\top \mathbf{B}^s \mathbf{p}}$ ,  $\tau \in [0, 1]$ . Pre  $\tau = 0$  dostávame DFP metódu a pre  $\tau = 1$  ide o BFGS metódu. Bolo dokázané, že tieto metódy konvergujú superlineárne.

Pokiaľ upravíme aproximáciu Hessiánu (2.54) analogicky ako v (2.42)

$$\mathbf{B} = \mathbf{J}^\top \mathbf{J} + \|\mathbf{f}\| \mathbf{A} \quad (2.59)$$

a

$$\hat{\mathbf{y}}^\# = (\mathbf{J}_+ - \mathbf{J})^\top \frac{\mathbf{f}_+}{\|\mathbf{f}_+\|}, \quad (2.60)$$

dostávame algoritmus, ktorý konverguje superlineárne pre nenulové reziduá a dokonca až kvadraticky v prípade nulových reziduí. Dôkaz je uvedený v [ZXZ03].

Teraz predstavíme novú kvázinewtonovskú podminku. Pre všeobecnú optimalizačnú úlohu

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} f(\mathbf{x})$$

má táto podmienka tvar

$$\mathbf{B}_+ \mathbf{p} = \tilde{\mathbf{y}} \quad (2.61)$$

kde je navrhované  $\tilde{\mathbf{y}}$  v tvare

$$\tilde{\mathbf{y}} = \mathbf{y} + \frac{\gamma}{\|\mathbf{p}\|^2} \mathbf{p} \quad (2.62)$$

$$\gamma = 3\mathbf{p}^\top \mathbf{y} - 6(F_+ - F). \quad (2.63)$$

Na základe tejto všeobecnej kvázinewtonovskej podmienky autori článku odvodili analogickú podmienku pre aproximáciu  $\mathbf{G}$  v tvare

$$\tilde{\mathbf{y}}^\# = \mathbf{J}_+^\top \mathbf{f}_+ - \mathbf{J}^\top \mathbf{f}_+ + \frac{3\mathbf{f}_+}{\|\mathbf{p}\|^2} \left[ (\mathbf{J}_+ + \mathbf{J})\mathbf{p} - 2(F_+ - F) \right] \mathbf{p} \quad (2.64)$$

V [ZXZ03] je tiež odvodené, že pre takto navrhnuté  $\mathbf{y}^\#$ ,  $\tilde{\mathbf{y}}^\#$  platia nasledujúce vzťahy:

$$\left( \frac{\mathbf{p}}{\|\mathbf{p}\|} \right)^\top (\mathbf{A}_+ \mathbf{p} - \mathbf{y}^\#) = O(\|\mathbf{p}\|^2) \quad (2.65)$$

$$\left( \frac{\mathbf{p}}{\|\mathbf{p}\|} \right)^\top (\mathbf{A}_+ \mathbf{p} - \tilde{\mathbf{y}}^\#) = O(\|\mathbf{p}\|^3) \quad (2.66)$$

Z nich vidíme, že navrhnuté  $\tilde{\mathbf{y}}^\#$  je o jeden rád presnejšou aproximáciou  $\mathbf{A}_+ \mathbf{p}$  ako pôvodné  $\mathbf{y}^\#$  (2.57). Preto metódy využívajúce  $\tilde{\mathbf{y}}^\#$  dosahujú lepšiu aproximáciu Hessiánu a tým pádom aj rýchlejšiu konvergenciu k optimálnemu riešeniu.

## Kapitola 3

# Numerické experimenty

V tejto kapitole sa budeme snažiť experimentálne overiť vlastnosti rôznych metód popísaných v teoretickej časti pri riešení rôznych typov úloh nelineárnej regresie. Porovnáme efektivitu klasických a moderných metód pri riešení úloh s malými aj veľkými reziduami.

### 3.1 Teoretický popis experimentov

Všetky výpočty sú programované v programovacom jazyku Octave. Octave je open-source matematický programovací jazyk, ktorý je z väčšej časti kompatibilný s Matlab-om. Octave je voľne dostupný na internete (<http://www.octave.org>). Výpis použitého programu sa nachádza v dodatku tejto práce.

#### 3.1.1 Použité metódy

V experimentoch sa zameriame na porovnanie klasických a moderných metód riešenia úloh nelineárnej regresie na týchto metódach:

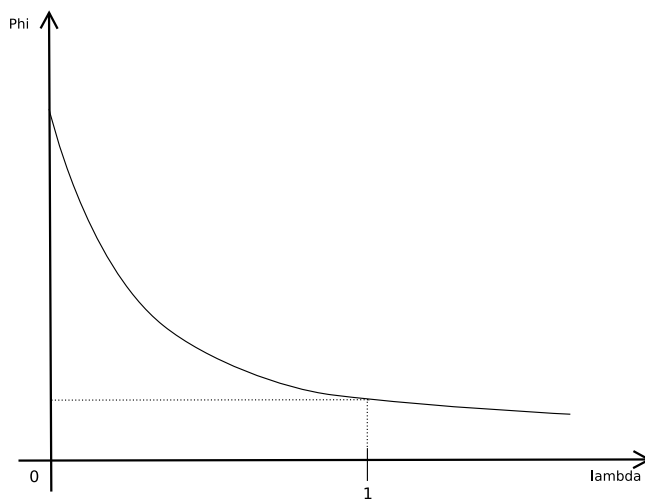
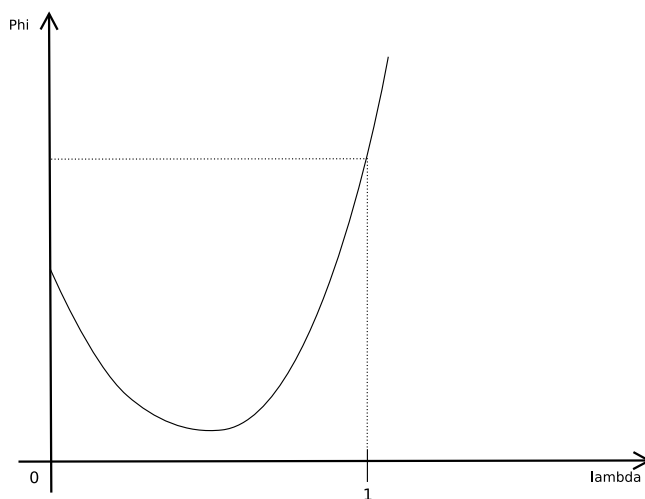
- Klasické metódy budú reprezentované *Gauss-Newtonovou metódou* (2.2.1)
- Ako zástupcu moderných metód v tejto práci použijeme *kvázinewtonovskú BFGS metódu*, ktorá bola popísaná pri popise hybridnej metódy v časti (2.3.2).

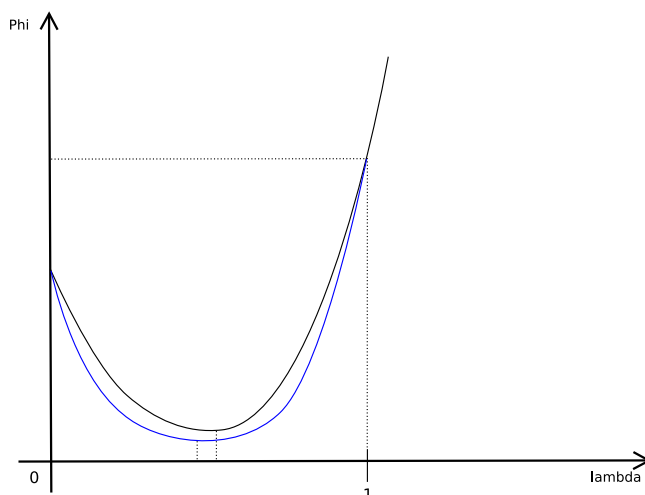
V obidvoch prípadoch použijeme tri rôzne spôsoby voľby dĺžky kroku:

- *Bez optimalizácie kroku* - zvolíme optimálny krok  $\lambda = 1$  v každej iterácii.
- *Čiastočná optimalizácia kroku* - najprv zvolíme krok  $\lambda = 1$  a vypočítame  $F(x + \lambda h)$ . Ak je  $F(x + \lambda h) < F(x)$ , použijeme danú dĺžku kroku, inak zmenšíme  $\lambda$  na polovicu a zopakujeme výpočet. Príklad funkcie, kedy sa dá použiť  $\lambda = 1$  je na obr.3.1, na obr.3.2 je príklad funkcie, kedy je krok  $\lambda = 1$  príliš veľký a treba ho zmenšiť.



- *Optimalizácia kroku pomocou kvadratickej interpolácie* - na začiatku zvolíme krok  $\lambda = 1$  a vypočítame  $F(x + \lambda h)$ . Ak je  $F(x + \lambda h) < F(x)$ , použijeme danú dĺžku kroku, inak aproximujeme  $F(x)$  pomocou kvadratickej interpolácie (využijeme funkčnú hodnotu v bodoch  $\lambda = 0$ ,  $\lambda = 1$  a hodnotu derivácie v bode  $\lambda = 0$ ) a vypočítame  $\lambda$  ako argument minima tejto interpolačnej funkcie (obr 3.3).

Obr. 3.1: Vhodná voľba kroku  $\lambda = 1$ Obr. 3.2: Nevhodná voľba kroku  $\lambda = 1$



Obr. 3.3: Kvadratická interpolácia danej funkcie

### 3.1.2 Použité funkcie

Všetky metódy budeme skúmať na optimalizácii parametrov týchto funkcií:

$$f_1(a, b, t) = \frac{at}{b+t} \quad (3.1)$$

$$f_2(a, b, t) = \frac{at^2}{1+bt} \quad (3.2)$$

kde optimalizujeme parameter  $\mathbf{x} = (a, b)$ .

Vygenerujeme približné hodnoty tejto funkcie v  $m$  bodoch  $t_1, t_2, \dots, t_m$ , ktoré budú predstavovať namerané dáta  $y_i$ . Tieto sa budeme snažiť aproximovať funkciou tvaru (3.1). Potrebujeme teda určiť také parametre  $a, b$ , aby sa minimalizoval výraz

$$F(a, b) = \sum_{i=1}^m (f(a, b, t_i) - y_i)^2.$$

### 3.1.3 Popis algoritmov

Na začiatku výpočtu sa stanovia hodnoty použitých konštánt, ktoré presnejšie definujú typ danej úlohy. Ide o konštanty:

- **alfa** - dolná hranica pre reziduá
- **beta** - horná hranica pre reziduá
- **gama** - škálovanie času

- `delta` - škálovanie optimálneho riešenia
- `epsilon` - podmienka dosiahnutia optimálneho riešenia
- `m` - počet pozorovaní
- `n` - počet parametrov
- `max_iter` - maximálny počet iterácií
- `ltype` - typ výpočtu optimálneho kroku
- `cmax` - maximálny počet iterácií pri určení optimálneho kroku
- `pocet_opakovani` - počet vygenerovaných úloh

Potom je zadaných niekoľko pomocných funkcií, ktoré sa používajú v priebehu výpočtov. Sú to funkcie:

- `generuj_cas` - vygenerovanie časového intervalu  $t$
- `generuj_rezidua` - vygenerovanie reziduí so striedavými znamienkami
- `vypocet_smeru_GN` - výpočet Gauss-Newtonovského smeru (riešenie sústavy rovníc  $(\mathbf{J}^\top \mathbf{J}) \mathbf{h}_{gn} = -\mathbf{J}^\top \mathbf{f}$ )
- `smer_QN` - výpočet kvázinewtonovského smeru (aproximácia Hessiánu pomocou  $\mathbf{B}_+ = \mathbf{B} + \frac{\mathbf{y}\mathbf{y}^\top}{\mathbf{p}^\top \mathbf{y}} - \frac{\mathbf{v}\mathbf{v}^\top}{\mathbf{p}^\top \mathbf{v}}$  a výpočet smeru  $\mathbf{B}\mathbf{h}_{qn} = -\nabla F(\mathbf{x})$ )
- `vypocet_f_x` - pre zadaný parameter  $x = (a, b)$  a čas  $t$  vypočíta  $f(x, t)$
- `opt_krok` - výpočet optimálneho kroku  $\lambda$ 
  - `ltype=0` - bez optimalizácie kroku
  - `ltype=1` - čiastočná optimalizácia kroku
  - `ltype=2` - optimalizácia pomocou kvadratickej interpolácie

Výpočet prebieha nasledovným spôsobom:

Vygenerujeme časový interval  $t$ , na ktorom budeme riešiť danú úlohu. Na tomto intervale zvolíme  $m$  ekvidistantných bodov. Zvolíme si hodnoty parametrov  $a, b$  a pre týchto  $m$  bodov vypočítame hodnoty  $f(a, b, t)$ . Hodnoty  $a, b$  budú predstavovať nami zvolené "optimálne" riešenie.

Vygenerujeme  $m$  hodnôt reziduí striedavo z intervalov  $[\alpha, \beta]$  resp.  $[-\beta, -\alpha]$  a tieto hodnoty pripočítame k hodnotám funkcie  $f(a, b, t)$ . Takto dostávame nasimulované výsledky obsahujúce určité odchýlky od presného riešenia. Striedavé znamienka u reziduí by mali zabezpečiť, že pre vygenerované hodnoty bude aj naďalej optimálne riešenie blízke nami zvolenej funkcii (aby sme vedeli porovnať kvalitu nájdeného riešenia so zvoleným). Aj napriek tomuto opatreniu však môže nastať situácia, že kvôli týmto odchýlkam sa vygenerované body posunú voči pôvodnej funkcii a optimálne riešenie už nebude tvorené nami zvolenými

parametrami  $a, b$ . Preto pri výpočte optimálnych parametrov vypočítame aj hodnotu reziduí pri zvolenom riešení a pre vypočítané parametre. Porovnaním týchto hodnôt vidíme, či výpočet skonvergoval k optimálnemu riešeniu (prinajhoršom vieme povedať že našiel lepšie riešenie ako sú nami zvolené hodnoty).

Ďalej určíme štartovací bod  $\mathbf{x}$  a aplikujeme zvolené metódy. Každá metóda sa skladá z nasledujúcich krokov:

- Cyklus iterácií
  - Výpočet Jakobiánu a funkčnej hodnoty v danom bode  $x$
  - Výpočet smeru  $h$  (Gauss-Newton alebo kvázinewtonovský smer)
  - Výpočet dĺžky kroku  $\lambda$  (podľa zvolenej metódy)
  - Výpočet novej iterácie  $x_{i+1} = x_i + \lambda h$
  - Kontrola podmienky optimálneho riešenia, resp. kontrola dosiahnutia maximálneho počtu iterácií
- Výpočet reziduí pôvodnej "optimálnej" funkcie a vypočítanej funkcie a ich porovnanie
- Zapísanie výsledkov

## 3.2 Výsledky

Na obidvoch funkciách sme generovali rôzne úlohy, ktoré sme následne riešili Gauss-Newtonovou (GN) aj kvázinewtonovskou (QN) metódou. Na základe vlastností týchto funkcií boli zvolené nasledovné hodnoty parametrov:

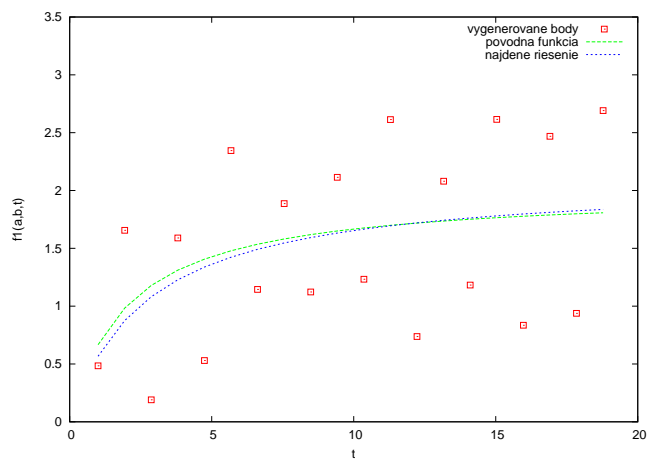
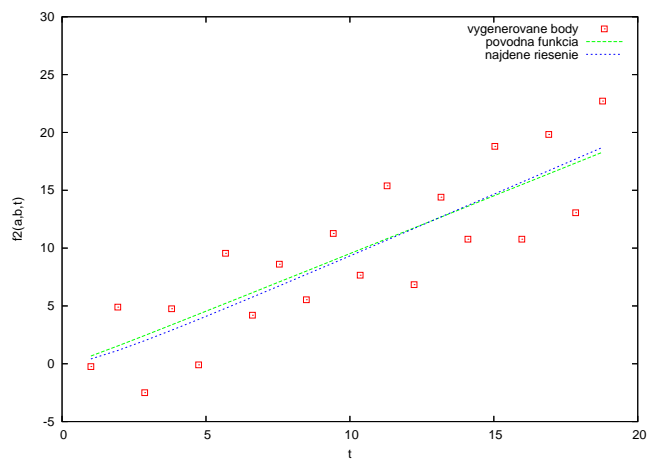
alfa	0
beta	5, 10, 20, 40, 80
gama	1.2
delta	5
epsilon	0.000001
m	20
n	2
max_iter	300
cmax	10
pocet_opakovani	100

Pre každú zvolenú veľkosť reziduí sme generovali 100 rôznych úloh, ktoré boli následne riešené šiestimi metódami (pre obidve metódy sme použili všetky tri typy voľby optimálneho kroku).

Na obrázkoch 3.4, 3.5 je ilustrovaná konvergencia Gauss-Newtonovej metódy pre tieto funkcie. Vidieť tu miernu odchýlku optimálneho riešenia od pôvodnej funkcie, ktorá je spôsobená vplyvom reziduí.

V tabuľkách (3.1 – 3.12) sú výsledky pre jednotlivé veľkosti reziduí. Hodnota *priemerný počet iterácií* udáva aritmetický priemer počtu vykonaných iterácií v

každom príklade (pokiaľ pre daný príklad metóda neskonvergovala, berie sa maximálny počet iterácií = 300). Hodnota *úspešnosť* vyjadruje, pri koľkých zo 100 testovacích príkladov metóda úspešne skonvergovala k optimálnemu riešeniu. Za úspešnú konvergenciu považujeme taký prípad, kedy je výsledný počet iterácií menší ako 300 a pre výsledné hodnoty parametrov  $(a, b)$  je suma štvorcov reziduí menšia alebo rovná ako suma štvorcov reziduí pre nami zvolené optimálne  $(a, b)$ .

Obr. 3.4: Priebeh funkcie  $f_1$ Obr. 3.5: Priebeh funkcie  $f_2$

metóda	GN	GN	GN	GN	GN
lambda	0	0	0	0	0
beta	5	10	20	40	80
priemerný počet iterácií	34.7	42.67	31.31	43.59	56.23
úspešnosť	80	78	87	85	81

Tabuľka 3.1: funkcia  $f_1$ , GN metóda, bez optimálneho kroku

metóda	GN	GN	GN	GN	GN
lambda	1	1	1	1	1
beta	5	10	20	40	80
priemerný počet iterácií	13.77	18.96	14.34	18.95	16.51
úspešnosť	100	99	100	100	100

Tabuľka 3.2: funkcia  $f_1$ , GN metóda, čiastočne optimálny krok

metóda	GN	GN	GN	GN	GN
lambda	2	2	2	2	2
beta	5	10	20	40	80
priemerný počet iterácií	25.76	34.58	33.37	35.42	51.61
úspešnosť	85	81	87	89	82

Tabuľka 3.3: funkcia  $f_1$ , GN metóda, optimálny krok

metóda	QN	QN	QN	QN	QN
lambda	0	0	0	0	0
beta	5	10	20	40	80
priemerný počet iterácií	52.95	60.26	69.11	91.17	76.84
úspešnosť	45	56	57	57	67

Tabuľka 3.4: funkcia  $f_1$ , QN metóda, bez optimálneho kroku

metóda	QN	QN	QN	QN	QN
lambda	1	1	1	1	1
beta	5	10	20	40	80
priemerný počet iterácií	35.41	42.29	43.94	51.35	50.77
úspešnosť	83	79	82	85	83

Tabuľka 3.5: funkcia  $f_1$ , QN metóda, čiastočne optimálny krok

metóda	QN	QN	QN	QN	QN
lambda	2	2	2	2	2
beta	5	10	20	40	80
priemerný počet iterácií	49.83	50.23	58.55	68.02	93.11
úspešnosť	55	64	75	80	79

Tabuľka 3.6: funkcia  $f_1$ , QN metóda, optimálny krok

metóda	GN	GN	GN	GN	GN
lambda	0	0	0	0	0
beta	5	10	20	40	80
priemerný počet iterácií	27.54	48.52	33.84	39.41	41.03
úspešnosť	75	67	67	68	74

Tabuľka 3.7: funkcia  $f_2$ , GN metóda, bez optimálneho kroku

metóda	GN	GN	GN	GN	GN
lambda	1	1	1	1	1
beta	5	10	20	40	80
priemerný počet iterácií	47.93	13.07	13.09	13.23	14.8
úspešnosť	89	90	90	90	89

Tabuľka 3.8: funkcia  $f_2$ , GN metóda, čiastočne optimálny krok

metóda	GN	GN	GN	GN	GN
lambda	2	2	2	2	2
beta	5	10	20	40	80
priemerný počet iterácií	33.23	27.31	34.98	41.68	51.38
úspešnosť	70	66	70	71	74

Tabuľka 3.9: funkcia  $f_2$ , GN metóda, optimálny krok

metóda	QN	QN	QN	QN	QN
lambda	0	0	0	0	0
beta	5	10	20	40	80
priemerný počet iterácií	83.47	94.65	106.61	125.81	126.17
úspešnosť	39	47	51	47	51

Tabuľka 3.10: funkcia  $f_2$ , QN metóda, bez optimálneho kroku

metóda	QN	QN	QN	QN	QN
lambda	1	1	1	1	1
beta	5	10	20	40	80
priemerný počet iterácií	75.32	71.44	84.4	86.89	86.15
úspešnosť	44	55	56	64	73

Tabuľka 3.11: funkcia  $f_2$ , QN metóda, čiastočne optimálny krok

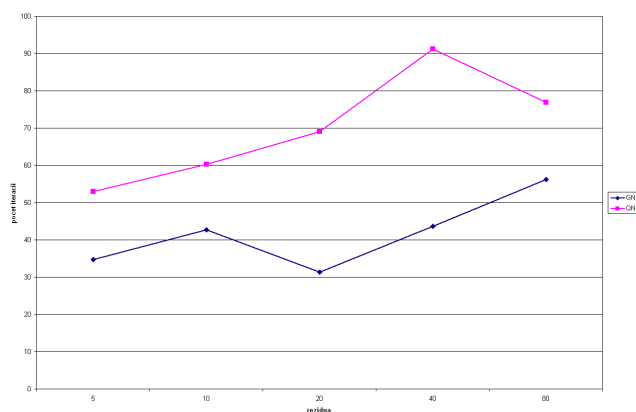
metóda	QN	QN	QN	QN	QN
lambda	2	2	2	2	2
beta	5	10	20	40	80
priemerný počet iterácií	108.47	104.12	103.8	129.93	133.95
úspešnosť	45	48	56	53	56

Tabuľka 3.12: funkcia  $f_2$ , QN metóda, optimálny krok

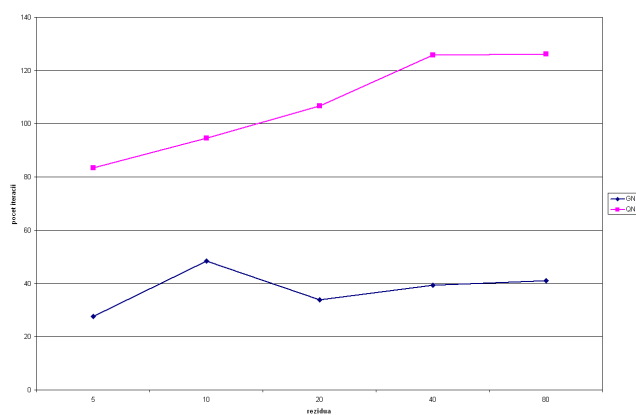


### 3.3 Porovnanie metód

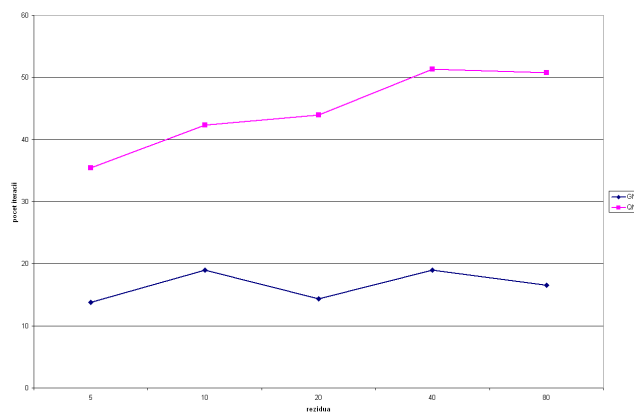
Na obr. 3.6–3.11 vidíme graficky porovnanie obidvoch metód pre rôzne typy optimálneho kroku. Z týchto obrázkov vidno, že pre nami zvolené funkcie  $f_1$ ,  $f_2$  dosahuje Gauss-Newtonova metóda porovnateľné výsledky s kvázinewtonovskou metódou a nerobia jej problém ani úlohy s veľkými reziduami. Pre takéto funkcie je totiž v nelineárnej časti Hessiánu  $\mathbf{A}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^m f_i(\mathbf{x})\mathbf{f}_i''(\mathbf{x})$  pomerne malý výraz  $\mathbf{f}_i''(\mathbf{x})$ , takže aj pre veľké reziduá je  $\mathbf{A}(\mathbf{x})$  pomerne malé a jeho zanedbanie nespôsobuje veľké problémy.



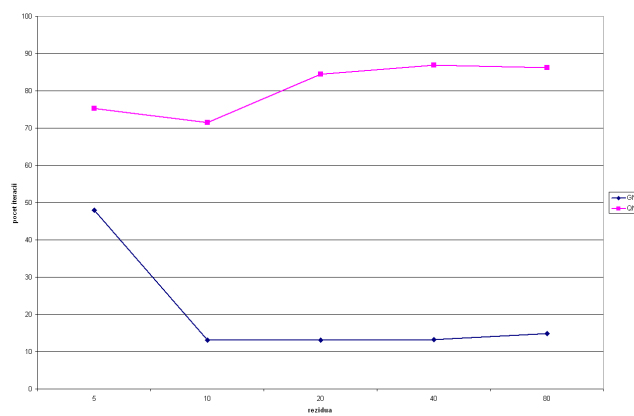
Obr. 3.6: funkcia  $f_1$  bez optimalizácie kroku



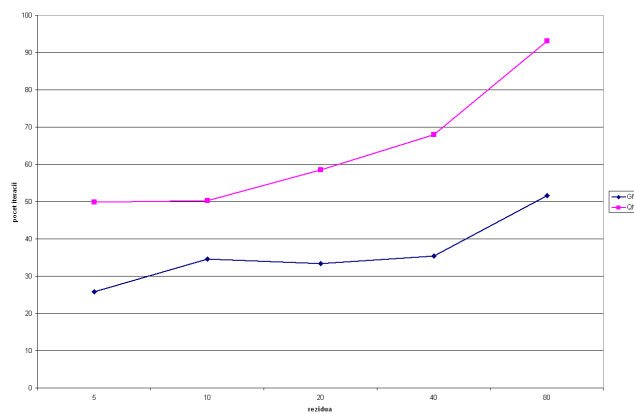
Obr. 3.7: funkcia  $f_2$  bez optimalizácie kroku



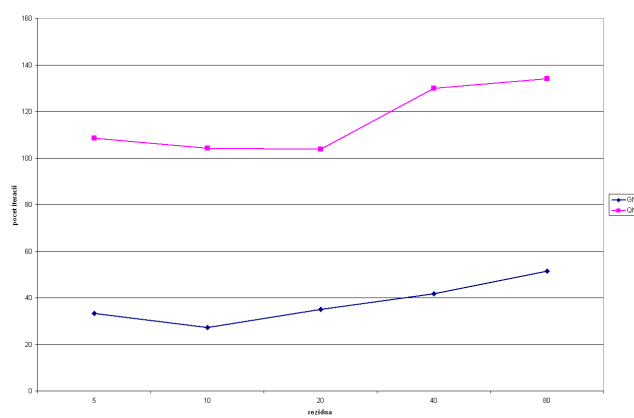
Obr. 3.8: funkcia  $f_1$  s čiastočnou optimalizáciou kroku



Obr. 3.9: funkcia  $f_2$  s čiastočnou optimalizáciou kroku



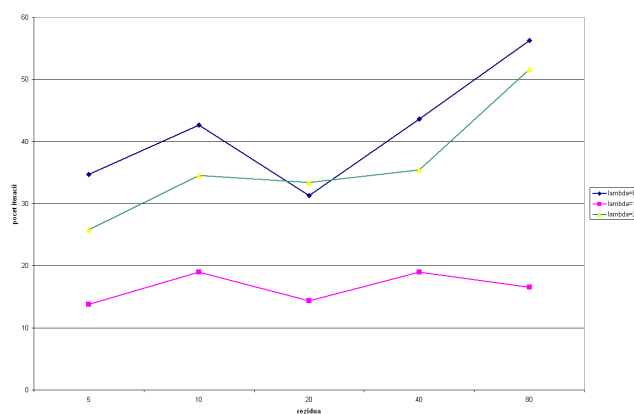
Obr. 3.10: funkcia  $f_1$  s optimalizáciou kroku



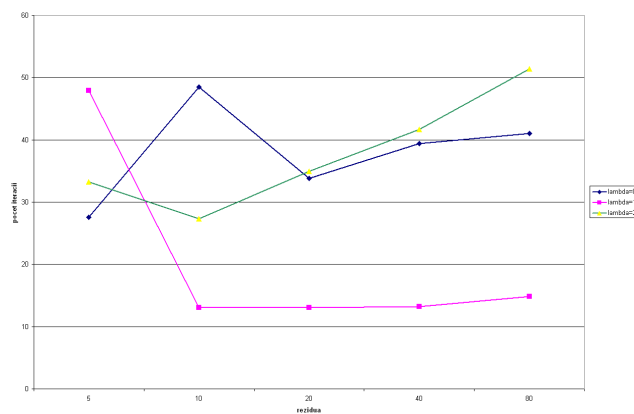
Obr. 3.11: funkcia  $f_2$  s optimalizáciou kroku

### 3.4 Porovnanie voľby dĺžky kroku

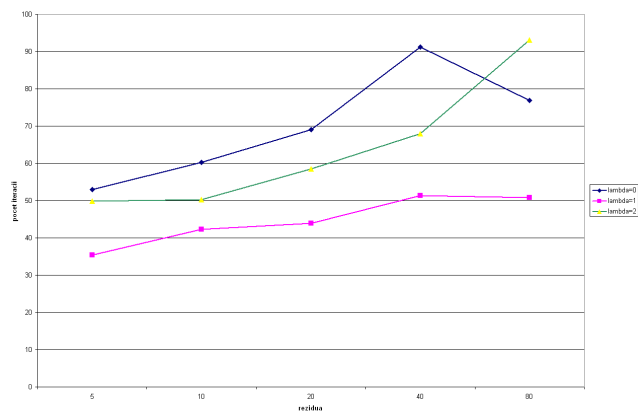
Ako je vidno z grafov (3.12–3.15), pri oboch metódach vychádzajú najlepšie výsledky pri čiastočnej optimalizácii kroku. Tieto výsledky sú v súlade s teoretickými predpokladmi, že nie je nutné v každej iterácii presne určovať dĺžku kroku, ale stačí keď určíme dĺžku kroku tak, aby bola zachovaná spádovosť metódy.



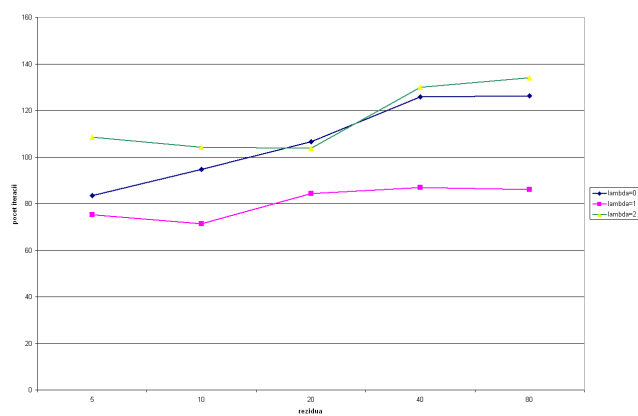
Obr. 3.12: Gauss-Newtonova metóda s rôznymi typmi kroku ( $f_1$ )



Obr. 3.13: Gauss-Newtonova metóda s rôznymi typmi kroku ( $f_2$ )



Obr. 3.14: Kvázinewtonovská metoda s různými typmi kroku ( $f_1$ )



Obr. 3.15: Kvázinewtonovská metoda s různými typmi kroku ( $f_2$ )

## Kapitola 4

### Záver

V tejto práci sme sa zaoberali metódami riešenia úloh nelineárnej regresie s veľkými reziduami. Práca poskytla prehľad o moderných riešeniach úloh nelineárnej regresie, hlavne o rôznych typoch kvázinewtonovských aproximácií.

Ukázali sme, že pri úlohách s veľkými reziduami sa nedá Hessián aproximovať len jeho lineárnou zložkou a je nutné do aproximácie zahrnúť aj informáciu o reziduálnej zložke. Lineárna aproximácia Hessiánu sa dá pri veľkých reziduách použiť len v prípade tých funkcií, kde je druhá derivácia dostatočne malá. V tom prípade tieto malé druhé derivácie kompenzujú veľkosť reziduálnej zložky v nelineárnej časti Hessiánu. Na takéto úlohy je možné použiť aj klasické metódy, ako sme mali možnosť vidieť v experimentoch.

Z experimentov takisto vidno, že pre nájdenie optimálneho riešenia nie je nutné v každej iterácii hľadať optimálnu dĺžku kroku. Stačí použiť približne optimálnu dĺžku, teda taký krok, ktorý zaručuje spádovosť danej funkcie.

V budúcnosti by ešte bolo dobré zopakovať experimenty aj na iných typoch funkcií, kde by bolo lepšie vidieť rozdiely v jednotlivých metódach.

# Výpis programu

```
clear all
clc
%-----POMOCNE FUNKCIE-----
%-----
function cas=generuj_cas(f,gama, m)
cas=zeros(1,m);
cas(1)=round(rand(1)*gama);

tau=(rand(1)*gama);
for i=[1:m-1]
cas(i+1)=cas(i)+tau;
endfor

endfunction
%-----
function rez=generuj_rezidua(m, alfa, beta)
rez=zeros(1,m);
for i=[1:m]
rez(i)=((-1)^i)*(alfa+rand(1)*(beta-alfa));
endfor
endfunction
%-----
function [smer,st]=smer_GN(J, f_x)
st=0;
smer=(J'*J)\(J'*f_x);
if (isnan(smer(1)) == 1) || isnan((smer(2)) == 1)
smer=zeros(size(smer));
st=3;
endif
endfunction
%-----
function [smer,st]=smer_QN(f, B, J, J_old, x, x_old, y, t, m, n)
st=0;
dB=zeros(n,n);
p=x_old-x;
```

```

f_x=vypocet_f_x(f,x,y,t,m);
f_x_old=vypocet_f_x(f,x_old,y,t,m);
y=J_old'*f_x_old-J'*f_x;
v=B*p;
dB=(y*y')/(p'*y)-(v*v')/(p'*v);

if p'*y>0
B=B+dB;
endif

if abs(det(B))<0.001
smer=zeros(size(smer));
st=3;
return;
endif

smer=B\(J'*f_x);

if (isnan(smer(1)) == 1) || isnan((smer(2)) == 1)
smer=zeros(size(smer));
st=3;
endif
endfunction
%-----
function f_x=vypocet_f_x(f,x,y,t,m)
f_x=zeros(m,1);
for i=[1:m]
f_x(i)=y(i)-f(x(1),x(2),t(i));
endfor
endfunction
%-----
function lambda=opt_krok(J,f,x,y,t,m,h,ltype,cmax)
if ltype==0
lambda=1;
elseif ltype==1
lambda=1;
x_base=x;
for i=[1:cmax] %pocet iteracii
f_x=vypocet_f_x(f,x,y,t,m);
F=sum((f_x).^2);
x_new=x_base+lambda*h;
f_x_new=vypocet_f_x(f,x_new,y,t,m);
F_new=sum((f_x_new).^2);
if F_new<F
break;
else

```



```

lambda=lambda/2;
endif
endfor
elseif ltype==2
lambda=1;
x_base=x;
f_x=vypocet_f_x(f,x,y,t,m);
F=sum((f_x).^2);
x_new=x_base+lambda*h;
f_x_new=vypocet_f_x(f,x_new,y,t,m);
F_new=sum((f_x_new).^2);
if F_new>F
lambda=-1/2*((-h'*(J'*f_x))/(F_new - F - (-h'*(J'*f_x))));
endif
endif
endfunction
%-----

%-----SKRIPT S VYPOCTOM-----
% zdefinovanie funkcie, ktoru budeme pouzivat
%F1
f=inline('a*t)/(b+t)','a','b','t');
f_a=inline('t/(b+t)','a','b','t');
f_b=inline('-a*t/((b+t)^2)','a','b','t');

% %F2
% f=inline('a*t*t/(1+b*t)','a','b','t');
% f_a=inline('t*t/(1+b*t)','a','b','t');
% f_b=inline('-a*t*t/((1+b*t)^2)*t','a','b','t');

% zdefinovanie konstant a inicializacia premennych
m=20;
n=2;
rand("seed", 2)
alfa=0;
beta=5;
gama=1.25;
delta=5;
epsilon=0.000001;
max_iter=300;
ltype=0;
mtype=1;
cmax=5;
pocet_opakovani=100;
stop=0;
stop2=0;

```

```
vystup=zeros(pocet_opakovani, 5);

%-----CYKLUS VYPOCTOV-----
for k=[1:pocet_opakovani]
% generovanie t
t=generuj_cas(f,gama,m);

% generovanie rezidui so striedavym znamienkom
r=generuj_rezidua(m, alfa, beta);

% zvolenie optimalneho riesenia
a_opt=round((rand(1)*delta));
b_opt=round((rand(1)*delta));

% vypocet y
for i=[1:m]
z(i)=f(a_opt, b_opt, t(i));
y(i)=f(a_opt, b_opt, t(i))+ r(i);
endfor

% startovacie hodnoty
a=1;
b=1;

%----- VYPOCET -----
x=zeros(n,1);
x_new=ones(n,1);
x_old=zeros(n,1);
x(1)=a;
x(2)=b;
B=eye(n,n);
h=zeros(n,1);
J=zeros(m,n);
J_old=zeros(m,n);
stop=0;
stop2=0;

%iteracie
poc=0;

while (poc<max_iter && sum((x_old-x_new).^2)>epsilon && stop==0)

% vypocet Jakobianu
J_old=J;
for i=[1:m]
```

```
J(i,1)=f_a(x(1), x(2), t(i));
J(i,2)=f_b(x(1), x(2), t(i));
endfor

% vypocet funkcnjej hodnoty
f_x=vypocet_f_x(f,x,y,t,m);

% vypocet smeru
if (mtype==1)
[h,stop]=smer_GN(J, f_x);
elseif (mtype==2)
[h,stop]=smer_QN(f,B,J,J_old,x,x_old,y,t,m,n);
endif

%vypocet kroku
lambda=opt_krok(J,f,x,y,t,m,h,ltype,cmax);

% iteracia
x_new=x+lambda*h;
x_old=x;
x=x_new;

poc=poc+1;
endwhile
if stop==0
if (poc==max_iter)
stop=2;
else
stop=1;
endif
endif

%vypocet funkcnnych hodnot vygenerovanej funkcie
w=zeros(1,m);
for i=[1:m]
w(i)=f(x(1),x(2),t(i));
endfor

%vypocet rezidui vyslednej funkcie

%povodna funkcia
sum_rez_f=sum((z-y).^2);
%vygenerovana funkcia
sum_rez_w=sum((w-y).^2);

if sum_rez_f<sum_rez_w
```

```
stop2=2;
else
stop2=1;
endif

vystup(k, 1)=poc;
vystup(k, 2)=sum_rez_f;
vystup(k, 3)=sum_rez_w;
vystup(k, 4)=stop;
vystup(k, 5)=stop2;

endfor
%-----KONIEC CYKLU VYPOCTOV-----

save -text vystup.txt vystup
```

# Literatúra

- [BW88] Douglas M. Bates and Donald G. Watts, *Nonlinear regression and its applications*, John Wiley & Sons, 1988.
- [Eri97] Jerry Eriksson, *Quasi-newton methods for nonlinear least squares focusing on curvatures*, BIT Numerical Mathematics **39** (1997), no. 2, 228–254.
- [Ham] Milan Hamala, *Študijné texty k prednáškam z Nelineárneho programovania*, rukopis v knižnici FMFI UK.
- [MNT04] K. Madsen, H.B. Nielsen, and O. Tingleff, *Methods for non-linear least squares problems*, Technical University of Denmark, 2004, <http://www.imm.dtu.dk/courses/02611/nllsq.pdf>.
- [SW89] George A. F. Seber and Christopher J. Wild, *Nonlinear regression*, John Wiley & Sons, 1989.
- [ZXZ03] J. Z. Zhang, Y. Xue, and K. Zhang, *A structured secant method based on a new quasi-newton equation for nonlinear least squares problems*, BIT Numerical Mathematics **43** (2003), 217–229.