Ralf Hollstein

Optimierungsmethoden

Einführung in die klassischen, naturanalogen und neuronalen Optimierungen

Springer Vieweg

Optimierungsmethoden

Ralf Hollstein

Optimierungsmethoden

Einführung in die klassischen, naturanalogen und neuronalen Optimierungen

Springer Vieweg

Ralf Hollstein
Linnich, Deutschland

ISBN 978-3-658-39854-5 ISBN 978-3-658-39855-2 (eBook)
https://doi.org/10.1007/978-3-658-39855-2

Die Deutsche Nationalbibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über http://dnb.d-nb.de abrufbar.

Planung/Lektorat: David Imgrund
Springer Vieweg ist ein Imprint der eingetragenen Gesellschaft Springer Fachmedien Wiesbaden GmbH und ist ein Teil von Springer Nature.
Die Anschrift der Gesellschaft ist: Abraham-Lincoln-Str. 46, 65189 Wiesbaden, Germany

Für Marita, Melanie und Leo

Vorwort

Optimierungen spielen in allen Lebensbereichen eine wichtige Rolle, sei es, um Kosten, Ressourcen, Risiken, Bearbeitungszeiten, Umweltbelastungen, Energieverbrauch, Reise- und Transportzeiten zu minimieren oder Gewinn, Motorleistung, Portfolio, Produktion, Umsatz und sportliche Leistungen zu maximieren. Die Optimierungsprobleme in der realen Welt sind vielfältig und unterscheiden sich in der Komplexität. In der Literatur gibt es eine unübersehbare Vielzahl von Optimierungsmethoden, davon wiederum Varianten und Untervarianten. Dieses Buch gibt einen Überblick zu den wichtigsten Optimierungsmethoden, wobei die Verfahren beispielhaft vorgestellt werden. Auf detaillierte Erläuterungen zur Theorie der in diesem Buch beschriebenen Verfahren wird verzichtet und auf die einschlägige Literatur verwiesen.

Zu vielen Optimierungsproblemen kann das Optimum bei größeren Eingabegrößen nicht in akzeptabler Zeit exakt bestimmt werden. Deshalb wendet man für komplexere Optimierungsprobleme sogenannte heuristische Verfahren an, die zwar nicht notwendigerweise die beste Lösung liefern, aber dafür in vertretbarer Zeit möglichst gute Lösungen finden. Beispielsweise ist in Kommunikationsnetzen beim dynamischen Routen von Datenpaketen nicht entscheidend, den kürzesten Weg zum Zielknoten zu bestimmen, sondern in möglichst kurzer Zeit einen möglichst kurzen Weg zu ermitteln. Bei vielen Optimierungsproblemen stoßen herkömmliche Großrechner an ihre Grenzen, wie zum Beispiel bei der Nutzung von Stromnetzen oder bei der optimalen Steuerung des Verkehrsflusses in einer Stadt. Hierbei muss der Verkehrsfluss dynamisch gesteuert werden, Staus müssen erkannt und Ersatzrouten bei ständig sich verändernden Optima gefunden werden. Dazu spielen effiziente Optimierungsalgorithmen eine wichtige Rolle.

Bei der Entwicklung von heuristischen Optimierungsverfahren werden gezielt Lösungen in der Biologie gesucht, analog wie in der Bionik, bei der zur Lösung von technischen Problemen Konstruktionen und Strukturen aus der Natur nachgeahmt werden. Dazu zählen beispielsweise der Klettverschluss nach dem Vorbild einer Klette, die Konstruktion von Flugzeugen nach dem Vorbild der Vögel, die selbstreinigenden Oberflächen nach dem Vorbild von Lotusblättern oder die Form des japanischen Shinkansen-Schnellzuges nach dem Vorbild des Eisvogelschnabels zur Lärmreduzierung.

Bei der Entwicklung von naturinspirierten Optimierungsverfahren stehen die Verfahrensweisen der Natur im Vordergrund. Zu den bekanntesten Optimierungsmethoden zählen die evolutionären Algorithmen, die sich am Vorbild der natürlichen Evolution orientieren. Die Grundprinzipien der Evolution wie Mutation, Rekombination und Selektion lassen sich algorithmisch in Optimierungsverfahren umsetzen, die breite Anwendung in vielen Gebieten finden. Bei diesen natur-analogen Optimierungsverfahren werden Ausgangslösungen so lange verändert und kombiniert, bis eine dieser Lösungen zu den Anforderungen passt. Ebenfalls weitverbreitet sind Optimierungsmethoden, die das Verhalten von Schwärmen imitieren. Schwärme bilden eine Gruppe von vielen primitiven Lebewesen, die komplexe Fähigkeiten entwickeln können, was man als Schwarmintelligenz bezeichnet. Beobachtet man etwa Ameisen bei der Nahrungssuche, so kann man feststellen, dass die Ameisen von ihrem Nest zum Futterplatz meistens den kürzesten Weg finden. Die Optimierungsmethode, die diese Optimierungsstrategie nachahmt, konnte erfolgreich in vielen Bereichen angewendet werden, wie zum Beispiel bei der Tourenplanung. Es haben sich weitere schwarmbasierte Optimierungsmethoden etabliert, unter anderem Verfahren, die Optimierungsstrategien von Bienen und Vögeln imitieren. Ebenfalls lassen sich viele Probleme mithilfe von sogenannten künstlichen Immunsystemen lösen, die Konzepte natürlicher Immunsysteme bei der Bekämpfung von Antigenen wie Bakterien, Viren, Pilzen und Parasiten nachahmen.

Im ersten Teil werden verschiedene Optimierungsprobleme vorgestellt. Gegenstand des zweiten Teils sind klassische Methoden zur Lösung von Optimierungsproblemen. Im dritten Teil werden naturanaloge Optimierungsmethoden behandelt.

Gegenstand des letzten Teils des Buches sind Optimierungen von künstlichen neuronalen Netzen sowie Methoden des maschinellen Lernens zur Lösung von Optimierungsproblemen. Das künstliche neuronale Netz ist dem Aufbau des biologischen Gehirns nachempfunden. Es besteht aus Neuronen (Knoten), die über sogenannte Kanten mit anderen Neuronen verbunden sind und Informationen modifiziert an andere Neuronen weiterleiten.

Ein neues Forschungsgebiet sind neuronale kombinatorische Optimierungsverfahren, abgekürzt NCO. Dieser Begriff ist von Bello et al. 2015 eingeführt worden. Die NCO-Methoden stellen einen Strategie-Wechsel dar. Bei der herkömmlichen Programmierung einer Heuristik erhält der Computer Anweisungen zur Bestimmung einer brauchbaren Lösung des Optimierungsproblems. Dagegen ermittelt der Computer mit dem NCO-Verfahren selbstständig ohne menschliche Hilfe die Heuristik, wobei die Heuristik im Verborgenen bleibt. Dabei werden Verfahren aus dem Bereich des maschinellen Lernens angewendet. Dazu stehen vorprogrammierte Module aus Programmbibliotheken wie z. B. TensorFlow zur Verfügung. Der wesentliche Vorteil der NCO-Methoden besteht darin, dass diese Verfahren auf praktische Optimierungsprobleme anwendbar sind, zu denen keine guten Heuristiken existieren. Dieses Buch gibt eine Einführung in dieses neue vielversprechende Forschungsgebiet der KI-basierten, selbstlernenden Optimierungsalgorithmen.

Das Buch dient als Einstieg in die Optimierungsverfahren und wendet sich an Anwender auf den Gebieten der praktischen Optimierung sowie an Studierende der Informatik, Mathematik, Wirtschaftswissenschaften und Ingenieurwissenschaften.

Linnich
September 2022

Ralf Hollstein

Inhaltsverzeichnis

Abkürzungsverzeichnis

ABC	Artificial Bee Colony Algorithm
ACS	Ant Colony System
Adam	Adaptive Moment Estimation
aiNet	Künstlicher Immunnetzwerk-Algorithmus
AIS	Künstliches Immunsystem
AS	Ameisenalgorithmus
ASrank	Ranked-Based Ant System
AS-SCSP	Ant System-Shortest Common Supersequence Problem
BA	Bienenalgorithmus
BAT	Fledermausalgorithmus
BFD	Best Fit decreasing
BinBA	Binärer Fledermausalgorithmus
BN	Batch-Normalisierung
BPTT	Backpropagation through Time
C&P	Cutting and Packing Problem
CLONALG	Klonaler Selektions-Algorithmus
CVRP	Capacitated Vehicle Routing Problem
DPSO	Diskreter Partikelschwarmalgorithmus
EAS	Elitist Ant System
ERX	Edge Recombination Crossover
ES	Evolutionsstrategien
FFD	First Fit decreasing
GA	Genetischer Algorithmus
GAP	Generalised Assignment Problem
GNN	Graphische Neuronale Netze
HopSA	Hopfield-Simulated-Annealing-Algorithmus
KNN	Künstliche neuronale Netze
LSTM	Long Short-Term Memory
MDVVRP	Multi-Depot Vehicle Routing Problem
MMAS	MAX-MIN Ant System
MOBA	Multikriterieller Fledermausalgorithmus

MOPSO	Multikriterielle Partikelschwarmoptimierung
NCO	Neuronale kombinatorische Optimierung
NFD	Next Fit decreasing
NSA	Negativer-Selektions-Algorithmus
NSGAII	Nondominated Sorting Genetic Algorithm II
OX	Order Crossover
PMX	Partially Matched Crossover
PSA	Positiver-Selektions-Algorithmus
PSO	Partikelschwarmalgorithmus
RL	Reinforcement Learning
RMSProp	Root Mean Square Propogation
RNN	Rekurrente Neuronale Netze
S2V	Structure2Vec
SA	Simulated Annealing
SCSP	Shortest Common Supersequence Problem
SGD	stochastisches Gradientenverfahren
SI	Sinflut-Algorithmus
SUS	Stochastic Universal Sampling
TA	Threshhold-Accepting-Algorithmus
TSP	Traveling Salesman Problem
VPR	Vehicle Routing Problem
VRPTW	Vehicle Routing Problem with Time Windows

Teil I
Optimierungsprobleme

Kapitel 1
Einführung

Es gibt eine unübersehbare Vielzahl verschiedener Optimierungsprobleme in der realen Welt, wie zum Beispiel Optimierungsaufgaben aus den Bereichen Logistik, Technik, Finanzwirtschaft, Medizin, Telekommunikation oder Verkehrsplanung. Im ersten Kapitel werden verschiedene Optimierungsprobleme aus diesen Bereichen aufgelistet. Weiterhin werden Grundbegriffe der Optimierung eingeführt.

1.1 Optimierungsprobleme in der realen Welt

Im Folgenden werden stellvertretend einige Optimierungsprobleme aus unterschiedlichen Bereichen aufgeführt:

Produktionsplanung

- Minimierung des Verschnitts beim Zuschneiden von Rohren, Holzplatten oder Stoffen und beim Stanzen von Blechen
- Minimierung des Laderaums beim Beladen von LKWs, Containern oder Schiffen
- Optimierung der Lagerhaltung einer Firma
- Kostengünstige Mischung aus einem Vorrat (z. B. Futtermischungen)

Tourenplanung

- Minimierung der Wegstrecke zwischen zwei Orten
- Bestimmung der kürzesten Rundreise
- Optimierung der Routen für Müllabfuhr, Wartungsfahrten, Paketlieferung oder Entleerung von Briefkästen
- Optimierung der Laufwege von Bohrautomaten
- Optimierung der Auslastung von Fahrzeugen

Städte- und Verkehrsplanung

- Optimale Steuerung des Verkehrsflusses
- Optimierung bei der Auslegung von Strom- und Wasserleitungen

R. Hollstein, *Optimierungsmethoden*, https://doi.org/10.1007/978-3-658-39855-2_1

- Optimierung bei der Standortbestimmung wie zum Beispiel von Feuerwehrstationen und Windrädern
- Optimale Platzierung von Parkplätzen

Telekommunikation

- Optimale Ausrichtung von Antennen
- Optimierung der Auslegung von Telefonleitungen
- Suche nach der besten Standortverteilung für Mobilfunkmasten
- Optimale Steuerung von Datenströmen in Kommunikationsnetzwerken während des Betriebs

Ablaufplanung

- Optimierung von Arbeitsabläufen
- Optimale Ausnutzung von Maschinen
- Maximierung der Kapazitätsauslastung
- Minimierung der Terminabweichung
- Optimierung bei der Erstellung von Stunden-, Bahn-, Bus- und Flugplänen

Medizin

- Maximierung der Wirkung eines Medikaments bei gleichzeitiger Minimierung der Nebenwirkungen
- Optimierung bei der medizinischen Bildverarbeitung in der Radiologie
- Erstellung eines optimalen Diätplans

Technik

- Optimierung der Oberfläche eines PKWs zur Reduzierung des Luftwiderstandsbeiwertes
- Optimale Kalibrierung eines Motors zur Minimierung des Kraftstoffverbrauchs und des Schadstoffausstoßes bei möglichst hoher Motorleistung
- Optimierung von PKW-Reifen
- Minimierung der Laufwege von Schweißrobotern beim Punktschweißen von Karosserieteilen
- Optimierung von Flugzeugflügeln
- Optimierung von Brillengläsern

Finanzwirtschaft

- Portfolio-Optimierung
- Risikominimierung von Finanzprodukten
- Optimierung von Geschäftsabläufen
- Optimierung von Investitionen
- Preisoptimierung
- Kostenminimierung

1.2 Grundbegriffe der Optimierung

Bei einer Optimierung geht es darum, zu einer Bewertungsfunktion $f : S \to \mathbb{R}$ unter allen Elementen aus einer Menge S ein Element mit der besten Bewertung zu ermitteln. Die zu optimierende Funktion f wird *Zielfunktion* und im Zusammenhang mit evolutionären Algorithmen (Kap. 12) auch *Fitnessfunktion* genannt. Der Definitionsbereich S von f wird mit *Suchraum* bezeichnet, die Elemente aus dem Suchraum nennt man *Lösungen*.

1.2.1 Globales und lokales Optimum

Definitionen

- Eine Zielfunktion $f : S \to \mathbb{R}$ besitzt in $x^* \in S$ ein *globales Maximum* bzw. *globales Minimum,* wenn für alle $x \in S$ gilt: $f(x) \leq f(x^*)$ bzw. $f(x^*) \leq f(x)$.
- Eine Zielfunktion $f : S \to \mathbb{R}$ besitzt in $x^* \in S$ ein *lokales Maximum* bzw. *lokales Minimum,* wenn es eine (kleine) Umgebung U von x^* gibt, sodass für alle $x \in U \cap S$ gilt: $f(x) \leq f(x^*)$ bzw. $f(x^*) \leq f(x)$ (s. Abb. 1.1).

1.2.2 Umwandlung eines Maximierungsproblems in ein Minimierungsproblem und umgekehrt

Durch Multiplikation einer Zielfunktion $f(x)$ mit -1 kann ein Maximierungsproblem (Minimierungsproblem) in ein Minimierungsproblem (Maximierungsproblem) umgewandelt werden. Die Extremstellen beider Funktionen sind identisch (s. Abb. 1.2).

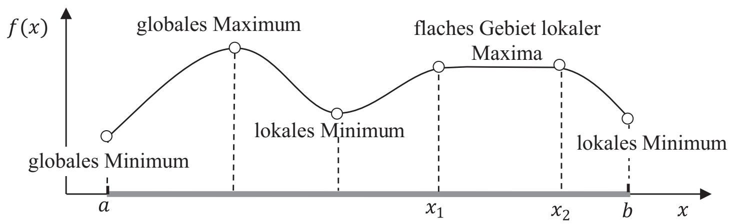


Abb. 1.1 Globale und lokale Extremwerte der Zielfunktion $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ mit den Randextremwerten in $a$und b. In dem Bereich zwischen x_1 und x_2 ist jeder Punkt eine Maximalstelle.

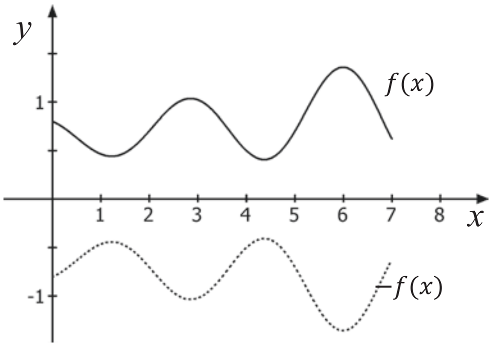


Abb. 1.2 Graphisch bewirkt die Multiplikation der Zielfunktion $f(x)$ mit -1 eine Spiegelung an der x-Achse. Die Lage der Extremstellen bleibt unberührt.

1.2.3 Notationen

Für die Bestimmung eines Maximums bzw. Minimums der Funktion $f(x)$ ist folgende Schreibweise üblich:

$$f(x) \to \max \quad \text{bzw.} \quad f(x) \to \min.$$

Besitzt die Funktion $f: S \to \mathbb{R}$ in x^* ein globales Maximum bzw. Minimum, so schreibt man

$$f\left(x^*\right) = \max_{x \in S} f(x) \quad \text{bzw.} \quad f\left(x^*\right) = \min_{x \in S} f(x)$$

und

$$x^* = \operatorname*{argmax}_{x \in S} f(x) \quad \text{bzw.} \quad x^* = \arg\min_{x \in S} f(x).$$

1.2.4 Supremum und Infimum

Supremum Ist die Funktion $f: S \to \mathbb{R}$ nach oben beschränkt, so existiert die kleinste obere Schranke M mit $f(x) \leq M$ für alle $x \in S$. M heißt *Supremum* von $f(x)$ und man schreibt

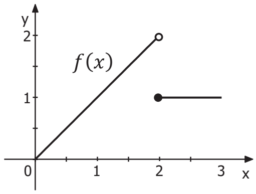
$$M = \sup_{x \in S} f(x).$$

Infimum Ist die Funktion $f: S \to \mathbb{R}$ nach unten beschränkt, so existiert die größte untere Schranke N. N heißt *Infimum* von $f(x)$ und man schreibt

$$N = \inf_{x \in S} f(x).$$

Beispiel:
Gegeben sei die Funktion

$$f\colon [0{,}3] \to \mathbb{R}, f(x) = \begin{cases} x & \text{wenn } x \in [0{,}2) \\ 1 & \text{wenn } x \in [2{,}3] \end{cases}$$



Die Funktion $f(x)$ besitzt im Intervall $[0,3]$ in 0 ein globales Minimum und kein Maximum. Es gilt

$$f(0) = \min_{x\in[0,3]} f(x) = \inf_{x\in[0,3]} f(x) = 0$$

und

$$\sup_{x\in[0,3]} f(x) = 2.$$

Die Funktion $f(x)$ nimmt im Intervall $[0,3]$ ihr Supremum nicht an.

1.2.5 Kontinuierliche, diskrete und kombinatorische Optimierung

Ein Optimierungsproblem mit der Zielfunktion $f : S \to \mathbb{R}$ heißt

- **kontinuierlich,** wenn der Suchraum S überabzählbar unendlich ist (z. B. $S = [a,b] \subset \mathbb{R}$).
- **diskret,** wenn S endlich oder abzählbar unendlich ist (z. B. $S =$ Menge $\mathbb{Z}$ der ganzen Zahlen).
- **kombinatorisch,** wenn S endlich ist (z. B. $S =$ Menge der Zahlen $1, \ldots, 10$).

Kapitel 2
Kontinuierliche Optimierungsprobleme

In diesem Kapitel werden Beispiele von kontinuierlichen Optimierungsproblemen vorgestellt. Weiterhin wird der Begriff Regression eingeführt. Bei der Regression wird eine Funktion vom bestimmten Typ an eine Datenwolke von Punkten angepasst, wobei man von linearer, quadratischer und exponentieller Regression spricht, wenn die anzupassende Funktion linear, quadratisch bzw. exponentiell ist. Weiterhin werden Extremwerteigenschaften von konkaven und konvexen Funktionen beschrieben.

2.1 Graph einer Funktion

Im Folgenden sei $f : S \to \mathbb{R}$ eine zu optimierende kontinuierliche Funktion, wobei S eine Teilmenge von $\mathbb{R}^n$ ist.

- Für eine Funktion $f : S \to \mathbb{R}$ mit $S \subset \mathbb{R}$ heißt die Menge $\{(x, f(x)) \in \mathbb{R}^2 : x \in S\}$ *Graph* von f und stellt eine ebene Kurve dar.
- Für $S \subset \mathbb{R}^2$ beschreibt der Graph $\{(x, y, f(x)) \in \mathbb{R}^3 : (x,y) \in S\}$ ein Gebirge, in dem die Talsohlen die lokalen Minima und die Berggipfel die lokalen Maxima darstellen. Der höchste Berg ist dann das globale Maximum und das tiefste Tal das globale Minimum.

Beispiele
Im Folgenden sind die Funktionsgebirge von vier (Benchmark)-Funktionen dargestellt, die oft für Performance-Tests von Optimierungsalgorithmen verwendet werden (s. Abb. 2.1).
Rastrigin-Funktion Diese Funktion ist definiert durch

$$f(x,y) = 20 + \left(x^2 - 10\cos(2\pi x)\right) + \left(y^2 - 10\cos(2\pi y)\right).$$

Sie stellt ein schweres Optimierungsproblem dar, da die Wertelandschaft sehr viele lokale Minima und ein globales Minimum im Punkt (0,0) besitzt.

R. Hollstein, *Optimierungsmethoden*, https://doi.org/10.1007/978-3-658-39855-2_2

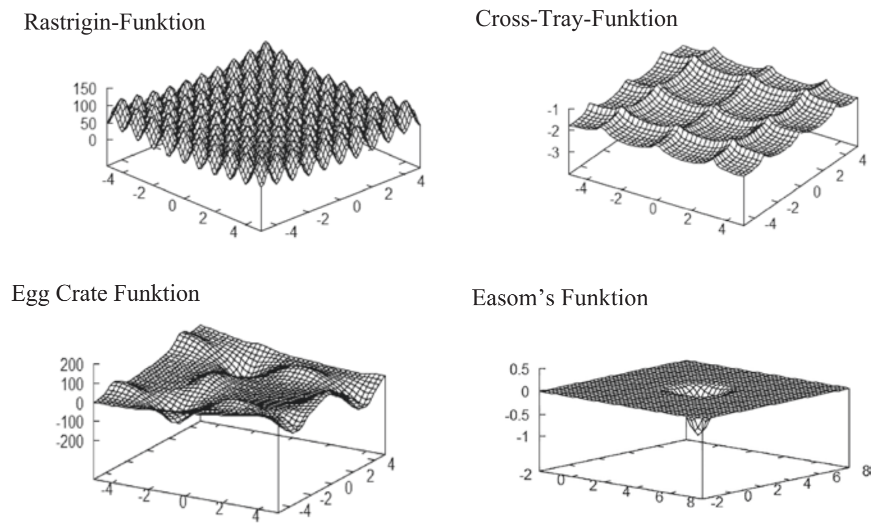


Abb. 2.1 Die Graphen der vier Benchmark-Funktionen

Cross-Tray-Funktion Diese Funktion ist definiert durch

$$f(x,y) = -0.0001|\sin(x)\sin(y)\exp\left(\left|100 - \frac{1}{\pi}\sqrt{x^2+y^2}\right|\right)| + 1)^{0.1}.$$

Die vier globalen Minima dieser Funktion sind gegeben durch $(x_0, y_0) = (\pm 1.349407, \mp 1.349407)$ mit $f(x_0, y_0) = -2.0626122$.
Egg-Crate-Funktion Diese Funktion ist definiert durch

$$f(x,y) = x^2 + y^2 + 25(\sin^2 x + \sin^2 y).$$

Das globale Minimum liegt in (0,0), wobei $f(0,0) = 0$.
Easom's Funktion Diese Funktion ist definiert durch

$$f(x,y) = -\cos(x)\cos(y)\exp\left(-(x-\pi)^2 - (y-\pi)^2\right).$$

Sie besitzt in (π, π) ein globales Minimum mit $f(\pi, \pi) = -1$.

2.2 Optimierungen mit Nebenbedingungen

In vielen Anwendungen sucht man Extremstellen einer Funktion $f : S \to \mathbb{R}$, $S \subset \mathbb{R}^n$, wobei die Lösungen x zusätzlich die Nebenbedingung $x \in M$ erfüllen sollen. Die Menge $M \cap S$ heißt dann *zulässiger Bereich* und $x \in M \cap S$ *zulässige*

Lösung. Die Nebenbedingungen können in Form von Ungleichungen $g(x) \geq 0$ oder Gleichungen der Form $h(x) = 0$ gegeben sein.

Optimierungsproblem mit Nebenbedingungen
Ein Optimierungsproblem ist gegeben durch

Zielfunktion: $f(x) \to min(max)$

Nebenbedingungen:
$$\begin{aligned} g_i(x) &\geq 0, \quad i = 1, \ldots, m \\ h_k(x) &= 0, \quad k = 1, \ldots n \\ x &\in S \end{aligned}$$

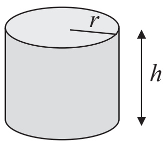
Ungleichungen der Form $g(x) \leq 0$ können durch Vorzeichenwechsel in eine Ungleichung ≥ 0 übergeführt werden.

2.3 Anwendungsbeispiele

- **Optimierungsproblem aus der Wirtschaft**

Zu bestimmen sind die Maße einer zylindrischen Dose mit einem Volumeninhalt von V, sodass die Dose mit minimalem Material hergestellt werden kann.

Die zu minimierende Oberfläche O ist gegeben durch die Summe des Flächeninhalts der Mantelfläche $2\pi rh$ und des doppelten Flächeninhalts der Deckelfläche πr^2. Das Volumen der zylindrischen Dose ergibt sich aus $V = \pi r^2 h$.



Das Optimierungsproblem lautet demzufolge:

Zielfunktion: $f(h, r) = 2\pi r^2 + 2\pi rh \to min$

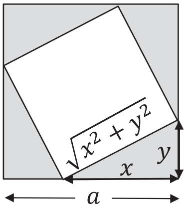
Nebenbedingungen:
$$\begin{aligned} \pi r^2 h &= V \\ r &\geq 0 \\ h &\geq 0 \end{aligned}$$

Die Lösung des Optimierungsproblems kann mit den in Kap. 6 beschriebenen analytischen Methoden leicht berechnet werden. Die optimale Lösung lautet (vgl. Abschn. 6.6.7)

$$r_0 = \sqrt[3]{\frac{V}{2\pi}}, \quad h_0 = 2\sqrt[3]{\frac{V}{2\pi}}.$$

- **Optimierungsproblem aus der Geometrie**

In einem Quadrat mit einer gegebenen Seitenlänge a soll ein Quadrat so einbeschrieben werden, dass dessen Flächeninhalt minimal ist.



Einbeschriebenes Quadrat in einem Quadrat

Der Flächeninhalt des eingeschriebenen Quadrats ist gleich $x^2 + y^2$. Man erhält damit folgendes Optimierungsproblem:

Zielfunktion: $f(x, y) = x^2 + y^2 \rightarrow min$

Nebenbedingungen:
$$\begin{aligned} x + y &= a \\ a - x &\geq 0 \\ a - y &\geq 0 \\ x, y &\geq 0 \end{aligned}$$

Mittels analytischer Methoden (vgl. Kap. 6) erhält man als optimale Lösung:

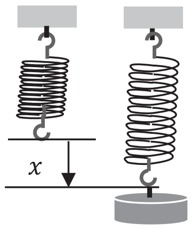
$$x = y = \frac{a}{2}.$$

- **Regression**

Einführendes Beispiel Eine Feder wird durch Anhängen eines Gewichts gedehnt. Nach dem Hookschen Gesetz besteht der lineare Zusammenhang $F = D \cdot x$ zwischen der Auslenkung x und der Gewichtskraft F, wobei D die Federkonstante ist. Das Hooksche Gesetz ist zum Beispiel auch auf die Ausdehnung eines Gummiseils beim Bungee-Springen anwendbar, wobei die Ausdehnung von der Gummihärte D und vom Gewicht des Bungee-Springers abhängt. Für die Bestimmung der Federkonstante D einer Feder seien die fünf Messdaten wie in Abb. 2.2 ermittelt worden. Es ist das Ziel, die Gerade $F = D \cdot x$ bestmöglich an die Messdaten anzupassen. Diese Gerade nennt man Ausgleichsgerade. Hierzu wird die Summe der Quadrate der Fehler $F_i - Dx_i$ (senkrechte Abweichung zur Geraden) minimiert:

$$f(D) = \sum\nolimits_{i=1}^{5} (F_i - Dx_i)^2 \rightarrow \text{min}.$$

Das Quadrieren ist erforderlich, da bei der einfachen Summierung die negativen und positiven Fehler sich gegenseitig aufheben können. Die Verwendung von Beträgen ist nicht sinnvoll, da das Rechnen mit Beträgen aufwendig ist.



Messwerte

x_i in cm	F_i in N
0,5	1
1,8	2
5,3	3
5,9	4
9,8	5

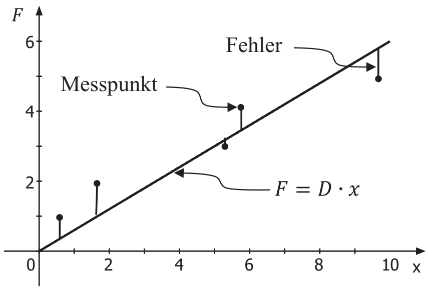


Abb. 2.2 Bestimmung einer Federkonstante D durch eine Ausgleichsgerade $F = D \cdot x$, die optimal an die Messdaten anzupassen ist

Arten von Regressionen

Bei der Regression wird eine Funktion $g(x)$ vom bestimmten Typ optimal an eine Datenwolke von Punkten $(x_i, y_i), i = 1, \ldots, n$, angepasst (s. Abb. 2.3). Je nach Funktionstyp $g(x)$ unterscheidet man folgende Arten von Regressionen:

Lineare Regression $(g(x) = ax + b)$:

$$f(a, b) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - (ax_i + b))^2 \to min$$

Quadratische Regression $\left(g(x) = ax^2 + bx + c\right)$:

$$f(a,b,c) = \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - \left(ax_i^2 + bx_i + c\right)\right)^2 \to min$$

Exponentielle Regression $\left(g(x) = a \cdot e^{kx}\right)$:

$$f(a,k) = \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - ae^{kx}\right)^2 \to min$$

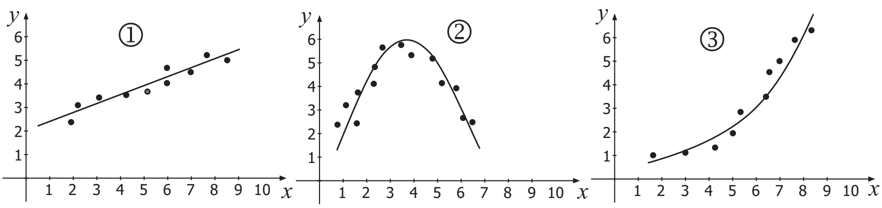


Abb. 2.3 ① Lineare Regression: Anpassung durch eine Gerade ② Quadratische Regression: Anpassung durch eine Parabel ③ Exponentielle Regression: Anpassung durch eine Exponentialfunktion