Teil E

Grundlagen der Optimierung

Vorläufige Gliederung

Literaturhinweise I

Walter Alt,
Nichtlineare Optimierung. 1. Auflage, 2002, Vieweg.
Schöne Kombination aus Theorie, Numerik und Anwendung
ISBN: 3-528-03193-X

Jorge Nocedal, Stephen J. Wright,
Numerical Optimization. 1999, Springer-Verlag New York, Inc.
Ein Standardwerk.
ISBN: 0-387-98793-2

(Nicht)lineare Ausgleichsprobleme

Wir betrachten zunächst ein System

$$A\,x \;=\; b, \qquad A \in \mathbb{R}^{m\times n}, b \in \mathbb{R}^m$$

von m linearen Gleichungen in $n \leq m$ Variablen. Wenn $m > n$ nennt man das System *überbestimmt*, da es weniger freie Variablen x_i für $i = 1 \dots n$ gibt als Bedingungen, die an sie gestellt werden. Wenn $m = n$ spricht man vom *wohlbestimmten* oder *quadratischen* Fall. Diese Unterscheidung macht eigentlich nur dann Sinn, wenn man folgende Annahme macht.

Vollrang-Vorraussetzung

Die Matrix $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ hat vollen Spaltenrang $n = \min(n, m)$, d.h. sie erfüllt die äquivalenten Bedingungen, dass ihre n Spalten linear unabhängig sind und man $m - n$ Zeilen entfernen kann, so dass die verbleibende quadratische Matrix eine nichtverschwindende Determinante hat.

Fehlerminimierung

Beobachtung

Im Falle $m > n = rang(A)$ ist für fast alle rechten Seiten $b \in \mathbb{R}^m$ das System von Gleichungen $Ax = b$ nicht exakt erfüllbar.

Konsequenz

Man versucht deshalb x so zu wählen, dass alle Komponenten des *Fehlervektors*

$$F \;\equiv\; A\,x - b \;=\; (F_i)_{i=1\dots m}$$

so klein wie möglich sind, d.h. man versucht einen **Ausgleich** zwischen den m eigentlich als Gleichungen gedachten Bedingungen zu schaffen.

Normwahl

Zur Messung der Größe von F wählt man häufig eine der Vektornormen aus Abschnitt **B.3**

$$\|F\|_p \;=\; \|Ax - b\|_p \quad \text{mit} \quad p \in \{1, 2, \infty\}$$

Hier bedeutet $\|F\|_1$ die Summe der Komponentenbeträge $|F_i|$ und $\|F\|_\infty$ ihr Maximum. Die Minimierung dieser beiden Normen führt auf lineare Optimierungsaufgaben mit Ungleichungsnebenbedingungen.
Diese werden später betrachtet und sind im allgemeinen schwerer zu lösen als das Gaußsche Problem der kleinsten Quadrate (engl.: least squares), das sich ergibt, wenn man die Euklidische Norm $\|F\|_2$ minimiert.

Satz E.1 (Kleinste - Quadrate - Lösung)

Für jedes lineare Gleichungssystem $Ax = b$ mit $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, $b \in \mathbb{R}^m$ und $rang(A) = n$ existiert ein eindeutiger Vektor $x_* \in \mathbb{R}^n$, so dass

$$\|Ax_* - b\|_2 \;=\; \min_{x\in\mathbb{R}^n} \|Ax - b\|_2$$

Diese Ausgleichslösung erfüllt das quadratische, reguläre Gleichungssystem

$$A^\top A\, x_* \;=\; A^\top b \in \mathbb{R}^n,$$

welches als Normalengleichungssystem *bezeichnet wird.*

Bemerkung

Wenn die Vollrangvorraussetzung verletzt ist, existiert eine unendliche Menge von Vektoren, die sowohl das Minimerungsproblem lösen als auch die entsprechende Normalengleichung erfüllen.

Allgemeine lineare Funktionenapproximation

Betrachte ein System von n vorgegebenen Ansatzfunktionen

$$u_j(x) \;:\; [a, b] \to \mathbb{R} \quad \text{für} \quad j = 1 \dots n$$

mit dem gemeinsamen Definitionsbereich $[a, b]$.
Weiterhin betrachte $m \geq n$ unterschiedliche Stützstellen $x_i \in [a, b]$ und entsprechende *Daten* $y_i \in \mathbb{R}$ für $i = 1, \dots, m$.
Gesucht sind nun n Koeffizienten z_j, so dass die Linearkombination

$$u(x) \equiv \sum_{j=1}^{n} z_j u_j(x)$$

die sog. **mittlere Abweichung** Δ_2 möglichst klein werden lässt:

$$\Delta_2 \equiv \left[\sum_{i=1}^{m} (u(x_i) - y_i)^2\right]^{\frac{1}{2}}.$$

Lösung der Gaußschen Ausgleichsaufgabe

Aus den Vektoren

$$a_j = (u_j(x_1), u_j(x_2), \dots, u_j(x_m))^\top$$

bilden wir die Matrix $A = [a_1, \dots, a_n]$ und mit

$$y = (y_1, y_2, \dots, y_m)^\top \qquad \text{und} \qquad z = (z_1, z_2, \dots, z_n)^\top$$

ist zur Lösung der Ausgleichsaufgabe das Funktional

$$\|F(z)\|_2 = \|Az - y\|_2$$

zu minimieren.
Das heisst aber nichts anderes, als eine Lösung z_* des (überbestimmten) Gleichungssystems $Az = y$ mit kleinsten Fehlerquadraten zu finden.

Spezialfall: Gaußsche Ausgleichspolynome

Wählt man als Ansatzfunktionen $u_j(x) = x^{j-1}$, so ergibt sich das Polynom

$$u(x) = \sum_{j=1}^{n} z_j x^{j-1}$$

Die Vollrangbedingung $rang(A) = n$ ist für paarweise verschiedene Stützstellen x_j erfüllt, da die ersten n Zeilen von A die folgende *Vandermondsche Determinante* haben:

$$\det \begin{bmatrix} 1 & x_1 & \dots & x_1^{n-1} \\ 1 & x_2 & \dots & x_2^{n-1} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_n & \dots & x_n^{n-1} \end{bmatrix} = \prod_{k=2}^{n} \prod_{j=1}^{k-1} (x_k - x_j) \neq 0.$$

Zur Berechnung der Lösung mit kleinsten Fehler-Quadraten muß die Normalgleichung $A^\top A\, z = A^\top y$ gelöst werden.

Lemma E.2

Die Normalenmatrix $A^\top A \in \mathcal{R}^{n\times n}$ ist symmetrisch und positiv semi-definit.

Unter der Vollrangvorraussetzung ist $A^\top A$ sogar positiv definit.

Bemerkung:

Wegen der positiven Definitheit der Matrix $A^\top A$ kann man das Normalgleichungssystem mit dem sogenannten *Cholesky* - Verfahren lösen. Dieses ist eine pivotierungsfreie Version des Gaußschen Verfahrens, das die Symmetrie der Matrix ausnutzt und dadurch den Berechnungsaufwand halbiert auf $n^3/6$ Multiplikationen gefolgt von Additionen/Subtraktionen.
Allerdings kostet die Berechnung von $A^T A$ aus A bereits $m\, n^2$ Operationen, was durch die QR Zerlegung vermieden werden kann.

QR Faktorisierung

Wendet man das in Abschnitt **B.7** behandelte Gram-Schmidt Orthogonalisierungsverfahren auf die n Spaltenvektoren a_j von A an so ergibt sich daraus eine Folge von ebenso vielen orthonormalen Vektoren q_j.
Ausserdem existiert nach Konstruktion der q_j die Darstellung

$$a_j \;=\; \sum_{k=1}^{j} q_k r_{kj} \qquad \text{für } j = 1, \dots, n$$

wobei die diagonalen Elemente r_{jj} für $j = 1, \dots n$ alle positiv sind. Fasst man nun die q_j als Spalten zu einer orthogonalen Matrix $Q = [q_1, q_2, \dots, q_n] \in \mathbb{R}^{m\times n}$ zusammen und ergänzt die Koeffizienten r_{kj} durch Nullen zu einer oberhalb dreiecksförmigen Matrix $R \in \mathbb{R}^{n\times n}$, so hat man für A die Faktorisierung

$$A \;=\; Q\,R \quad \text{mit} \quad Q^T Q = I \in \mathbb{R}^{n\times n}$$

Vereinfachte Normalengleichung

Aus der Orthogonalität ergibt sich unmittelbar

$$A^T A \;=\; (QR)^T (QR) \;=\; R^T Q^T Q R \;=\; R^T R$$

und die Normalengleichung reduziert sich erst zu

$$R^T R x_* \;=\; R^T Q^T b$$

und letztlich zu

$$R x_* \;=\; Q^T b$$

was sehr billig lösbar ist.

Zur Berechnung der QR Zerlegung

- Es lässt sich leicht prüfen, dass die Zerlegung von $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ in das Produkt einer orthogonalen Matrix Q und einer Dreiecksmatrix R mit positiven Diagonalelementen eindeutig ist.
- Es gibt ausser dem Gram-Schmidt Verfahren andere Methoden, mit denen die QR Zerlegung berechnet werden kann. Zum Beispiel könnte man R aus der Cholesky Faktorisierung von $A^T A$ gewinnen und dann $Q = AR^{-1}$ setzen.
- Als effektiv und gegenüber Rundungsfehlern sehr stabil gilt die sukkzessive Reduktion von A mit Hilfe sogenannter elementarer Reflektoren oder *Householdermatrizen*.

Hinweis

Für die kleinen Aufgaben in Übung 3.1 kann das Gram-Schmidtsche Orthogonalisierungsverfahren angewandt oder noch einfacher die Normalengleichung explizit gebildet und mittels Gaußscher Elimination ohne Pivotierung gelöst werden.