Kapitel 5
Optimierung, Fehlerrechnung und Statistik

In der Schule werden Ableitungen hauptsächlich benutzt, um die Extremwerte einer Funktion zu bestimmen; ein Gesichtspunkt, der im letzten Semester bei der Differentialrechnung mehrerer Veränderlicher keine Rolle spielte. In diesem letzten Kapitel der Vorlesung soll dies nachgeholt werden, wobei insbesondere die Anwendungen auf die Fehler- und Ausgleichsrechnung wichtige Beispiele liefern. Zu deren besseren Verständnis sollen auch einige Grundbegriffe der Statistik erörtert werden.

§1: Extrema von Funktionen mehrerer Veränderlicher

a) Der eindimensionale Fall

Erinnern wir uns an die Schule: Wenn die stetig differenzierbare Funktion $f:(a,b)\to\mathbb{R}$ im Punkt $x_0\in(a,b)$ ein Extremum annimmt, verschwindet dort die Ableitung $f'(x_0)$. Der Grund ist klar: Nach Definition der Differenzierbarkeit ist

$$f(x_0+h)=f(x_0)+hf'(x_0)+o(h)\,;$$

falls $f'(x_0)$ nicht verschwindet, ist $f(x_0+h)$ für kleine h mit demselben Vorzeichen wie $f'(x_0)$ größer und für solche mit entgegengesetztem Vorzeichen kleiner als $f(x_0)$. In x_0 kann f somit weder ein Maximum noch ein Minimum annehmen.

Die Umkehrung gilt nicht: Standardbeispiel ist die Funktion $f(x)=x^3$, für die $f'(0)$ verschwindet, ohne daß im Nullpunkt ein Maximum oder Minimum wäre.

Für zweimal stetig differenzierbare Funktionen gibt es bekanntlich auch eine hinreichende Bedinung sowie die Möglichkeit, Maxima und Minima voneinander zu unterscheiden: Falls $f'(x_0)$ verschwindet und $f''(x_0)$ negativ ist, hat f im Punkt x_0 ein Maximum; bei positivem $f''(x_0)$ liegt ein Minimum vor. Auch hier folgt alles sofort aus der Definition der zweimaligen Differenzierbarkeit: Wegen

$$\begin{aligned}f(x_0+h)&=f(x_0)+hf'(x_0)+\frac{h^2}{2}f''(x_0)+o(h^2)\\&=f(x_0)+\frac{h^2}{2}f''(x_0)+o(h^2)\end{aligned}$$

sieht der Graph von f in diesen Fällen in der unmittelbaren Umgebung von x_0 aus wie eine nach unten *bzw.* oben geöffnete Parabel.

b) Verallgemeinerung aufs Mehrdimensionale

Nun betrachten wir eine stetig differenzierbare Funktion $f:D\to\mathbb{R}$ auf einer offenen Teilmenge $D\subset\mathbb{R}^n$. Dann bedeutet Differenzierbarkeit bekanntlich, daß es in jedem Punkt $\boldsymbol{x}_0\in D$ einen Vektor

$$\nabla f(\boldsymbol{x}_0)=\operatorname{grad} f(\boldsymbol{x}_0)\in\mathbb{R}^n$$

gibt, den Gradienten, so daß für hinreichend kleine Vektoren $\vec h\in\mathbb{R}^n$ gilt

$$f(\boldsymbol{x}_0+\vec h)=f(\boldsymbol{x})+\operatorname{grad} f(\boldsymbol{x}_0)\cdot\vec h+o\big(|\vec h|\big)\,.$$

Hier muß also für jeden Extremwert $\operatorname{grad} f(\boldsymbol{x}_0)$ gleich dem Nullvektor sein, denn setzt man für $\vec h$ ein kleines Vielfaches $t\cdot\operatorname{grad} f(\boldsymbol{x}_0)$ des Gradienten ein, wäre sonst

$$f(\boldsymbol{x}_0+\vec h)=f(\boldsymbol{x})+t\big(\operatorname{grad} f(\boldsymbol{x}_0)\cdot\operatorname{grad} f(\boldsymbol{x}_0)\big)+o\big(|\vec h|\big)$$

für kleine positive t größer als $f(x_0)$ und für kleine negative t kleiner.

Die Frage, welche Nullstellen des Gradienten wirklich Extremwerten entsprechen, ist schwieriger; in der Praxis wird es oft am einfachsten sein, sich die Umgebung des betreffenden Punktes mit irgendwelchen *ad hoc*-Methoden genauer anzusehen und dann zu entscheiden.

Klassisches Beispiel eines Punkts, in dem der Gradient verschwindet, ohne daß ein Extremwert vorliegt, ist der in Abbildung 43 gezeigte

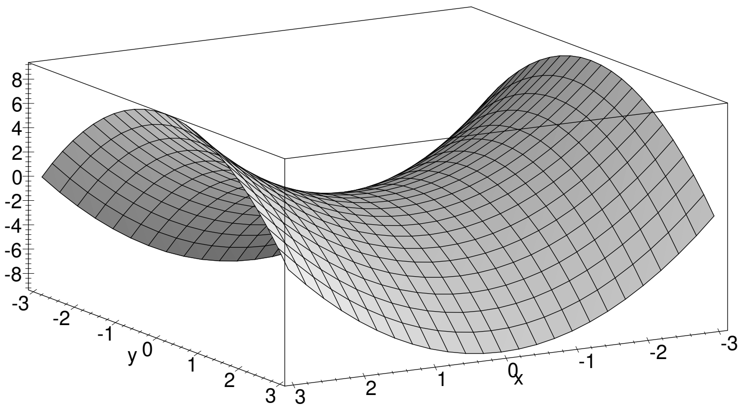


Abb. 43: Graph der Funktion $f(x, y) = x^2 - y^2$

Sattelpunkt, hier dargestellt als Funktionswert über dem Punkt $(0, 0)$ für die Funktion $f(x, y) = x^2 - y^2$.

Für zweifach stetig differenzierbare Funktionen kann man genau wie im eindimensionalen Fall ein hinreichendes Kriterium finden, das nur von der zweiten Ableitung im Punkt $\boldsymbol{x}_0$ abhängt:

Die zweite Ableitung von $f \in \mathcal{C}^2(D, \mathbb{R})$ im Punkt $\boldsymbol{x}_0 \in D$ ist bekanntlich gegeben durch die HESSE-Matrix

$$H_f(\boldsymbol{x}_0) = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_n} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n^2} \end{pmatrix}$$

und zweimalige Differenzierbarkeit bedeutet, daß

$$f(\boldsymbol{x}_0 + \vec{h}) = f(\boldsymbol{x}_0) + \operatorname{grad} f(\boldsymbol{x}_0) \cdot \vec{h} + \tfrac{1}{2}{}^t\vec{h}\, H_f(\boldsymbol{x}_0)\, \vec{h} + o\big(|\vec{h}^2|\big)$$

ist für kleine $\vec{h}$.

Wenn grad $f(\boldsymbol{x}_0)$ verschwindet, hängt also das Verhalten von f in der Umgebung von $\boldsymbol{x}_0$ ab von der quadratischen Form

$$\vec{h} \mapsto {}^t\vec{h}\, H_f(\boldsymbol{x}_0)\, \vec{h}\,.$$

Definition: *a)* Eine Matrix $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ heißt *positiv definit,* wenn für alle Vektoren $\vec{v} \neq \vec{0}$ aus $\mathbb{R}^n$ gilt:

$${}^t\vec{v}A(\boldsymbol{x}_0)\vec{v} > 0\,.$$

b) A heißt *negativ definit,* wenn für alle $\vec{v} \neq \vec{0}$ aus $\mathbb{R}^n$ gilt:

$${}^t\vec{v}A(\boldsymbol{x}_0)\vec{v} < 0\,.$$

c) A heißt *indefinit,* wenn es Vektoren $\vec{v}, \vec{w} \in \mathbb{R}^n$ gibt mit

$${}^t\vec{v}A(\boldsymbol{x}_0)\vec{v} > 0 \quad \text{und} \quad {}^t\vec{w}A(\boldsymbol{x}_0)\vec{w} < 0\,.$$

Mit dieser Terminologie ist das folgende Lemma klar:

Lemma: Wenn die differenzierbare Funktion $f \in \mathcal{C}^1(D, \mathbb{R})$ im Punkt $\boldsymbol{x}_0 \in D$ ein lokales Extremum hat, ist dort ihr Gradient gleich dem Nullvektor.
Falls umgekehrt für $f \in \mathcal{C}^2(D, \mathbb{R})$ der Gradient im Punkt $\boldsymbol{x} \in D$ verschwindet, gilt:
a) Falls die HESSE-Matrix $H_f(\boldsymbol{x}_0)$ positiv definit ist, hat f im Punkt $\boldsymbol{x}_0$ ein Minimum.
b) Falls $H_f(\boldsymbol{x}_0)$ negativ definit ist, hat f im Punkt $\boldsymbol{x}_0$ ein Maximum.
c) Falls $H_f(\boldsymbol{x}_0)$ indefinit ist, hat f im Punkt $\boldsymbol{x}_0$ kein Extremum. ■

Damit uns das etwas nützt, brauchen wir jetzt nur noch ein Kriterium, mit dem wir feststellen können, welche Definitheitseigenschaften die HESSE-Matrix hat. Dazu erinnern wir uns daran, daß die HESSE-Matrix symmetrisch ist, und daß nach Kapitel 4, §2*d)* jede symmetrische Matrix diagonalisierbar ist.

Für eine Diagonalmatrix A mit Einträgen $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ und einen Vektor $\vec{v}$ mit Komponenten $v_1, \dots, v_n$ wird obige quadratische Form zu

$$(v_1, v_2, \dots, v_n) \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix} = \lambda_1 v_1^2 + \dots + \lambda_n v_n^2\,;$$

eine Diagonalmatrix ist also genau dann positiv definit, wenn alle Diagonaleinträge positiv sind und genau dann negativ definit, wenn sie alle negativ sind. Falls es sowohl positive als auch negative Diagonaleinträge gibt, ist die Matrix indefinit.

Nun ist es für den Wertebereich einer Funktion irrelevant, bezüglich welches Koordinatensystems wir die Argumente ausdrücken; wir können eine symmetrische Matrix also bezüglich einer Basis aus Eigenvektoren betrachten, wo sie zur Diagonalmatrix wird mit den Eigenwerten als Einträgen. Daher gilt:

Lemma: Eine symmetrische Matrix ist genau dann positiv definit, wenn alle ihre Eigenwerte positiv sind und genau dann negativ definit, wenn alle ihre Eigenwerte negativ sind. Falls es sowohl positive als auch negative Eigenwerte gibt, ist sie indefinit. ■

Da die Determinante einer Matrix gleich dem Produkt ihrer Eigenwerte ist, folgt, daß eine Matrix nur dann positiv definit sein kann, wenn ihre Determinante positiv ist; für negativ definite $n \times n$-Matrizen muß die Determinante bei geradem n ebenfalls positiv sein, bei ungeradem negativ.

Für symmetrische 2×2-Matrizen läßt sich daraus leicht ein notwendiges und hinreichendes Kriterium machen: Das charakteristische Polynom von

$$A = \begin{pmatrix} a & b \\ b & d \end{pmatrix}$$

mit Eigenwerten λ_1 und λ_2 ist

$$\lambda^2 - (a+d)\lambda + (ad - b^2) = (\lambda - \lambda_1)(\lambda - \lambda_2)\,;$$

daher ist

$$\lambda_1 + \lambda_2 = a + d\,.$$

(In der Tat rechnet man auf genau die gleiche Weise leicht nach, daß für jede $n \times n$-Matrix die Summe der n Eigenwerte gleich der Summe der n Diagonaleinträge ist, die sogenannte *Spur* der Matrix.)

Wenn $\det A = ad - b^2$ positiv ist, haben nicht nur λ_1 und λ_2, sondern auch a und d dasselbe Vorzeichen, das somit gleich dem von $a + d = \lambda_1 + \lambda_2$ ist. Also ist A genau dann positiv definit, wenn $\det A > 0$ und $a > 0$

ist, negativ definit, wenn $\det A > 0$ und $a < 0$ ist, und indefinit wenn $\det A < 0$ ist. (Anstelle von a könnte hier natürlich überall auch d stehen.)

Beispielsweise ist die Matrix $\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 5 \end{pmatrix}$ positiv definit, denn sie hat Determinante eins und positive Diagonaleinträge. Im obigen Beispiel des Sattelpunkts mit $f(x,y) = x^2 - y^2$ ist

$$H_f(0,0) = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & -2 \end{pmatrix}$$

offensichtlich indefinit, was man nicht nur an der negativen Determinanten sieht.

§2: Maxima und Minima unter Nebenbedingungen

Bei einem realen physikalischen oder technischen Prozeß können sich die Variablen selten frei im gesamten $\mathbb{R}^n$ bewegen: Physikalisch sinnvoll ist meist nur eine beschränkte Teilmenge. Im Gegensatz zur Dimension eins, wo diese Teilmenge praktisch immer ein Intervall ist, gibt es aber im Mehrdimensionalen keinen Grund, warum diese Teilmenge offen oder zumindest der Abschluß einer offenen Teilmenge sein sollte: Im $\mathbb{R}^3$ kann man sich beispielsweise auch interessieren für das Maximum oder Minimum der Ladungsdichte auf einer Kugeloberfläche oder die elektrische Feldstärke oder Temperaturverteilung auf der Innenhaut eines Reaktordruckbehälters.

Diese Maxima oder Minima sind im allgemeinen keine lokalen Maxima oder Minima der betrachteten Funktion: Wenn man die jeweilige Fläche verläßt, läßt sich der Funktionswert selbst für einen solchen Extremwert meist noch – je nach Richtung – sowohl vergrößern als auch verkleinern. Dementsprechend können die Methoden, die wir in §1 diskutiert haben, solche Extremwerte üblicherweise nicht finden; wir brauchen weitere Werkzeuge, die in diesem Paragraphen bereitgestellt werden sollen.

Die Situation, um die es hier geht, ist typischerweise die folgende: Gegeben ist eine Funktion $f\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, möglicherweise auch nur auf einer Teilmenge $D \subset \mathbb{R}^n$ definiert, deren Extremwerte nicht auf $\mathbb{R}^n$ oder D

gesucht werden, sondern nur auf einer Teilmenge, die beispielsweise durch das Verschwinden einer weiteren Funktion $g\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ gegeben ist. Falls wir uns für Extremwerte auf einer Kugel vom Radius r um den Nullpunkt interessieren, wäre dies etwa die Funktion

$$g\colon \begin{cases} \mathbb{R}^3 & \to \mathbb{R} \\ (x,y,z) & \mapsto x^2+y^2+z^2-r^2 \end{cases}.$$

Eine mögliche Strategie zur Lösung solcher Probleme besteht darin, die Gleichung $g = 0$ nach einer der Variablen aufzulösen, diese dann in f einzusetzen und sodann eine gewöhnliche Extremwertaufgabe zu lösen. Diese Auflösung ist *explizit* nur in sehr einfachen Fällen möglich, aber selbst wenn wir nur wissen, daß eine solche Auflösung *existiert,* können wir doch damit argumentieren und Kriterien ableiten.

Unter Maxima und Minima sollen hier *lokale* Extrema verstanden werden, so daß wir die üblichen Kriterien anwenden können:

Definition: Wir sagen, die Funktion $f\colon D \to \mathbb{R}$ auf einer Teilmenge $D \subseteq \mathbb{R}^n$ habe im Punkt $\boldsymbol{a} \in D$ ein lokales $\left\{\begin{matrix}\text{Maximum}\\ \text{Minimum}\end{matrix}\right\}$ unter der Nebenbedinung $g = 0$, wobei $g\colon D \to \mathbb{R}$ eine weitere Funktion ist, wenn $g(\boldsymbol{a}) = 0$ ist und es eine Umgebung U von $\boldsymbol{a}$ gibt, so daß für alle $\boldsymbol{x} \in U$ gilt: Ist $g(\boldsymbol{x}) = 0$, so ist $f(\boldsymbol{x}) \left\{\begin{matrix}\le\\ \ge\end{matrix}\right\} f(\boldsymbol{a})$.

Als Einstiegsbeispiel betrachten wir eine beliebte Schulbuchaufgabe zur Minimumsbestimmung: Eine Konservendose soll bei einem vorgegebenen Volumen von 100 cm^3 möglichst wenig Blech benötigen, d.h. ihre Oberfläche soll minimal sein.

Die Oberfläche eines Zylinders der Höhe h mit einer Grundfläche vom Radius r ist

$$f(r,h) = 2\pi r^2 + 2\pi r \cdot h\,;$$

die Nebenbedingung für das Volumen $V = \pi r^2 h$ besagt, daß

$$g(r,h) = \pi r^2 h - 100 = 0$$

sein soll.

Hier läßt sich natürlich die Nebenbedingung sofort nach h auflösen:

$$h = \frac{100}{\pi r^2}\,,$$

und wir müssen nur noch die Funktion

$$F(r) = f\left(r, \frac{100}{\pi r^2}\right) = 2\pi r^2 + \frac{200}{r}$$

minimieren. Für diese ist

$$F'(r) = 4\pi r - \frac{200}{r^2}\,,$$

und dies verschwindet genau dann, wenn

$$4\pi r^3 = 200 \quad \text{oder} \quad r = \sqrt[3]{\frac{50}{\pi}}$$

ist.

In diesem einfachen Fall kann man solche Aufgaben also zurückführen auf gewöhnliche Extremwertaufgaben, indem man die Nebenbedingung nach einer der Variablen auflöst und diese dann in f einsetzt; in anderen Fällen kann man gelegentlich die Nebendedingung durch geeignete Parameterwahl oder Wahl eines angepaßten Koordinatensystems berücksichtigen. Im allgemeinen wird aber beides nicht möglich sein, so daß wir andere Methoden brauchen.

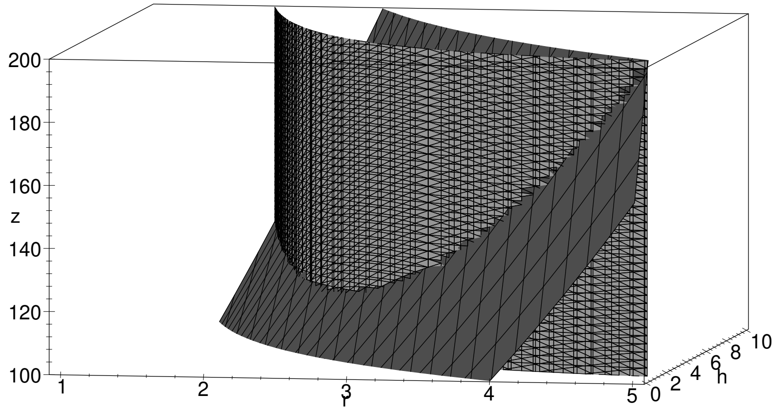


Abb. 44: Oberfläche einer Konservendose mit festem Volumen

Unser bisherige Theorie für lokale Extrema ist in dieser Situation nicht anwendbar, denn die lokalen Extrema von f werden nur in den seltensten Fällen die Nebenbedingung $g = 0$ erfüllen; im obigen Beispiel zeigt Abbildung 44 die Nebenbedingung als eng schraffierte Fläche dargestellt und der Graph von f als weiter schraffierte; wie man sieht, läßt sich der Wert von f problemlos verkleinern, wenn man nur die Fläche $g = 0$ verläßt, und in der Tat ist auch ohne jede Mathematik sofort klar, daß man mit weniger Blech auskommt, wenn man die Konservendose einfach schmäler oder kürzer macht.

Die Grundidee für ein alternatives Verfahren wird klar bei der Betrachtung der Niveaulinien in Abbildung 45: Die Niveaulinie für $g = 0$ ist gestrichelt eingezeichnet, verschiedene Niveaulinien von f als durchgezogene Kurven.

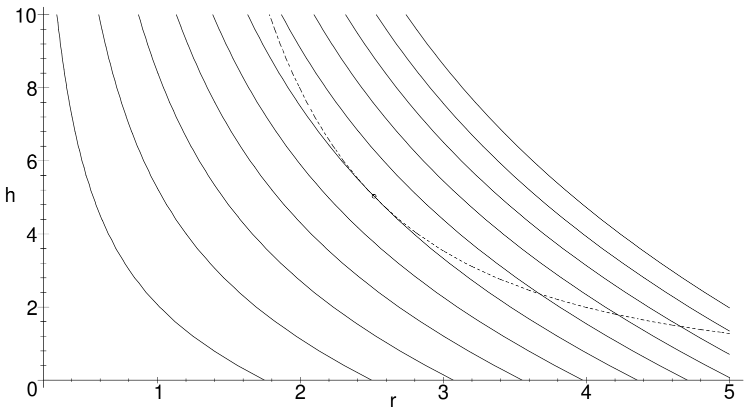


Abb. 45: Niveaulinien für Oberfläche und Volumen

Wie man sieht, schneiden einige dieser Niveaulinien die gestrichelte Kurve überhaupt nicht: Wenn man zu wenig Blech hat, kann man keine Dose mit $100\,cm^3$ Inhalt zusammenlöten. Wenn es dagegen genug Blech gibt, gibt es gleich zwei Schnittpunkte: Die Dose kann entweder eher höher oder eher breiter gemacht werden. In einem solchen Fall kann man die Niveaulinie durch eine zu einem etwas niedrigeren Niveau ersetzen,

die im allgemeinen auch wieder Schnittpunkte haben wird, so daß das Niveau noch nicht minimal sein kann. Erst wenn man im Minimum ist, fallen die beiden Schnittpunkte zusammen; wenn man nun das Niveau noch weiter erniedrigt, gibt es keine Schnittpunkte mehr.

Da somit im Minimum zwei Schnittpunkte zusammenfallen, berühren sich dort die Niveaulinien von f und von g, d.h. sie haben eine gemeinsame Tangente. Da der Gradient, wie wir wissen, senkrecht auf der Tangenten der Niveaulinien steht (die Richtungsableitung entlang einer Niveaulinie ist schließlich null), sind somit die Gradienten von f und g im Minimum zueinander parallel, d.h. der eine ist ein Vielfaches des anderen.

Dies gilt nicht nur im vorliegenden Beispiel, sondern allgemein:

Satz: $D \subseteq \mathbb{R}^n$ sei eine offene Menge und $f, g \in \mathcal{C}^1(D, \mathbb{R})$ seien stetig differenzierbare Funktionen auf D. Falls f im Punkt $\boldsymbol{a} \in D$ ein Extremum hat unter der Nebenbedinung $g(\boldsymbol{x}) = 0$, so sind grad $f(\boldsymbol{a})$ und grad $g(\boldsymbol{a})$ linear abhängig.

Beweis: Die Grundidee ist einfach: Auch wenn wir die Nebenbedingung nicht *explizit* nach einer der Variablen auflösen können, sagt uns der Satz über implizite Funktionen in vielen Fällen dennoch, daß zumindest lokal eine Auflösung existiert. Diese Auflösung kennen wir zwar nicht, aber wir können mit ihr argumentieren und, zumindest formal, auch rechnen.

Falls grad $g(\boldsymbol{a})$ der Nullvektor ist, gibt es nichts mehr zu beweisen, denn jede Menge, die den Nullvektor enthält, ist linear abhängig.

Wir können daher annehmen, daß grad $g(\boldsymbol{a})$ mindestens eine von Null verschiedene Komponente hat, und durch Umnummerieren der Koordinaten können wir o.B.d.A. annehmen, daß dies die n-te Komponente ist, d.h. $g_{x_n}(\boldsymbol{a}) \neq 0$.

Dann gibt es nach dem Satz über implizite Funktionen (**[HM I]**, *Kap. 2, §3d)* eine Umgebung U von $(a_1, \ldots, a_{n-1})$ und eine Funktion $h\colon U \to \mathbb{R}$ mit $h(a_1, \ldots, a_{n-1}) = a_n$, so daß

$$g\big(x_1, \ldots, x_{n-1}, h(x_1, \ldots, x_{n-1})\big) = 0 \quad \text{für alle } (x_1, \ldots, x_{n-1}) \in U\,.$$

Nachdem f in $\boldsymbol{a}$ ein lokales Extremum unter der Nebenbedinung $g = 0$ hat, nimmt die Funktion

$$F(x_1, \ldots, x_{n-1}) \underset{\text{def}}{=} f\big(x_1, \ldots, x_{n-1}, h(x_1, \ldots, x_{n-1})\big)$$

in $(a_1, \ldots, a_{n-1})$ ein lokales Extremum im üblichen Sinne an, d.h. der Gradient von F verschwindet dort.

Nach der Kettenregel ist für $i = 1, \ldots, n-1$

$$F_{x_i}(a_1, \ldots, a_{n-1}) = f_{x_i}(\boldsymbol{a}) + f_{x_n}(\boldsymbol{a}) \cdot h_{x_i}(a_1, \ldots, a_{n-1}),$$

und nach dem Satz über implizite Funktionen ist $h_{x_i} = -g_{x_i}/g_{x_n}$, d.h.

$$F_{x_i}(a_1, \ldots, a_{n-1}) = f_{x_i}(\boldsymbol{a}) - f_{x_n}(\boldsymbol{a}) \frac{g_{x_i}(\boldsymbol{a})}{g_{x_n}(\boldsymbol{a})}.$$

Da die linke Seite verschwindet, gilt dasselbe auch für die rechte. Die rechte Seite ist im Gegensatz zur linken auch für $i = n$ definiert und verschwindet aus trivialen Gründen; also ist für alle i

$$f_{x_i}(\boldsymbol{a}) - \frac{f_{x_n}(\boldsymbol{a})}{g_{x_n}(\boldsymbol{a})} g_{x_i}(\boldsymbol{a}) = 0$$

oder, anders ausgedrückt,

$$\operatorname{grad} f(\boldsymbol{a}) - \frac{f_{x_n}(\boldsymbol{a})}{g_{x_n}(\boldsymbol{a})} \operatorname{grad} g(\boldsymbol{a}) = \vec{0}.$$

Damit sind die beiden Gradienten in der Tat linear abhängig. ■

Falls der Gradient von g im Punkt $\boldsymbol{a}$ nicht verschwindet, gibt es somit eine Zahl $\lambda \in \mathbb{R}$, so daß

$$\operatorname{grad} f(\boldsymbol{a}) + \lambda \operatorname{grad} g(\boldsymbol{a}) = \vec{0}$$

ist, nämlich

$$\lambda = -\frac{f_{x_n}(\boldsymbol{a})}{g_{x_n}(\boldsymbol{a})}.$$

Diese Zahl bezeichnet man als LAGRANGEschen Multiplikator; mit seiner inhaltlichen Interpretation werden wir uns in Kürze beschäftigen.

JOSEPH-LOUIS LAGRANGE (1736–1813) wurde als GIUSEPPE LODOVICO LAGRANGIA in Turin geboren und studierte dort zunächst Latein. Erst eine alte Arbeit von HALLEY über algebraische Methoden in der Optik weckte sein Interesse an der Mathematik, woraus ein ausgedehnter Briefwechsel mit EULER entstand. In einem Brief vom 12. August 1755 berichtete er diesem unter anderem über seine Methode zur Berechnung von Maxima und Minima; 1756 wurde er, auf EULERs Vorschlag, Mitglied der Berliner Akademie; zehn Jahre später zog er nach Berlin und wurde dort EULERs Nachfolger als mathematischer Direktor der Akademie. 1787 wechselte er an die Pariser Académie des Sciences, wo er bis zu seinem Tod blieb und unter anderem an der Einführung des metrischen Systems beteiligt war. Seine Arbeiten umspannen weite Teile der Analysis, Algebra und Geometrie.

Zur praktischen Bestimmung von Extremwerten unter Nebenbedingungen geht man wie folgt vor: Über die Punkte, in denen der Gradient von g verschwindet, macht obiger Satz keine verwertbare Aussage; diese Punkte müssen also vorab berechnet und untersucht werden.

Danach müssen die Punkte gefunden werden, in denen es ein $\lambda \in \mathbb{R}$ gibt, so daß

$$\begin{aligned} f_{x_1}(\boldsymbol{x}) + \lambda g_{x_1}(\boldsymbol{x}) &= 0 \\ &\vdots \\ f_{x_n}(\boldsymbol{x}) + \lambda g_{x_n}(\boldsymbol{x}) &= 0 \\ g(\boldsymbol{x}) &= 0 \end{aligned}$$

ist. Dies ist ein System von $n + 1$ Gleichungen für die $n + 1$ Unbekannten, allerdings ist dieses Gleichungssystem nur selten linear und damit oft nicht mit bekannten Methoden lösbar. Manchmal kann man das Gleichungssystem durch geeignete Umformungen und Fallunterscheidungen vollständig lösen, in anderen Fällen helfen nur die aus der Numerik bekannten Näherungsverfahren wie etwa die Methode von NEWTON-RALSTON.

Falls alle Gleichungen Polynomgleichungen sind (oder durch Einführung geeigneter zusätzlicher Variablen auf Polynomgleichungen zurückgeführt werden können), kann man im Falle einer endlichen Lösungsmenge diese auch exakt bestimmen: Genau wie der GAUSS-Algorithmus zur Lösung eines linearen Gleichungssystems dieses auf eine Treppengestalt bringt, aus der man die Lösungen einfach ermitteln kann, gibt es in der Computeralgebra einen Algorithmus, der dasselbe für beliebige Systeme von Polynomgleichungen versucht; die Gleichungen, die dieser Algorithmus liefert, bezeichnet man als GRÖBNER-Basis oder Standardbasis. Zum Verständnis dieses Algorithmus, den man als eine Art Synthese aus EUKLIDischen Algorithmus und GAUSS-Algorithmus ansehen kann, sind Kenntnisse der kommutativen Algebra erforderlich, für die die Zeit in dieser Vorlesung nicht ausreicht; bei einigen Implementierungen werden zusätzlich auch noch Algorithmen aus der Informatik eingesetzt, die typischerweise nicht in Grundvorlesungen behandelt werden. Deshalb sei hier nur darauf hingewiesen, daß die gängigen universellen Computeralgebrasysteme wie Maple, Mathematica, MuePad allesamt entsprechende Routinen enthalten, mit denen man auch dann experimentieren kann, wenn man die dahinterstehende Theorie nicht versteht.

Als Beispiel, wie gelegentlich auch ein nichtlineares Gleichungssystem elementar gelöst werden kann, betrachten wir eine Anwendung aus den Wirtschaftswissenschaften: Die Gesamtproduktion eines Unternehmens oder eines Staats in Abhängigkeit von n eingesetzten Ressourcen $x_1, \ldots, x_n$ wird oft modelliert durch eine sogenannte COBB-DOUGLAS-Funktion der Form

$$P(x_1, \ldots, x_n) = \alpha x_1^{e_1} \ldots x_n^{e_n} ,$$

benannt nach den beiden Wissenschaftlern, die dieses Modell 1928 für die amerikanische Gesamtproduktion in Abhängigkeit von Kapital und Arbeit in den Jahren 1899 bis 1922 entwickelten. (Sie fanden $P \approx 1{,}01 A^{3/4} K^{1/4}$ mit A = Anzahl der Beschäftigten und K = Kapitaleinsatz.)

Betrachten wir stattdessen die Produktion eines Wirtschaftsguts aus zwei Resourcen x, y gemäß der Funktion

$$f(x,y) = P(x,y) = x^{1/2} y^{1/4} .$$

Falls wir der Einfachheit halber annehmen, daß die Kosten pro Einheit für x und y gleich sind und die Gesamtkosten höchstens gleich zwölf sein dürfen, müssen wir f maximieren unter der Nebenbedingung

$$x + y \le 12 .$$

Nun ist aber f eine monoton wachsende Funktion sowohl von x als auch von y, d.h. die maximale Produktion wird sicherlich erreicht in

einem Punkt, für den $x + y = 12$ ist, denn für jeden anderen Punkt (x, y) mit $x + y < 12$ ist $f(x, y) < f(x, 12 - x)$. Daher können wir die Nebenbedingung in der gewohnten Form

$$g(x, y) = x + y - 12 = 0$$

schreiben. Diese Nebenbedingung sowie die zu maximierende Funktion sind in Abbildung 46 dargestellt.

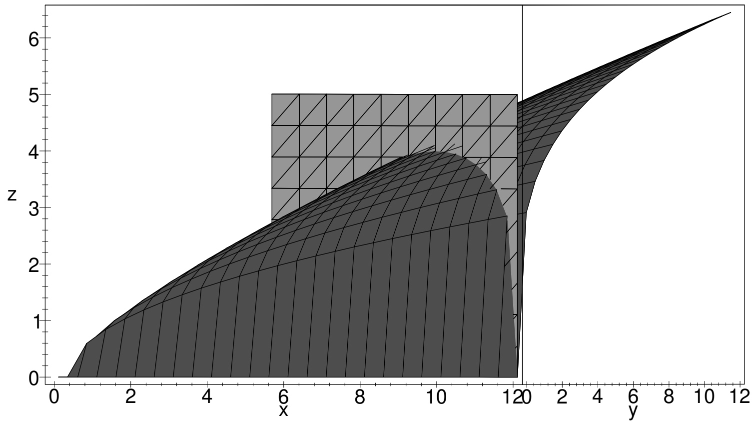


Abb. 46: Maximierung einer Produktionsfunktion bei festem Kapitaleinsatz

Ableitung beider Funktionen zeigt, daß

$$\operatorname{grad} g = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \operatorname{grad} f = \begin{pmatrix} y^{1/4}/2x^{1/2} \\ x^{1/2}/4y^{3/4} \end{pmatrix}$$

ist; das zu lösende Gleichungssystem wird also zu

$$\begin{aligned} \frac{y^{1/4}}{2x^{1/2}} + \lambda &= 0 \\ \frac{x^{1/2}}{4y^{3/4}} + \lambda &= 0 \\ x + y - 12 &= 0 \end{aligned} .$$

(Die Nenner brauchen uns nicht zu stören, denn da $f(0, y) = f(x, 0) = 0$ ist, kommen Lösungen mit $x = 0$ oder $y = 0$ für das Maximum ohnehin nicht in Frage; wir können sie also getrost ausschließen.)

Als Ansatz zu einer möglichen Lösung können wir ausnutzen, daß λ in den beiden ersten Gleichungen isoliert steht; wenn wir danach auflösen und gleichsetzen, erhalten wir die Gleichung

$$\frac{y^{1/4}}{2x^{1/2}} = \frac{x^{1/2}}{4y^{3/4}} .$$

Multiplikation mit dem Hauptnenner macht daraus

$$4y^{1/4}y^{3/4} = 2x^{1/2}x^{1/2} \quad \text{oder} \quad 2y = x .$$

Einsetzen in die dritte Gleichung ergibt $3y = 12$, also ist

$$y = 4 \quad \text{und} \quad x = 8 ;$$

der Maximalwert von f ist

$$f(8,4) = 8^{1/2} \cdot 4^{1/4} = 2\sqrt{2} \cdot \sqrt{2} = 4 .$$

Auch den LAGRANGEschen Multiplikator λ können wir noch ausrechnen:

$$\lambda = \frac{y^{1/4}}{2x^{1/2}} = \frac{4^{1/4}}{2 \cdot 8^{1/2}} = \frac{\sqrt{2}}{2 \cdot 2\sqrt{2}} = \frac{1}{4} .$$

Die Berechnung von λ war für die Bestimmung des Optimums eigentlich überflüssig; λ ist nur eine Hilfsgröße zur Berechnung des Extremums. Wir wollen uns als nächstes überlegen, daß wir λ auch inhaltlich interpretieren können: Dazu betrachten wir eine Nebenbedingung

$$g(x_1, \ldots, x_n) = c$$

mit *variabler* rechter Seite c und ein Extremum der Funktion

$$f(x_1, \ldots, x_n) .$$

Dieses Extremum wird natürlich von c abhängen; wir schreiben es in der Form

$$\big(x_1(c), \ldots, x_n(c)\big)$$

und nehmen an, daß die Funktionen $x_i(c)$ stetig differenzierbar seien. (Ein interessierter Leser kann sich anhand des Satzes über implizite Funktionen überlegen, welche Bedingungen f und g erfüllen müssen,

damit dies garantiert ist.) Der Optimalwert von f in Abhängigkeit von c ist dann

$$F(c) \underset{\text{def}}{=} f\big(x_1(c), \ldots, x_n(c)\big) .$$

Nach der Kettenregel aus **[HM I]**, *Kapitel 2, §3c)* ist

$$F'(c) = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{dx_i(c)}{dc} .$$

Genauso können wir

$$G(c) \underset{\text{def}}{=} g\big(x_1(c), \ldots, x_n(c)\big)$$

betrachten und erhalten

$$G'(c) = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial g}{\partial x_i} \frac{dx_i(c)}{dc} .$$

Da $\big(x_1(c), \ldots, x_n(c)\big)$ ein Optimum ist, sind dort die Gradienten von f und $g - c$ proportional mit Proportionalitätsfaktor λ. Da wir bei der Gradientenbildung nur nach den x_i ableiten, von denen die rechte Seite c nicht abhängt, ist der Gradient von $g - c$ gleich dem von g selbst, d.h.

$$\frac{\partial f}{\partial x_i} = \lambda \frac{\partial g}{\partial x_i} \qquad \text{für alle } i .$$

Somit ist $F'(c) = \lambda G'(c)$. Da der Punkt $\big(x_1(c), \ldots, x_n(c)\big)$ die Nebenbedingung mit rechter Seite c erfüllt, ist aber $G(c) = c$ und damit $G'(c) \equiv 1$. Also ist $\lambda = F'(c)$ die Wachstumsrate für das Optimum bei Änderung der rechten Seite der Nebenbedingung.

Im obigen Beispiel steigt also die Maximalmenge $f(x, y)$, die mit Kapitaleinsatz 12 produziert werden kann, für kleines h ungefähr um $h/4$, wenn wir den Kapitaleinsatz auf $12 + h$ erhöhen. Die Erhöhung des Kapitaleinsatzes lohnt sich, wenn für das fertige Produkt ein Preis pro Einheit erzielt werden kann, der größer ist als vier.

Als letztes wollen wir uns noch überlegen, was passiert, wenn wir nicht nur eine, sondern mehrere Nebenbedingungen erfüllen müssen. Es geht also wieder darum, eine Funktion $f(x_1, \dots, x_n)$ zu optimieren, jetzt aber unter den Nebenbedingungen

$$g_1(x_1, \dots, x_n) \ge 0, \quad \dots \quad g_r(x_1, \dots, x_n) \ge 0\,.$$

(Es genügt, Bedingungen mit $\ge$ zu betrachten, denn durch Multiplikation mit minus Eins kann man jede Ungleichung mit $\le$ in eine mit $\ge$ überführen. Auch Gleichungen $g_i = 0$ kann man zumindest formal durch die beiden Ungleichungen $g_i \ge 0$ und $-g_i \ge 0$ ausdrücken.)

Die wichtigsten Beispiele solcher Optimierungsaufgaben sind die Fälle mit linearen Funktionen f und g_i; hier redet man von *linearen Programmen.* (Das Wort *Programme* in diesem Zusammenhang hat natürlich nichts mit Computerprogrammen zu tun.) Das wichtigste Verfahren zur Lösung solcher Aufgaben, der Simplex-Algorithmus, wird in der Vorlesung *Numerik I* behandelt, so daß wir uns hier auf die *nichtlineare Programmierung* beschränken können.

Man überlegt sich leicht, daß im linearen Fall die Nebenbedingungen ein (endliches oder unendliches) Polyeder im $\mathbb{R}^n$ definieren und eine lineare Funktion, so sie ein endliches Maximum oder Minumum hat, dieses auf dem Rand dieses Polyeders annimmt, und dort sogar in einer Ecke, Man muß daher „nur“ die Ecken dieses Polyeders untersuchen – deren Anzahl allerdings exponentiell mit der Anzahl der Variablen wächst. Trotzdem führt der Simplex-Algorithmus selbst im Fall von Zehntausenden von Variablen im allgemeinen recht schnell ans Ziel, so daß das theoretische Problem der exponentiellen Komplexität im schlimmsten Fall für praktische Anwendungen keine Bedeutung hat.

Bei nichtlinearen Funktionen ist die Situation komplizierter, denn nun kann es auch im Innern Extrema geben: Die Funktion

$$f(x, y) = e^{-x^2-y^2} \quad \text{mit der Nebenbedingung} \quad x^2 + y^2 \le 1$$

etwa nimmt ihr Maximum im Punkt $(0, 0)$ an; auf dem Rand des Einheitskreises liegen nur die Minima. Im allgemeinen Fall eines nichtlinearen Programms kann ein Optimum also entweder ganz im Innern liegen oder aber eine beliebige Teilmenge der Nebenbedingungen exakt erfüllen.

Falls wir es mit inneren Punkte zu tun haben, sind diese lokale Maxima oder Minima ohne Nebenbedingungen, und wir haben uns bereits in §1 überlegt, wie man diese bestimmt: In jedem solchen Punkt verschwindet der Gradient der zu optimierenden Funktion.

Im Falle einer einzigen *Gleichung* als Nebenbedingung ist der Gradient von f linear abhängig vom Gradienten der Nebenbedingung; da der Nullvektor von jedem anderen Vektor linear abhängig ist, schließt dies auch den Fall der Optima bei inneren Punkten mit ein. Die naheliegende Verallgemeinerung auf den Fall mehrerer Nebenbedingungen ist daher der

Satz: Die Funktion $f\colon D \to \mathbb{R}$ auf $D \subseteq \mathbb{R}^n$ habe im Punkt $\boldsymbol{a} \in D$ ein Extremum unter den Nebenbedingungen

$$g_1(\boldsymbol{a}) \ge 0, \quad g_2(\boldsymbol{a}) \ge 0, \quad \dots, \quad g_r(\boldsymbol{a})\,.$$

Dann sind die $r + 1$ Vektoren

$$\operatorname{grad} f(\boldsymbol{a}), \quad \operatorname{grad} g_1(\boldsymbol{a}), \quad \operatorname{grad} g_2(\boldsymbol{a}), \quad \dots, \quad \operatorname{grad} g_r(\boldsymbol{a})$$

linear abhängig.

Der *Beweis* erfordert keine wesentlich neuen Ideen gegenüber dem Fall einer einzigen Nebenbedingung und sei daher nur kurz skizziert: Falls die Gradienten der g_i im Punkt $\boldsymbol{a}$ bereits untereinander linear abhängig sind, gibt es nichts mehr zu beweisen; nehmen wir also an, sie seien linear unabhängig. Dann gibt es (mindestens) r verschiedene Variablen x_{j_1} bis x_{j_r}, so daß

$$\frac{\partial g_i}{\partial x_{j_i}}(\boldsymbol{a}) \ne 0$$

ist. Also kann nach dem Satz über implizite Funktionen jede Nebenbedingung zur Elimination einer anderen Variablen benutzt werden, und im wesentlichen dieselbe Rechnung wie im Fall einer Nebenbedingung zeigt die Behauptung. ■

Die lineare Abhängigkeit der Vektoren

$$\operatorname{grad} f(\boldsymbol{a}), \quad \operatorname{grad} g_1(\boldsymbol{a}), \quad \operatorname{grad} g_2(\boldsymbol{a}), \quad \dots, \quad \operatorname{grad} g_r(\boldsymbol{a})$$

bezeichnet man als KUHN-TUCKER-Bedingung; sie ist eine offensichtliche Verallgemeinerung der Bedingung von LAGRANGE, ist allerdings deutlich jünger: Sie erschien 1951 in einer gemeinsamen Arbeit von H.W. KUHN und A.W. TUCKER, vier Jahre, nachdem G. DANTZIG den Simplex-Algorithmus entwickelt hatte, und fast zweihundert Jahre, nachdem LAGRANGE seine Multiplikatoren zur Bestimmung von Extrema unter einer Nebenbedingung eingeführt hatte.

§3: Numerische Verfahren

Wie wir gesehen haben, führt die Methode der LAGRANGEschen Multiplikatoren im allgemeinen auf nichtlineare Gleichungssysteme, die nur in einfachen Fällen explizit lösbar sind. In allen anderen Fällen muß man mit numerischen Methoden arbeiten, und da bietet sich an, das Problem von vornherein ohne den Umweg über LAGRANGEsche Multiplikatoren Extrema numerisch zu bearbeiten.

a) Die Gradientenmethode

Für eine differenzierbare Funktion f auf $D \subseteq \mathbb{R}^n$ ist

$$f(\boldsymbol{x}+\vec{h}) = f(\boldsymbol{x}) + \operatorname{grad} f(\boldsymbol{x}) \cdot \vec{h} + o\big(|\vec{h}|\big)\ ;$$

wenn wir ein Maximum (oder Minimum) von f ansteuern wollen, liegt es daher nahe, $\vec{h}$ so zu wählen, daß sich der Funktionswert möglichst stark vergrößert (oder verkleinert).

Nach der CAUCHY-SCHWARZschen Ungleichung ist

$$\left|\operatorname{grad} f(\boldsymbol{x}) \cdot \vec{h}\right| \le \|\operatorname{grad} f(\boldsymbol{x})\| \cdot \left\|\vec{h}\right\|\ ;$$

wir erhalten also die maximalmögliche Veränderung bei vorgegebener Länge von $\vec{h}$ genau dann, wenn $\vec{h}$ parallel zum Gradienten ist.

Damit bietet sich folgende Strategie an: Wir wählen irgendeinen Ausgangspunkt $\boldsymbol{x}_0$ und berechnen dort den Gradienten $\nabla f(\boldsymbol{x}_0)$. Weiter geben uns eine Länge ℓ_0 für den Vektor $\vec{h}$ vor, die von der Länge des Gradienten abhängen kann oder auch nicht. Dann setzen wir bei der Suche nach einem Maximum

$$\vec{h}_0 = \frac{\ell_0}{\|\nabla f(\boldsymbol{x}_0)\|}\nabla f(\boldsymbol{x}_0)\ ;$$

bei der Suche nach Minima nehmen wir das Negative davon.

Als nächstes betrachten wir den Punkt

$$\boldsymbol{x}_1 \underset{\text{def}}{=} \boldsymbol{x}_0 + \vec{h}_0\,,$$

berechnen dort den Gradienten $\nabla f(\boldsymbol{x}_0)$, setzen mit geeignetem ℓ_1

$$\vec{h}_1 = \pm\frac{\ell_1}{\|\nabla f(\boldsymbol{x}_1)\|}\nabla f(\boldsymbol{x}_1)$$

(+ für Maxima, − für Minima) zur Definition des nächsten Punkts

$$\boldsymbol{x}_2 \underset{\text{def}}{=} \boldsymbol{x}_1 + \vec{h}_1$$

und so weiter. In jedem Schritt erhöhen (oder erniedrigen) wir den Funktionswert soweit wie es mit der vorgegebenen Länge ℓ_i nur möglich ist in der Hoffnung, so irgendwann auf ein Maximum (oder Minimum) zu stoßen. Dieses können wir erreichen, wenn wir am Rand des Definitionsbereichs von f angelangt sind, oder aber wenn wir in einem Punkt sind, in dem der Gradient verschwindet: Von dort aus geht es mit diesem Verfahren nicht mehr weiter.

Da wir mit einem numerischen Verfahren nur ein verschwindend geringe Chance haben, exakt in einem Extremum zu enden, zeigt sich hier auch die Notwendigkeit einer intelligenten Wahl der Schrittweiten ℓ_i: Wenn diese zu groß sind, kann es passieren, daß wir endlos um ein Extremum herumoszillieren.

Theoretisch ist auch möglich, daß wir in einem Sattelpunkt landen, aber wenn man sich überlegt, wie die Gradienten in der Umgebung eines Sattelpunktes aussehen, wird schnell klar, daß dies nur sehr selten passiert.

Abbildung 47 zeigt ein einfaches Beispiel für einen mit der Gradientenmethode zurückgelegten Weg; hier wurde in jedem Schritt

$$\begin{pmatrix} h_i \\ k_i \end{pmatrix} = 0{,}1 \cdot \nabla f(x_i, y_i)$$

gesetzt. Der Weg geht offensichtlich recht zielstrebig auf das Maximum zu.

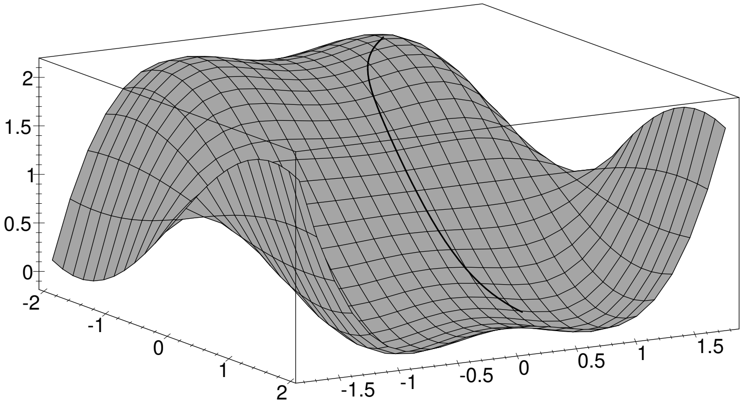


Abb. 47: Eine Anwendung der Gradientenmethode

Abbildung 48 zeigt dasselbe Bild in einen etwas größeren Zusammenhang; hier sehen wir, daß unser Streben nach kurzfristigen Gewinnen langfristig wohl doch nicht so erfolgreich war: Wenn wir vom Startpunkt aus nach rechts in die kleine Mulde abgestiegen wären, hätten wir auf dem gegenüberliegenden Hang deutlich größere Funktionswerte erreicht als im lokalen Maximum, in dem wir schließlich gelandet sind.

Dies ist ein grundsätzliches Problem von Gradientenverfahren: Falls man sie in der Nähe des (absoluten) Optimums starten läßt, führen sie schnell und zuverlässig ans Ziel, ansonsten aber ist die Gefahr sehr groß, daß man in einem nur lokalen Optimum steckenbleibt.

Um von dort wieder weiterzukommen, gibt es verschiedene Strategien. Eine anschaulich recht klare ist die sogenannte „Tunnelung". Der Name entstand aus der Betrachtung von Minimisierungsproblemen; nehmen wir also an, wir wollen das Minimum der Funktion $f(x,y)$ in einem gewissen Bereich finden und ein Gradientenverfahren hat uns in einen Punkt $\boldsymbol{x}_M$ geführt, von dem aus es nicht mehr weiterkommt. Um zu sehen, ob $z_M = f(\boldsymbol{x}_M)$ wirklich der kleinste Wert ist, den f im betrachteten Bereich annehmen kann, versuchen wir, eine weitere Lösung der Gleichung

$$f(\boldsymbol{x}) = z_M$$

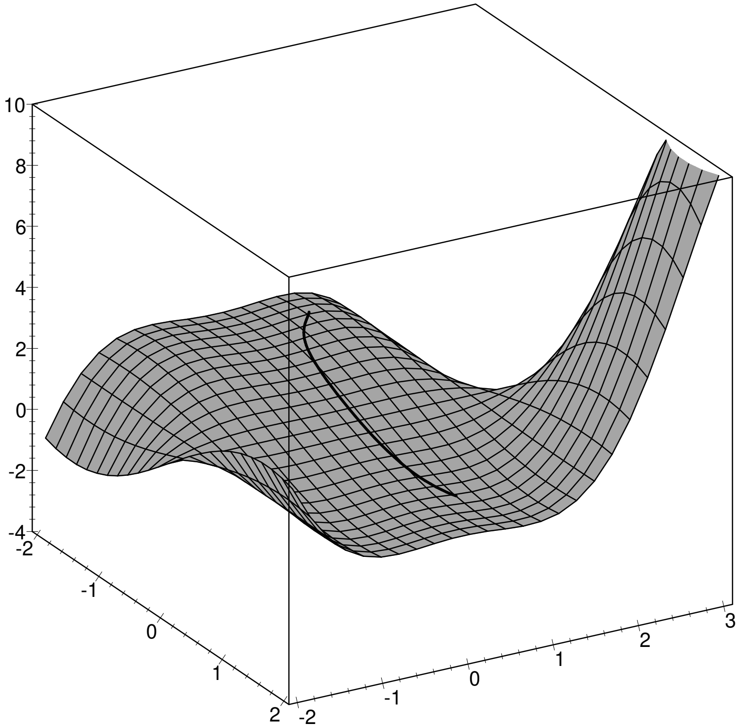


Abb. 48: Der Weg aus Abb. 47 aus einem weiteren Blickwinkel

zu finden. Dafür gibt es eine ganze Reihe numerischer Verfahren, z.B. das Verfahren von NEWTON-RAPHSON, mit denen sich zumindest ein solcher Punkt leicht finden läßt. Leider könnte dieser Punkt unser Ausgangspunkt $\boldsymbol{x}_M$ sein; deshalb sucht man tatsächlich nicht nach Lösungen der Gleichung $f(\boldsymbol{x}) = z_M$, sondern nach Lösungen einer leicht abgewandelten Gleichung der Form

$$\widetilde{f}(\boldsymbol{x}) = z_M ,$$

wobei $\widetilde{f}$ dadurch aus f entsteht, daß man die Funktionswerte in der unmittelbaren Umgebung von (x_M, y_M) starkt anhebt, so daß das dortige Minimum verschwindet. Dazu kann man beispielsweise eine Funktion der Form

$$G(x,y) = ae^{\frac{(x-x_M)^2+(y-y_M)^2}{b}}$$

mit geeigneten Parametern a, b wählen, wie sie in Abbildung 49 zu sehen ist, und

$$\widetilde{f}(x,y) = f(x,y) + G(x,y)$$

setzen.

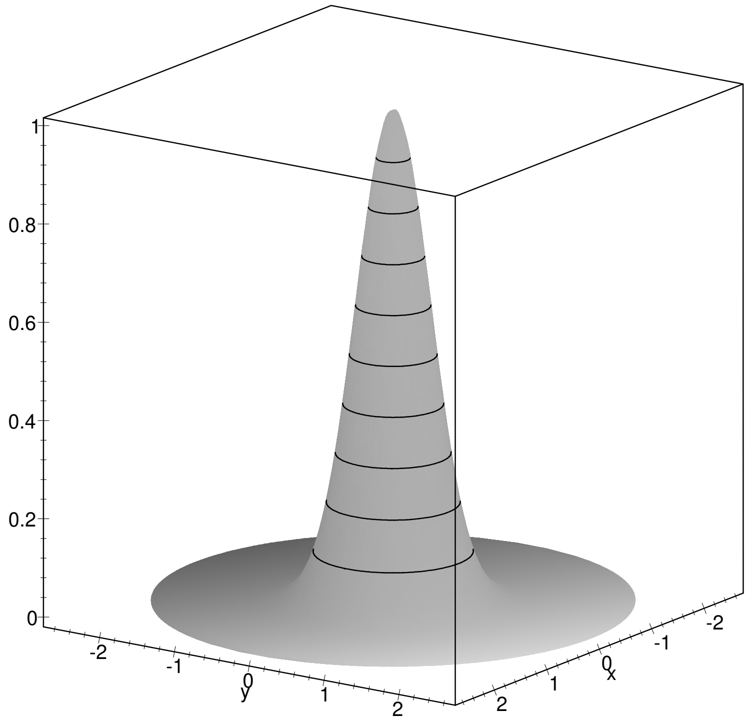


Abb. 49: $G(x,y) = e^{-3(x^2+y^2)}$

Dies bringt das Minimum im Punkt $\boldsymbol{x}_M$ zum Verschwinden und verändert die Funktion praktisch nicht, wenn man nur hinreichend weit entfernt ist von $\boldsymbol{x}_M$. (Je kleiner b ist, umso lokalisierter ist die Veränderung.) Eine Lösung der Gleichung

$$\widetilde{f}(\boldsymbol{x}) = z_M ,$$

so es eine gibt, liegt also nicht in der unmittelbaren Umgebung von $\boldsymbol{x}_M$ und ist daher ein guter Ausgangspunkt, um dort die Gradientenmethode noch einmal zu starten bis zum nächsten lokalen Minimum und so weiter. Sobald die Gleichung nicht mehr lösbar ist, können wir ziemlich sicher sein, daß z_M das globale Minimum ist – es sei denn, wir hätten die Parameter a und b sehr dumm gewählt.

Tunnelung ist auch ein wichtiges Konzept in der Physik: Dort versucht ein System bekanntlich stets, sein Energieminimum zu erreichen. Dies kann jedoch daran scheitern, daß es sich in einem lokalen Minimum befindet und nicht genügend Energie aufbringen kann, um den Energiewall zu überwinden, der es vom absoluten Minimum trennt. Zumindest im Bereich der Quantentheorie gibt es dann auch den sogenannten *Tunneleffekt,* der es einzelnen Teilchen erlaubt, diesen Wall zu tunneln und auf diese Weise einen Zustand niedrigerer Energie zu erreichen.

Im obigen Beispiel geht es nicht um ein Minimum, sondern um ein Maximum, da die Suche danach graphisch besser darstellbar ist. Also graben wir auch keinen Tunnel, sondern spannen ein Hochseil, das irgendwo auf der eingezeichneten Ebenen liegt und uns vom erreichten Zwischenhoch zur Startposition für einen weiteren Anstieg bringt. (Tatsächlich ist die Ebene etwas zu tief eingezeichnet, damit man das alte Maximum noch erkennen kann; das Seil muß also etwas höher hängen.)

b) Der Metropolis-Algorithmus

Eine weitere Idee zur Vermeidung von Zwischenhochs hat ebenfalls viel mit Physik zu tun: Ein Gas erreicht seinen Zustand minimaler Energie dann, wenn die Bewegungsenergie $\frac{1}{2}mv^2$ eines jeden Teilchens gleich null ist, wenn sich also nichts mehr bewegt. Dies geschieht aber höchstens am absoluten Nullpunkt; bei positiven Temperaturen werden die meisten Teilchen positive kinetische Energie haben. Nach LUDWIG

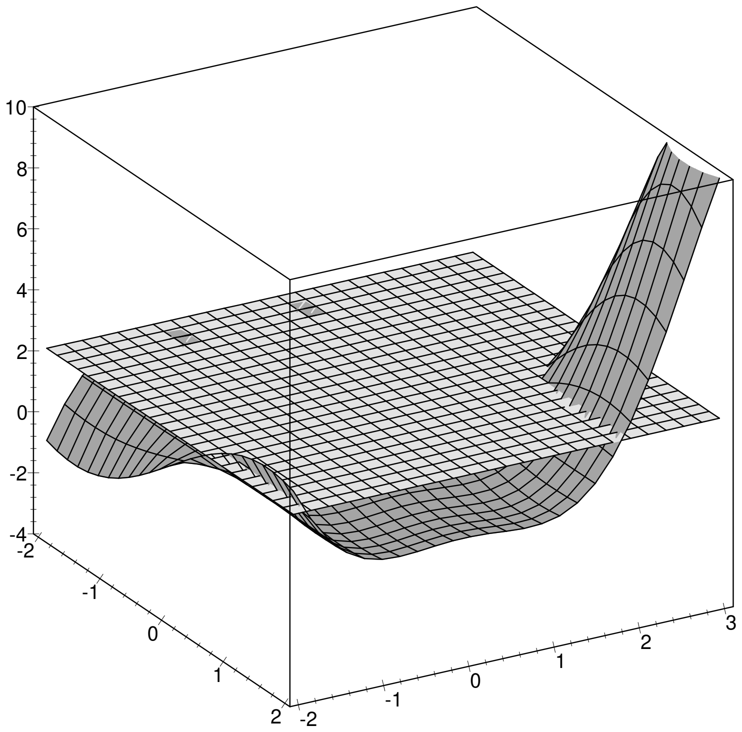


Abb. 50: „Tunnelung“ für Maxima

BOLTZMANN ist dabei die Wahrscheinlichkeit dafür, daß ein Teilchen die Energie $E = \frac{1}{2}mv^2$ hat, bei Temperatur T proportional zu

$$e^{-\dfrac{E}{kT}},$$

mit einer Konstanten $k \approx 1{,}38066 \cdot 10^{-23} J/K$, die heute als BOLTZMANN-Konstante bezeichnet wird.

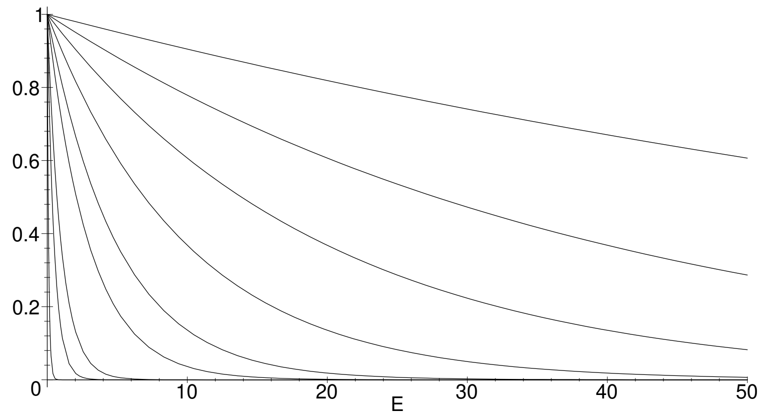


Abb. 51: $e^{-E/kT}$ für kT = 0,1, 0,5, 1, 3, 5, 10, 20, 40, 100

LUDWIG BOLTZMANN (1844–1906) wuchs auf und studierte in Wien; danach lehrte er in Graz, Heidelberg, Berlin, Graz, Wien, Graz, Wien, Leipzig und Wien. Er war jeweils Professor für Theoretische Physik, für Mathematik oder für Experimentalphysik. Auf seiner letzten Stelle in Wien hielt er auch eine so erfolgreiche Philosophievorlesung, daß in Kaiser Franz Josef in den Palast einlud. Am bekanntesten ist er für die Begründung der statistischen Mechanik, eine damals sehr umstrittene Theorie. Ob die damit verbundenen Anfeindungen zu seinem Selbstmord führten, ist unbekannt.

Bei der *simulierten Abkühlung* oder BOLTZMANN-*Maschine* ahmt man dies nach, indem man mit einer hohen Temperatur startet und der Richtung, in der man weitergeht, einer dieser Temperatur entsprechende Freiheit läßt. Man geht also nicht mehr unbedingt in Richtung des Gradienten, sondern geht zufällig in eine von endlich vielen vorgegebenen Richtungen. Die Wahrscheinlichkeit für den Richtungsvektor $\vec{h}_j$ soll dabei analog zur BOLTZMANN-Verteilung festgelegt werden, d.h. wir ordnen ihm eine „Energie“

$$E_j = \pm\bigl(f(\boldsymbol{x} + \vec{h}_j) - f(x, y)\bigr)$$

zu (positiv bei der Suche nach einem Minimum, negativ bei der Suche nach einem Maximum) und die Wahrscheinlichkeit dafür, daß wir in

Richtung $\vec{h}_j$ gehen, soll proportional sein zu $e^{-E_j/kT}$. Sie ist also, falls N Richtungen zur Verfügung stehen, gleich

$$p_j \underset{\text{def}}{=} e^{\frac{-E_j/kT}{\sum_{\ell=1}^{N} e^{-E_\ell/kT}}} .$$

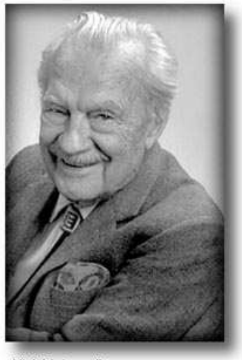
Zur Wahl einer Richtung erzeugen wir uns somit eine Zufallszahl Z zwischen null und eins und gehen in Richtung $\vec{h}_j$, wenn

$$\sum_{\ell=1}^{j-1} p_\ell < Z \leq \sum_{\ell=1}^{j} p_\ell$$

ist. (Die Frage, wie lang die Richtungsvektoren im wievielten Schritt sein sollen, wollen wir hier ausklammern.)

Bie hohen Temperaturen ist damit die Richtung fast vollständig zufallsbedingt gewählt, während in der Nähe des absoluten Nullpunkts praktisch nur noch die optimale Richtung eine Chance hat. Falls wir bei hoher Temperatur in einem Zwischenextremum landen, sorgt dies also mit recht hoher Wahrscheinlichkeit dafür, daß wir dort nicht steckenbleiben.

Am Ende wollen wir allerdings im absoluten Optimum steckenbleiben, d.h. wir müssen die Temperatur im Verlauf der Rechnung immer weiter senken – daher der Name *simulated annealing* = simulierte Abkühlung. Bei der Anwendung auf Optimierungsprobleme bezeichnet man diese Vorgehensweise als den METROPOLIS-Algorithmus. In welcher Weise man die Temperatur am besten senkt, ist immer noch ein Gebiet aktiver Forschung. Man kann zeigen, daß man statistisch betrachtet praktisch immer im Optimum landet, wenn man mit einer hinreichend hohen Ausgangstemperatur T_1 startet und im r-ten Schritt mit Temperatur $T_1/\log(r+1)$ arbeitet, aber bei einer derart langsamen Abkühlung braucht der Algorithmus viel zu lange, um ans Ziel zu kommen.



Nick Metropolis

NICHOLAS METROPOLIS (1915–1999) wuchs auf in Chicago, wo er Physik studierte und 1941 promovierte. Seit 1943 arbeitete er, unterbrochen durch Professuren an der Universität Chicago von 1945–1948 und 1957–1965, in den Los Alamos Labaratories, die ihn im Nachruf als *giant of mathematics and one of the founders of the Information Age* bezeichneten. Sein Ruhm als Mathematiker beruht vor allem auf den von ihm entwickelten Anwendungen statistischer Verfahren auf eine Vielzahl von mathematischen Problemen; zum Pioneer des Informationszeitalter macht ihn u. a., daß er einer der ersten Anwender des ersten elektronischen Computers ENIAC war, dessen Nachfolger MANIAC baute und an der Universität Chicago das Institute for Computer Research gründete und bis 1965 leitete.

In Abbildung 52 sieht man, wie sich der Algorithmus bei einer Abkühlungsregel verhält, die im r-ten Schritt mit Temperatur T_1/r arbeitet: Zumindest im gezeigten Fall funktioniert das recht gut.

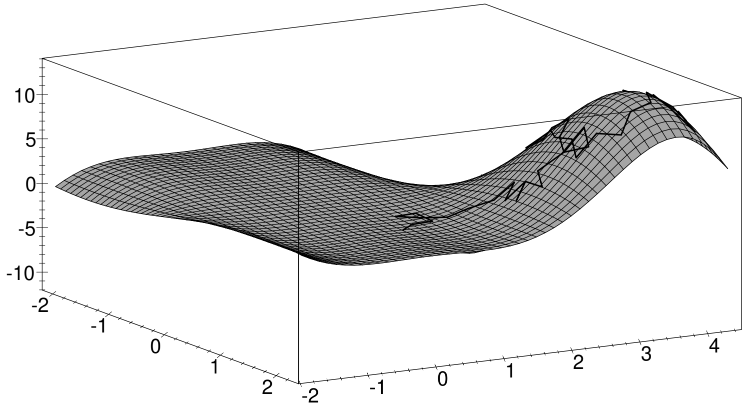


Abb. 52: Der METROPOLIS-Algorithmus für obiges Problem

In anderen Fällen (d.h., wenn andere Zufallszahlen gezogen werden) bleibt man damit aber auch gelegentlich ziemlich lange im Tal hängen; ein Beipspiel dafür zeigt Abbildung 53.

Auch hier kommt man aber immerhin in eine gute Startposition, und oft

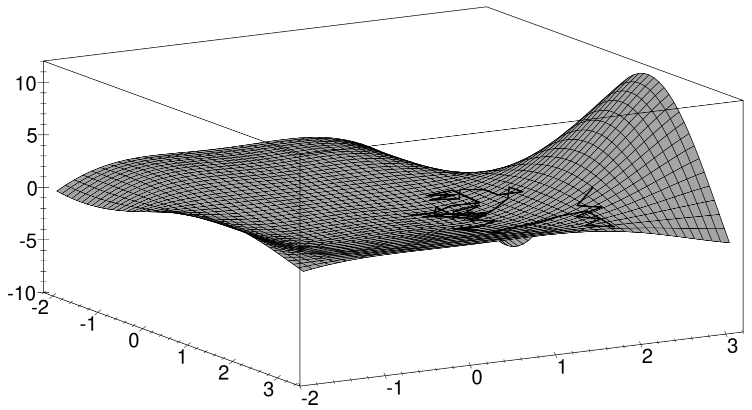


Abb. 53: Ditto mit anderen Zufallszahlen

wird es am besten sein, nach hinreichend vielen METROPOLIS-Schritten einfach ein gewöhnliches Gradientenverfahren zu starten.

Zusammenfassend läßt sich sagen, daß der METROPOLIS-Algorithmus und verwandte Verfahren (die sogenannten Monte-Carlo-Methoden) sehr nützliche Hilfsmittel zur Optimierung sind, falls man so gut wie nichts über die zu optimierende Funktion weiß. Sie funktionieren nicht nur bei kontinuierlichen Problemen, wie den hier betrachteten, sondern auch für diskrete und kombinatorische Optimierungsprobleme.

Sie haben allerdings den Nachteil, daß man nie garantieren kann, daß man ein Optimum erreichen wird, und selbst wenn man eines erreicht, kann die Methode dies nicht erkennen. (Es gibt alternative numerische Methoden, die das können.)

c) Zusammenfassung

Die nichtlineare Optimierung ist ein sehr weites Feld, von dem eine Grundvorlesung wie die *Höhere Mathematik* nur einen kleinen Ausschnitt behandeln kann. Dieser Ausschnitt besteht nicht aus den für die Praxis wichtigsten Verfahren, sondern aus denen, die sich am besten in den Stoff der Vorlesung einordnen. Sie sind zwar (in Kombination mit

dem aus der *Numerik* bekannten Simplex-Verfahren) die Grundbausteine, aus denen die meisten praktisch relevanten Verfahren zusammengesetzt sind, aber für die vielen kleinen Abwandlungen, die dazu führen, daß man ein Problem wirklich effizient lösen kann, müßte man deutlich mehr Zeit aufwenden, als hier zur Verfügung steht. Interessenten seien auf entsprechende Spezialvorlesung aus dem Bereich der Mathematik oder Operations Research verwiesen.

§4: Grundzüge der Fehler- und Ausgleichsrechnung

Physikalische Gesetze machen meist nur dann eine Aussage über ein reales System, wenn alle Umgebungsbedingungen exakt kontrolliert werden können. Das ist in der Praxis natürlich nie möglich. Insbesondere hat man bei der Anwendung physikalischer Prinzipen zur Messung von Daten keine Chance, den exakten Wert der zu messenden Größe zu bestimmen; der gemessene Wert wird immer von zahlreichen kleineren Störungen beeinflußt sein, die man bei einem gut durchgeführten Experiment für alle praktischen Zwecke als zufällig betrachten kann.

Zusätzlich kann die Messung noch durch mehr oder weniger große *systematische* Fehler verfälscht sein; diese können hervorgerufen werden durch ein falsch kalibriertes Meßgerät, Ablesen auf der falschen Skala eines Meßinstruments, durch falsche Anwendung von Meßvorschriften *usw.* Mit diesen systematischen Fehlern wollen wir uns hier nicht beschäftigen; in diesem Paragraphen soll es nur um *Zufallsfehler* gehen.

a) Das Laplacesche Fehlermodell

Der französische Mathematiker PIERRE SIMON, MARQUIS DE LAPLACE (1749–1827), dem wir in dieser Vorlesung bereits mehrfach begegnet sind, entwickelte ein extrem vereinfachtes Modell für das Zustandkommen zufälliger Meßfehler. Trotz seiner unrealistischen Annahmen ist es auch für die Praxis immer noch sehr interessant, da man inzwischen weiß, daß auch sehr viel kompliziertere realistische Fehlerquellen dasselbe Verhalten zeigen, das LAPLACE aus seinem Modell ableitete.

Die Grundannahme des LAPLACEschen Fehlermodells können wir uns so vorstellen, daß eine große Anzahl von „Dämonen“ (oder Fehlerquellen)