

Anwendungs-Programmsystem DAPROA

DAten- und PROzessAnalyse

Version 5 .1

Stand: 31.10.2011

Schätzung nichtlinearer Parameter für explizite Modellgleichungen

mathematische Modelle

Modelle sind ein vereinfachtes Abbild der Wirklichkeit. Mit ihnen wird gearbeitet, wenn die Wirklichkeit kompliziert, sehr umfassend oder auch schwierig durchschaubar bzw. beobachtbar ist, so dass man Informationen über diese Wirklichkeit nur schwer oder teuer beschaffen kann. Oder man benutzt Modelle um etwas nachzustellen bzw. zu simulieren.

Modelle gibt es in den verschiedenen Formen: technische und physikalische Modelle, Analogiemodelle aber auch Spielzeuge, so z.B. die technische Pilotanlage, die Modelleisenbahn, die maßstäbliche Darstellung von Räumen oder Ortschaften, die technische Zeichnung, die biologische Versuchsanlage u.a.

Eine besondere Stellung nehmen mathematische Modelle ein. Mit ihnen kann man ohne etwas technisch zu bauen oder zu basteln Aussagen über die abzubildende Wirklichkeit (Prozesse, Zusammenhänge, Entwicklungen, ..) treffen. Mit ihnen kann man nachrechnen, voraus berechnen, simulieren, optimieren, untersuchen oder Voraussagen treffen.

Mathematische Modelle werden aus dem Wissen über das abzubildende Objekt gebildet. Sie können auf theoretisch fundierte Hintergründe aufbauen, sich aus den Erkenntnissen aus Beobachtungen und Experimenten ableiten, auf empirische Erfahrungen beruhen, aber auch in Form von Näherungsansätzen dargestellt werden.

Die Formen der mathematischen Modelle können sehr unterschiedlich sein: Von der einfachen linearen Gleichung, über komplizierte nichtlineare Gleichungen und gewöhnliche Differentialgleichungen bis zu partiellen Differentialgleichungen oder Integralgleichungen. Sie treten einzeln oder in Systemen, explizit oder implizit, auch als Berechnungsalgorithmen auf.

In den mathematischen Modellen treten Modellvariable(X_1, \dots, X_n) in den speziellen Ausdrücken (Funktionen) und Konstanten, den Parametern (P_1, \dots, P_m), auf. Die Parameterwerte können bekannt sein. Sind sie nicht oder nur näherungsweise bekannt müssen sie geschätzt werden. Eine effektive Schätzmethode ist die Anpassung dieser Parameter an Experimente, Messwerte oder Beobachtungswerte, die am zu modellierenden Objekt gewonnen wurden.

Aufgabe der Schätzung nichtlinearer Parameter für explizite Modelle

Der Verlauf eines mathematischen Modells $Y = f(X_1, \dots, X_n ; P_1, \dots, P_m)$ ist durch Veränderung der Parameter P_j so an Messwerte bzw. Daten der Variablen Y, X_1, \dots, X_n anzupassen, dass die Summe der Quadrate ($Y_{\text{berechnet}}$ minus Y_{gemessen}) minimal wird.

FQS = Summe_über_alle { Quadrate_von [$f(X_1, \dots, X_n) - Y_{\text{gem}}(X_1, \dots, X_n)$] }
→ Minimum

In der mathematischen Analysis erreicht man eine Lösung des Minimierungsproblems über die partiellen Ableitungen der Funktion FQS nach den Parametern $p(1), \dots, p(m)$. Dieses hier vorliegende Minimierungsproblem kann aber in der Regel nicht analytisch geschlossen gelöst werden, da unter anderem die Parameter nichtlinear sind, also auch die Ableitungen von FQS nach diesen Parametern nichtlineare Ausdrücke ergeben. Die entstehenden Gleichungssysteme lassen sich in der Regel nicht explizit nach den Parametern P_j auflösen (Im Gegensatz zur Schätzung linearer Parameter mittels linearer Regression).

Beachte: Hier steht nicht die Minimumssuche der Modellfunktion $Y = f(X_1, \dots, X_n)$ zur Debatte, sondern der oben dargestellten Funktion FQS.

Man stelle sich die Aufgabe vor, ein globales Minimum der Funktion FQS im mehrfach-dimensionalen Parameterraum zu finden.

Anschaulich heißt das z.B. im einfachsten Fall eines 2-dimensionalen Raumes in einem unbekanntem Gelände mit Bergen, Tälern, Schluchten und Gräben den tiefsten Punkt zu finden, ohne dass man das Gelände kennt oder eine Karte davon hat, bzw. es auch nicht sehen kann. Das einzige Hilfsmittel welches man bekommt ist die Höhe jedes einzelnen Geländepunktes, nicht als Bild oder Grafik sondern als Wert. Diese Wertebeschaffung kostet aber Aufwand, in diesem Fall Rechenzeit.

Zur Lösung des Problems könnte man nun ein dichtes Rasternetz über das Gelände legen und an jedem Rasterpunkt die FQS berechnen.

Angenommen das Gebiet hat eine Ausdehnung von 1km mal 1km. Will man den tiefsten Punkt(globales Minimum) mit einer Treffergenauigkeit auf 1% der Ausdehnung(10m) finden, dann sind 101^m Berechnungen der FQS notwendig (im Beispiel $m=2$, also 10201 Berechnungen). Im Fall von 4 zu schätzenden Parametern sind es 10201×10201 , also über 100 Millionen Berechnungen.

Bei einer Treffergenauigkeit von 1 Meter (0,1% der Ausdehnung) sind bereits 1001^m Berechnungen vorzunehmen, also bei 2 Schätzparametern über 1 Million, bei 3 Schätzparametern über 1 Milliarde und bei 4 Schätzparametern über 1 Billionen Berechnungen der FQS.

Man bedenke auch dabei, dass für jede Berechnung der FQS die Funktion $Y = f(X_1, \dots, X_n)$ so oft berechnet werden muss, wie hoch die Anzahl der einbezogenen Datensätze ist.

Im Falle von Forderungen nach hoher Treffergenauigkeit, bei einer Schätzparameteranzahl größer 2 und einer gewissen Menge von Datenpunkten werden die Rechenzeiten auch für schnelle Personalcomputer unzumutbar hoch. (diese Aussage gilt eventuell nicht für Groß- oder Superrechner)

Als Alternative bietet sich ein schrittweises Vorgehen bei der Minimumssuche an, unter Berücksichtigung der beim Vorgängersschritt erlangten Informationen.

In den DAPROA-Bausteinen erfolgt die Schätzung der linearen und nichtlinearen Parameter(Koeffizienten) des expliziten mathematischen Modells iterativ mittels Such- und Gradientenverfahren nach der Methode der kleinsten Fehlerquadrate:

Die Summe { der Quadrate_(berechneter_Wert Y minus gemessener Wert Y) }
wird dabei zum Minimum geführt

FQS: Summe der Fehlerquadrate => Minimum

Der Schätzparameterraum

Der Anwender bestimmt die anzupassenden Parameter, legt die Parameterstartwerte, sowie ihre unteren und oberen Grenzen fest. Mit der Wahl eines Schrittfaktors wird die normierte Schrittweite (Empfindlichkeit) der Parameter definiert.

$$\text{normierte Schrittweite} = (\text{obere Grenze} - \text{untere Grenze}) / \text{Schrittfaktor}$$

Diese Schrittweiten, je nach Verfahren und Iterationsfortschritt multipliziert mit Verfahrensfaktoren, sind mitbestimmend für die Größe der Veränderung der Schätzparameter im Iterationsverlauf. Im Beispiel:

Parameter p(j):	Startwert	14
	untere Grenze	10
	obere Grenze	20
	Schrittfaktor	50
	Anfangsschrittweite	= (20 - 10) / 50 = 0.2

Insbesondere bei den Verfahren 1 und 2 (Startpunktsuche und EVOP), aber auch im gewissen Maße beim Verfahren 3 (Gradientenverfahren) spielen die normierten Schrittweiten eine wichtige Rolle bei der Aufspannung des Rasters zur Minimumsuche bzw. Gradientenbestimmung.

Werden durch diese Schrittweiten die Raster zu klein aufgespannt, erhöht sich die Rechenzeit, was nicht weiter tragisch ist, aber es kann passieren, dass das Verfahren in einem lokalen Minimum stecken bleibt.

Werden die Raster zu groß aufgespannt, besteht wiederum die Gefahr, dass ein Minimum übergangen wird.

Mit der Festlegung der unteren und oberen Grenzen der Schätzparameter wird der Suchraum eingeschränkt. Diese Grenzen können in den Verfahren nicht überschritten werden. Man sieht, dass der Anwender mit den Eingabegrößen Startwert, Grenzen und Schrittfaktor für jeden Schätzparameter wesentliche Steuerungselemente für den Berechnungsverlauf in der Hand hat. Stößt ein Parameter an eine Grenze oder verlagert sich die Minimumsuche in eine Ecke des m-dimensionalen Parameterraumes können die Grenzen in einem neuen Versuch verschoben werden.

Achtung: Die Parameterstartwerte und -grenzen müssen so gelegt sein, dass es nicht zu einem "fatalerror" und damit Absturz bei der Berechnung von $Y = f(X_1, \dots, X_n; P_1, \dots, P_m)$ kommt, so bei Division durch Null, Logarithmus von negativen Werten, Wertebereichsüberschreitung bei Exponentialfunktionen usw.

Die eigentliche Aufgabe

Die eigentliche Aufgabe besteht ja darin die Veränderungen einer abhängigen Größe (Y) durch die Veränderungen von unabhängigen Größen (X_1, \dots, X_n) zu erklären, zu beschreiben.

Man nennt Y auch Zielgröße und die X_i Einflussgrößen.

Ein bewährtes Mittel ist es den Einfluss der X_i auf Y mittels mathematischer Ausdrücke (mathematisches Modell) darzustellen.

$$Y = f(X_1, \dots, X_n)$$

Unabhängig davon wie man zu diesem mathematischen Modell gelangt, enthält es in seinen Termen neben den Einflussgrößen X_i auch Koeffizienten (Parameter).

$$Y = f(X_1, \dots, X_n; P_1, \dots, P_m)$$

Diese Koeffizienten (Parameter) können bekannt, inhaltlich abgeleitet oder festgesetzt sein, können aber auch unbekannt sein und müssen also bestimmt werden.

Die Bestimmung wiederum kann durch Ableitung aus vorhandenem Wissen, durch Simulationsrechnungen oder durch Anpassung an Datenmengen erfolgen.

Solche Datenmengen gewinnt man aus Messungen, Beobachtungen oder gezielten Experimenten. Sie bestehen aus Datensätzen, in denen konkrete numerische Werte der Größen Y , X_1 , .. , X_n enthalten sind. Sie müssen im Sinne des mathematischen Modells einen unmittelbaren Zusammenhang dieser Größen darstellen, d.h. der Wert von Y im Datensatz ist durch den Zustand(Werte) der X_i im Datensatz entstanden.

Bei der Bestimmung der Parameterwerte werden diese Parameterwerte so gezielt variiert, dass als Ergebnis eine möglichst hohe Übereinstimmung der gemessenen Y -Werte mit den Modellrechnungen zu Y unter Benutzung dieser geschätzten Parameter herauskommt.

Wie man diese unbekanntenen Modell-Parameterwerte schätzen kann, hängt von ihrer Stellung im Modell ab:

Modell mit nur linearen Parametern a , b , c , d :

$$Y = a + b \cdot X_1 + c \cdot (X_2)^2 + d \cdot \text{EXP}(X_1 \cdot X_2)$$

Modell mit linearen Parametern a , b , c und nichtlinearen Parametern d , e

$$Y = a + b \cdot X_1 + c \cdot (X_2)^d + \text{EXP}(e \cdot X_1 \cdot X_2)$$

Modell mit nur nichtlinearen Parametern a , b , c

$$Y = \text{EXP}(a \cdot X_1^b + c \cdot X_2)$$

Liegt ein Modell mit nur linearen Parametern vor oder lässt sich ein Modell mit nichtlinearen Parametern durch Transformation(z.B. Logarithmieren) in ein ersteres umwandeln, kann man die Parameter mittels linearer Regression schätzen. In DAPROA können dafür die Bausteine TRANS, LIREV, POLMOD und REGFKT eingesetzt werden. Diese Schätzung ist exakt für die zur Verfügung stehenden Datensätze, auf denen die Berechnung beruht.

Ist mindestens ein zu schätzender Modellparameter nichtlinear kommen in der Regel Methoden der iterativen Parameterschätzung in Frage.

Die Schätzung nichtlinearer Modellparameter mit dem Ziel den Modellverlauf möglichst gut an gemessene Werte der Zielgröße(abhängige Variable des Modells) anzupassen erfolgt schrittweise durch Nutzung der in den vorigen Schritten erlangten Informationen. Die DAPROA-Bausteine EVOPGRD und EVPGRD4 realisieren dies unter Beachtung der ihnen zugeordneten Modelltypen.

Vorgehensstrategie

Eine allgemein gültige Vorgehensstrategie für vorgenannte Aufgabe gibt es nicht.

Der erste und oft ein wesentlicher Schritt ist die Bestimmung der Startwerte der zu schätzenden Parameter. Ein gute Beherrschung der inneren Zusammenhänge des Modells bzw. der Schätzaufgabe ("im Problem drinstecken, es zu überschauen"), Kenntnisse über Wirkungsweise der Modellterme und deren Parameter sind sehr von Vorteil.

Ist das Problem gering dimensional (z.B. 2 Einflussgrößen X_i , nur wenige Parameter) lassen sich auch Informationen gut aus grafischen Darstellungen von Simulationsrechnungen oder den Datengrafiken ableiten.

Wenn man die Anfangswerte der Schätzparameter nicht aus den Hintergründen und Sachverhalten des Problems eingrenzen kann, hilft nur ein stückweises Vorgehen.

Bei gering dimensionierten Problemen kommt man auch oft mit schlechten Startwerten zum Ziel. Generell sollte aber bei geringem Wissen über die Schätzparameterstartwerte der Suchraum mittels der geforderten Grenzen klein gehalten werden. Grenzanstöße können beim Neustart des Problems durch Erweiterung derselben beseitigt werden.

Einige Tipps zur Startwertfestlegung bei geringem Vorwissen:

- Enthält das Modell lineare und nichtlineare Parameter, die nichtlinearen Parameter auf vernünftige Werte konstant setzen. Dann mit Hilfe oben genannter Bausteine die linearen Parameter mittels Regressionsrechnung schätzen. Nun sie mit ihren Schätzwerten konstant setzen und die nichtlinearen Parameter iterativ anpassen. Dieser Ablauf kann mehrfach wiederholt werden.
- Enthält das Modell viele zu schätzende Parameter, diese Parameter in Gruppen einteilen. Die Parameter in den jeweiligen Gruppen sollten sich in ihrer Wirkung möglichst nicht gegenseitig beeinflussen. Nun die Parameter in einer Gruppe anpassen und die in den anderen Gruppen auf vernünftige Werte konstant setzen. Den Ablauf alternierend wiederholen.
- Die Parameterschätzung mit verschiedenen Startpunkten ($p(1), \dots, p(m)$) ausführen.
- Die Arbeit zuerst mit einem gröberen Modell mit weniger Einflussgrößen X_i und wenigen Parametern $p(j)$ beginnen und erst einmal eine größere FQS in Kauf nehmen. Dann das Modell verfeinern: schrittweise mehr X_i und $p(j)$ aufnehmen.

Fehlerdiskussion

Nach einem Parameterschätzungsschritt sind die resultierende FQS und daraus berechnet die Standardabweichung SA, ein wichtiges Maß für die Güte der Schätzung, also auch für die Güte des verwendeten mathematischen Modells.

Aus der FQS wird die Standardabweichung berechnet:

$$SA = \sqrt{\text{FQS} / (\text{Anzahl Datensätze} - 1)}$$

Die Beurteilung der SA muss im Vergleich mit dem mittleren Fehler stehen, der bei Bestimmung der gemessenen Werte von Y in den Datensätzen auftritt.

Ist dieser mittlere Datenfehler mF_y von Y bekannt oder kann er glaubwürdig geschätzt werden, und weicht die SA der Modellanpassung/Parameterschätzung nur gering, aber innerhalb des Vertrauensintervalls, von diesem Fehler mF_y ab, kann von einer gelungenen Modellanpassung/Parameterschätzung gesprochen werden.

Ein solches Ergebnis ist nicht immer Fall, zumindest nicht im beim ersten Anlauf. Bei einem weniger befriedigendem Ergebnis sollte erst einmal die Minimumssuche von verschiedenen Startpunkten und mit anderen Strategien neu gestartet werden.

Die Tatsache einer signifikanten Abweichung der SA von mF_y kann viele Ursachen haben, so unter anderem:

- Es wurde kein globales Minimum bei der Parameterschätzung gefunden. Das Verfahren steckt in einem lokalen Minimum fest.
- Das verwendete Modell $Y = f(X_1, \dots, X_n)$ spiegelt die Beziehung (Abhängigkeit) der Zielgröße Y zu den Einflussgrößen (X_1, \dots, X_n) nur unzureichend oder sogar falsch wieder. Dies wird vor allem dann deutlich, wenn der Modellverlauf ganz oder teilweise von der "Datenpunktwolke" abweicht, also nicht "mittendrin" liegt.

- Der Fehler bei der Festlegung (Messung, Bestimmung, Aufzeichnung) der Werte von Y und der (X_1, \dots, X_n) ist signifikant größer als der angenommene oder bekannte mF_y .
- Wesentliche Messdaten sind Ausreißer, also den Zusammenhang stark verfälschende Werte.
- Die Datensätze sind zu stark in bestimmten Gebieten des Modellraumes (Y, X_1, \dots, X_n) konzentriert und erzeugen damit eine ungleiche Gewichtung anzupassender Modellabschnitte.
- Die Variablen in den Datensätzen haben keinen ursächlichen Zusammenhang.

Die Verfahren

In den dafür vorhandenen Bausteinen **EVOPGRD** und **EVPGRD4** werden drei Parameterschätzmethoden eingesetzt.

1) Rasterverfahren zur Startpunktschätzung

Arbeitsweise

Um den Startpunkt \circ liegt ein n -dimensionales Punktraster (\times) der Parameterwerte $(p(1), \dots, p(m))$ mit dem Schrittweitenabstand des jeweiligen Parameters. An den Rasterpunkten wird mit den dort festgelegten Parameterwerten das Modell berechnet und die FQS ermittelt. Es wird der Rasterpunkt bestimmt, welcher die kleinste FQS hat. Auf dem Richtungsstrahl Rastermittelpunkt zum Rasterpunkt mit der minimalen FQS wird der Mittelpunkt \circ eines neuen Rasters festgelegt und darum herum das neue Punktraster ($+$) aufgebaut.

Dies wird solange fortgeführt, solange der Rasterpunkt mit der minimalen FQS ein Eckpunkt des jeweiligen Punktrasters ist.

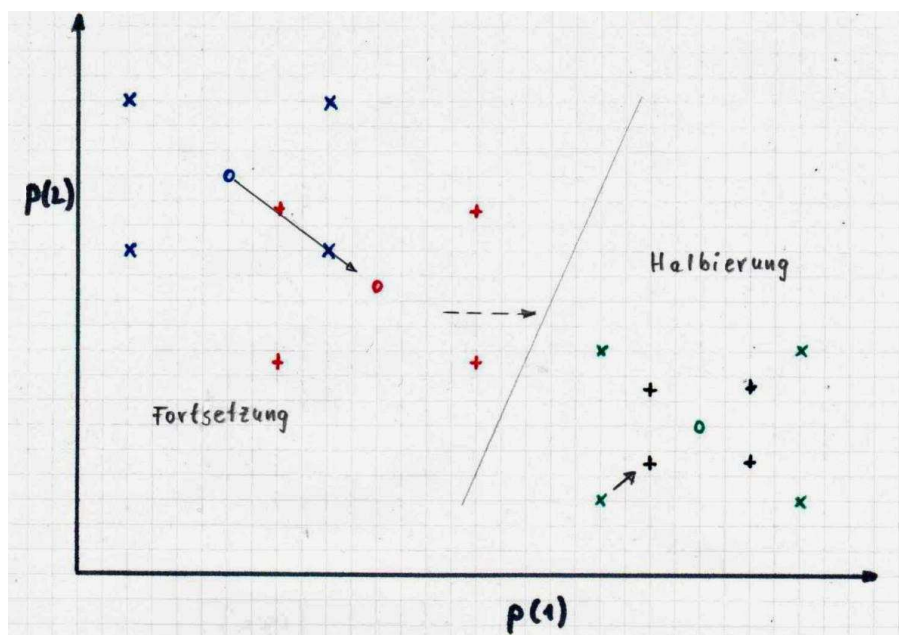


Bild 1:
Prinzipische Skizze des Vorgehens bei der Suche eines Punktes $(p(1), \dots, p(m))$ mit minimaler FQS mit der Methode 1, Rasterverfahren

hier: 2 Parameter im 2-dimensionalen Parameterraum

Ist aber ein Rastermittelpunkt \circ derjenige mit der minimalen FQS, schließt das Raster ein lokales Minimum ein, - dies kann auch das globale FQS-Minimum sein -. Nun

wird das Punktraster \mathbf{x} durch schrittweises halbieren auf ein neues Raster $\mathbf{+}$ um diesen Mittelpunkt verkleinert, bis kein neues Minimum gefunden wird.

So gelangt man zu einem lokalen Minimum, welches als Startpunkt für die nachfolgenden Parameterschätzverfahren dienen kann.

Zur Sicherheit sollte man das Rasterverfahren zur Startpunktschätzung mit Anfangswerten aus anderen Gebieten des Parameterraumes wiederholen.

Steuerung

Der Anwender kann das Verfahren über die Startpunktwahl \mathbf{p} , die Suchgrenzen (uG, oG) und den Schrittweitenfaktoren swp der Parameter steuern

Daraus wird die normierte Schrittweite $swp0$ berechnet:

$$swp0(j) = (oG(j) - uG(j)) / swp(j)$$

Eine kleinere Standardschrittweite, also ein größerer Schrittweitenfaktor, bewirkt eine höhere Schrittanzahl, aber eine empfindlichere Suche.

Eine größere Standardschrittweite, also ein kleinerer Schrittweitenfaktor, bewirkt dann natürlich den gegenteiligen Effekt.

Der Eingabewert $maxips$ legt die maximale Anzahl der Iterationsschritte mit diesem Verfahren fest.

2) evolutionäres Suchverfahren EVOP

Das Verfahren lehnt sich an die EVOP-Methode (Evolutionäre Operationen) aus der Versuchsplanung an und kombiniert es mit der Nutzung der Abstiegsrichtungen und -höhen der FQS im Raster.

Arbeitsweise

Um den Startpunkt \mathbf{o} liegt ein n-dimensionales Punktraster (\mathbf{x}) der Parameterwerte ($p(1), \dots, p(m)$) mit dem Schrittweitenabstand des jeweiligen Parameters.

An den Rasterpunkten wird mit den dort festgelegten Parameterwerten das Modell berechnet und die FQS ermittelt. Es wird der Rasterpunkt bestimmt, welcher die kleinste FQS hat.

Liegt der Minimalpunkt in einem Eckpunkt wird die Minimumsrichtung und die Lage des nächsten Mittelpunktes des neuen Punktrasters aus den normierten Schrittweiten und den Abstiegsrichtungen und Abstiegshöhen der Rasterparameter, sowie Dämpfungsfaktoren berechnet. Diese Abstiegsparameter sind mit den partiellen Ableitungen der FQS nach den Parametern vergleichbar, allerdings nicht im differentiellen Sinne sondern im Differenzenbereich des Rasters.

(Gradient zu $(p(j))$: $grad(p(j)) = del(FQS) / del(p(j))$, partielle Ableitung der FQS nach dem Parameter)

Dies wird solange fortgeführt, solange der Rasterpunkt mit der minimalen FQS ein Eckpunkt des jeweiligen Punktrasters ist.

Ist aber ein Rastermittelpunkt \mathbf{o} derjenige mit der minimalen FQS, schließt das Raster ein lokales Minimum ein, - dies kann auch das globale FQS-Minimum sein -. Nun wird das Punktraster \mathbf{x} durch schrittweises halbieren auf ein neues Raster $\mathbf{+}$ um diesen Mittelpunkt verkleinert, bis kein neues Minimum gefunden wird.

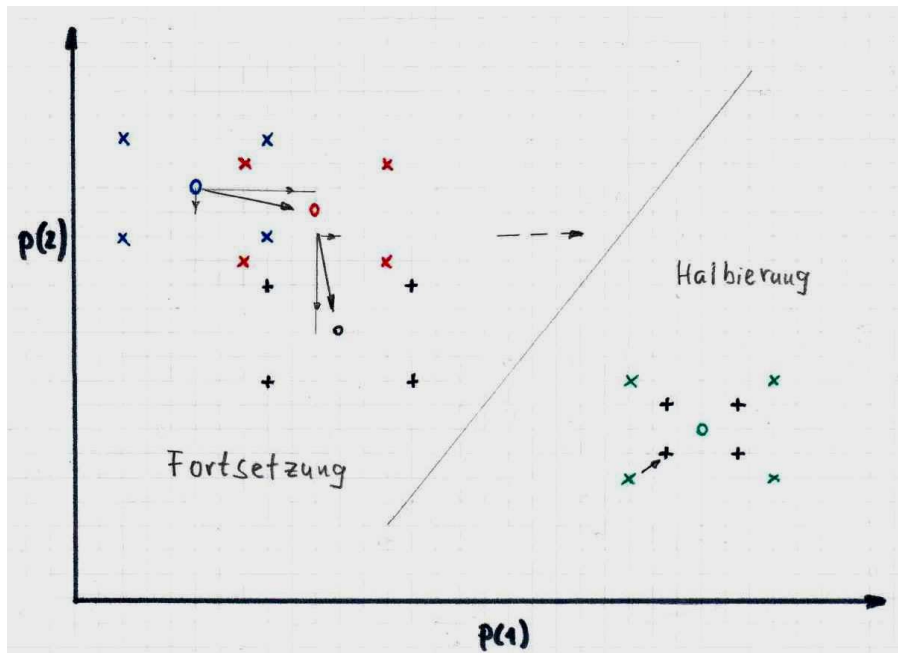


Bild 2:
Prinzipische Skizze des
Vorgehens bei der
Suche eines Punktes
 $(p(1), \dots, p(m))$ mit
minimaler FQS mit
der Methode 2,
Suchverfahren
EVOP

hier: 2 Parameter im
2-dimensionalen
Parameterraum

Steuerung

Die Steuerung mit den Eingabegrößen Startpunktwahl p , den Suchgrenzen (uG, oG) und den Schrittweitenfaktoren $snwp$, also auch der normierten Schrittweiten der Parameter folgt den gleichen Regeln wie beim vorstehenden Rasterverfahren zur Startpunktschätzung.

Allerdings sollte man bei diesem Verfahren mit kleineren normierten Schrittweiten arbeiten, damit die Wirkung der Abstiegsrichtung und -höhe zur Geltung kommen. Man muss davon ausgehen, dass die Abstiegsrichtung zu einem Minimum in der Regel nicht geradlinig verläuft, sondern ungleichmäßig gekrümmt ist. Ein zu großer Schritt führt von der Abstiegsrichtung weg.

Der Eingabewert $ievop$ legt die maximale Anzahl der Iterationsschritte mit diesem Verfahren fest.

Der Eingabewert $maxhlb$ legt die maximale Anzahl der Halbierungsschritte in diesem Verfahren fest.

3) Gradientenverfahren

Das Verfahren stützt sich auf die an einem Berechnungspunkt numerisch ermittelten Gradienten

(Gradient zu $p(j)$) : $\text{grad}(p(j)) = \text{del}(\text{FQS}) / \text{del}(p(j))$, part.Ableitung der FQS nach dem Parameter)

Arbeitsweise

Am Startpunkt des Parametervektors (P_1, \dots, P_m) und an jedem weiteren gefundenen Minimumpunkt wird der Gradient $\text{grad}(p(j)) = \text{del}(\text{FQS}) / \text{del}(p(j))$ für jeden Schätzparameter $P(j)$ numerisch durch die Auswertung der Differenzen der FQS bestimmt:

$\text{FQS}_{\text{links}}(p(j)-\text{del}(p(j)))$, $\text{FQS}_{\text{mitte}}(p(j))$, $\text{FQS}_{\text{rechts}}(p(j)+\text{del}(p(j)))$

Aus diesen Daten wird die Richtung und die Schrittgröße zum nächsten theoretischen Minimumpunkt (P_1, \dots, P_m) berechnet.

Wie schon beim vorigen Verfahren bemerkt, unterscheiden sich in der Regel an dem durch die Gradienten festgelegte neue Minimumpunkt der prognostizierte und der an diesem Punkt berechnete FQS-Wert. Das gesuchte Minimum liegt nicht in geradliniger momentaner Gradientenrichtung, sondern in Richtung einer ungleichmäßig gekrümmten Kurve.

Im besten Fall stellt der berechnete FQS-Wert ein neues Minimum dar.

Um zu vermeiden, dass die berechnete Richtung zum neuen theoretischen Minimum zu stark von der Realität abweicht, wird die aus den Gradienten bestimmte Schrittweite variiert, um ein wirklichkeitstreuere Ergebnis zu finden.

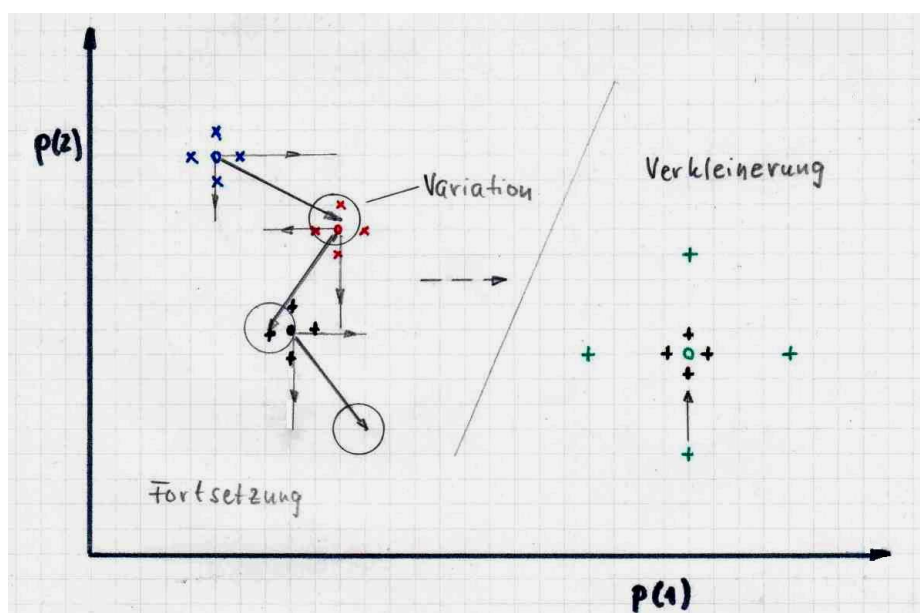


Bild 3: Prinzipskizze des Vorgehens bei der Suche eines Punktes $(p(1), \dots, p(m))$ mit minimaler FQS mit der Methode 3, Gradientenverfahren, hier: 2 Parameter im 2-dimensionalen Parameterraum

An dem durch die Schrittweiten so bestimmten neuen Modell-Berechnungspunkt (P_1, \dots, P_m) wird wiederum durch Variation dieses Parametervektors in seiner Umgebung, nach einem besseren Ergebnis gesucht.

Am gefundenen Minimumpunkt werden nun wieder die Gradienten bestimmt und das Verfahren fortgesetzt.

Findet man kein neues Minimum, so wird vom letzten Minimumpunkt ausgehend die Schrittweite in Gradientenrichtung um den Faktor 10 verkleinert und wieder versucht durch einen Schritt in Gradientenrichtung ein neues Minimum der FQS zu finden.

Steuerung

Die Steuerung mit den Eingabegrößen Startpunktwahl p , den Suchgrenzen (uG, oG) und den Schrittweitenfaktoren $snwp$, also auch der normierten Schrittweiten der Parameter folgt den gleichen Regeln wie bei den vorstehenden Verfahren.

Allerdings spielen die normierten Schrittweiten bei dem Gradientenverfahren nur eine normierende Rolle. Sie geht zwar in die Festlegung der Schrittweiten zur Änderung der Schätzparameter mit ein, aber den Hauptanteil dominieren die aus der Gradientenberechnung gewonnenen Informationen.

Der Eingabewert $itges$ legt die maximale Anzahl der Iterationsschritte mit diesem Verfahren fest.

Der Eingabewert $fgrd$ legt, multipliziert mit den normierten Schrittweiten, die Größe der Parametervariation zur Gradientenberechnung fest.

Der Eingabewert $maxhlb$ legt die maximale Anzahl der Verkleinerungsschritte in diesem Verfahren fest.