Abteilung für Mathematische Optimierung
TU Braunschweig

WS 2003/04

Prof. Dr. Sándor Fekete
Dr. Laura Heinrich-Litan

Lineare Optimierung
Anlage 3: Lineare Ausgleichsprobleme

In mathematischen Modellen konkreter physikalischer oder technischer Vorgänge benutzt man häufig unbekannte Parameter, um das Modell flexibel anzupassen. Die günstigste Anpassung ergibt sich durch Minimierung der beobachteten Abweichungen im Experiment. Die Modellgröße $v = v(u)$ sei linear abhängig von wählbaren Parametern $u_1, \ldots, u_n$. Die Art der linearen Abhängigkeit sei unbekannt, d. h. $v = u^T x$ für einen unbekannten Vektor x. In m Experimenten mit verschieden gewählten Parametern gilt entsprechend $v = Ux$ mit einer bekannten $m \times n$ Matrix U.

Die Abweichung $\Delta := v - Ux$ soll durch Wahl von x minimiert werden. Verschiedene Fehlermaße führen auf verschiedene Anpassungen:

$$L_\infty : \ \max |\Delta_i|, \quad L_1 : \ \frac{1}{m} \sum |\Delta_i|, \quad L_2 : \ \frac{1}{m} \sum \Delta_i^2$$

Hier wollen wir nur die ersten beiden Ansätze nutzen.

L_∞-Norm (Stiefel, 1960)

Stiefel hat die Minimierung der maximalen Abweichung geschickt auf die Aufgabe

$$\begin{array}{llll} \min & x_0 & & \\ \text{unter} & |v_i - \sum_j u_{ij} x_j| & \leq & x_0 \quad (1 \leq i \leq m) \\ & x_0 & \geq & 0 \end{array}$$

zurückgeführt. Die maximale Abweichung wird als neue, nach unten durch 0 beschränkte Variable x_0 zum Modell adjungiert. Die Aufgabe besitzt offenbar zulässige Lösungen, z.B. $x \equiv 0, x_0 = \max |v_i|$. Nur bei exakt bestimmbaren unbekannten Parametern und bei Experimenten, in denen keine Meß- oder Beobachtungsfehler auftreten, werden alle Abweichungen verschwinden. Daher dürfen wir oBdA folgenden Ansatz machen:

$$x_0 > 0, \ y_0 := \frac{1}{x_0}, \ y_j := -\frac{x_j}{x_0}.$$

Durch Auflösen der Beträge und Einsetzen der neuen Variablen erhalten wir:

$$\begin{array}{llll} \max & y_0 & & \\ \text{unter} & +v_i y_0 + \sum_j u_{ij} y_j & \leq & 1 \\ & -v_i y_0 - \sum_j u_{ij} y_j & \leq & 1 \\ & y_0 & \geq & 0 \end{array}$$

Mit $A := [v|U]$ lautet die Aufgabe in Matrixform

$$\max\{y_0 \mid Ay \leq 1, \ -Ay \leq 1, \ y_0 \geq 0\}.$$

Für die Schlupfvariable $0 \leq z := 1 - Ay$ der ersten Ungleichung lautet die zweite Ungleichung in äquivalenter Form $z \leq 2$. Damit finden wir als äquivalentes LP mit expliziten oberen Schranken:

$$\max\{y_0 \mid Ay + z = 1, \ 0 \leq z \leq 2, \ y_0 \geq 0\}.$$

L_1-Norm

Für die L_1-Norm lautet die Aufgabe zunächst

$$\min \left\{ \sum_i |\underbrace{(v-Ux)_i}_{\Delta_i}| \;\middle|\; x \in \boldsymbol{R}^n \right\}.$$

Wir fassen die Abweichungen $\delta_i := |\Delta_i|$ zu einem Vektor δ zusammen:

$$\begin{array}{lrcl} \min & \sum_{i=1}^m \delta_i & & \\ \text{unter} & v - Ux & \leq & \delta, \\ & -v + Ux & \leq & \delta, \\ & \delta & \geq & 0. \end{array}$$

Die Schlupfvariable $z := \delta - v + Ux \geq 0$ führt uns schließlich auf

$$\min \left\{ \sum \delta_i \;\middle|\; \delta + Ux - z = v,\ 0 \leq z \leq 2\delta,\ \delta \geq 0 \right\}.$$

Falls $m \gg n$, ist es vorteilhaft, daß duale Problem zu lösen.

Ein Beispiel zur Ausgleichsrechnung

Wir lösen das lineare Ausgleichsproblem

$$\min\{\ \max\{|\,x_1\,|,\ |\,x_2\,|,\ |\,4 - x_1 - x_2\,|\}\ |\ x \in \boldsymbol{R}^n\ \}.$$

wofür sich die Matrix

$$A = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 4 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

ergibt. Im folgenden sind y_1 und y_2 unbeschränkte Variable, $y_0 \geq 0$. Wir berechnen mit Hilfe von Pivotschritten aus dem Ausgangstableau:

Tableau 0:

	N	y_0	y_1	y_2
B	0	1	0	0
z_1	1	0	1	0
z_2	1	0	0	1
z_3	1	$\boxed{-4}$	-1	-1

die folgenden Simplextableaus:

Tableau 1:

	N	z_3	y_1	y_2
B	$\frac{1}{4}$	$-\frac{1}{4}$	$-\frac{1}{4}$	$-\frac{1}{4}$
z_1	1	0	$\boxed{1}$	0
z_2	1	0	0	1
y_0	$\frac{1}{4}$	$-\frac{1}{4}$	$-\frac{1}{4}$	$-\frac{1}{4}$

Tableau 2:

	N	z_3	z_1	y_2
B	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{4}$	$-\frac{1}{4}$	$-\frac{1}{4}$
y_1	-1	0	1	0
z_2	1	0	0	$\boxed{1}$
y_0	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{4}$	$-\frac{1}{4}$	$-\frac{1}{4}$

Tableau 3:

	N	z_3	z_1	z_2
B	$\frac{3}{4}$	$-\frac{1}{4}$	$-\frac{1}{4}$	$-\frac{1}{4}$
y_1	-1	0	1	0
y_2	-1	0	0	1
y_0	$\frac{3}{4}$	$-\frac{1}{4}$	$-\frac{1}{4}$	$-\frac{1}{4}$

woraus wir die Lösung des LP ablesen: $y_0 = \frac{3}{4},\ y_1 = -1,\ y_2 = -1$. Hieraus gewinnen wir die Lösung

$$x_0 = \frac{1}{y_0} = \frac{4}{3},\ x_1 = -y_1 \cdot x_0 = \frac{4}{3},\ x_2 = -y_2 \cdot x_0 = \frac{4}{3}$$

des linearen Ausgleichsproblems.