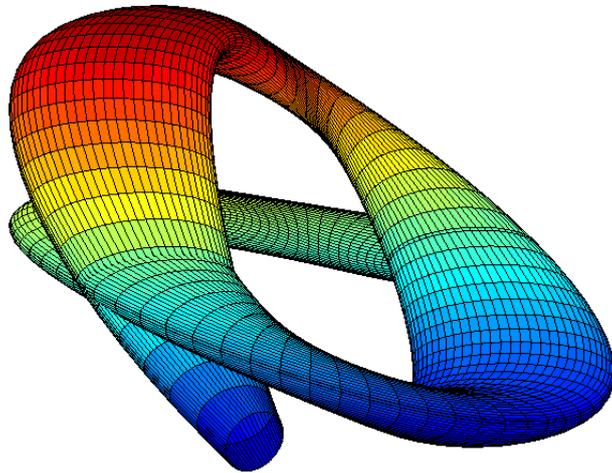


Skriptum zur Vorlesung

Optimierung



gelesen von

Prof. Dr. Stefan Volkwein

Konstanz, Sommersemester 2016

Martin Gubisch, Konstantin Ott und Stefan Volkwein

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	3
2	Optimalitätskriterien	4
2.1	Bedingungen erster und zweiter Ordnung	4
2.2	Konvexe Funktionen	6
3	Abstiegsverfahren und Schrittweitenstrategien	10
3.1	Abstiegsverfahren	11
3.2	Schrittweitenstrategien	12
3.2.1	Die Armijo-Regel	13
3.2.2	Die WOLFE-POWELL-Regel	16
3.2.3	Die strenge Wolfe-Powell-Regel	18
3.3	Praktische Aspekte	18
3.4	Gradientenverfahren	19
4	Verfahren der konjugierten Gradienten	21
4.1	A -konjugierte Richtungen	21
4.2	Bestimmung A -konjugierter Richtungen	22
5	Newton-Verfahren	25
5.1	Konvergenzraten und das lokale Newton-Verfahren	25
5.2	Das lokale Newton-Verfahren in der Optimierung	27
5.3	Das inexakte Newton-Verfahren	30
5.3.1	Das Newton-CG-Verfahren	31
5.4	Das globalisierte Newton-Verfahren	31
5.4.1	Abstiegsverfahren	31
5.4.2	Die Trust-Region-Methode	31
5.5	Quasi-Newton-Verfahren	34
	Index	38
	Literaturverzeichnis	39

1. Einleitung

Unter einem **endlichdimensionalen Optimierungsproblem** verstehen wir die Aufgabe:

$$\begin{cases} \text{Gegeben sei eine Menge } X \subseteq \mathbb{R}^n \text{ und eine stetige Funktion } f : X \rightarrow \mathbb{R}. \\ \text{Gesucht wird ein } x^* \in X \text{ mit } \forall x \in X : f(x^*) \leq f(x) \end{cases}. \quad (1.1)$$

In Kurznotation:

$$\min f(x) \quad \text{u.d.N.} \quad x \in X \quad \text{bzw.} \quad \min_{x \in X} f(x). \quad (1.2)$$

Ist $X = \mathbb{R}^n$, so heißt (1.1) bzw. (1.2) **unrestringiert**, andernfalls **restringiert**.

Im Allgemeinen nennt man X den **Zulässigkeitsbereich** und f die **Zielfunktion**.

Bemerkung 1.1.

Soll f für $x \in X$ maximiert werden, so ist dies gleichbedeutend damit, dass $-f$ u.d.N. $x \in X$ minimiert wird. \diamond

Die Aufgabenstellung (1.1) erhält ihre Bedeutung dadurch, dass sie ein mathematisches Modell für viele Probleme zum Beispiel aus der Physik, Medizin, Ökonomie und den Ingenieurwissenschaften ist.

Für den Fall, dass $X \neq \mathbb{R}^n$ ist, lässt sich der Zulässigkeitsbereich sehr häufig in der Form $X = \Omega_1 \cap \Omega_2 \cap \Omega_3$ schreiben mit

$$\Omega_1 = \{x \in \mathbb{R}^n \mid c_i(x) = 0, i \in I_1\}, \quad \Omega_2 = \{x \in \mathbb{R}^n \mid c_i(x) \leq 0, i \in I_2\}, \quad \Omega_3 = \{x \in \mathbb{R}^n \mid x_i \in \mathbb{Z}, i \in I_3\},$$

gewisse Indexmengen I_1, I_2, I_3 und Abbildungen $c_i : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, $i \in I_1, I_2$. Die Mengen $\Omega_1, \Omega_2, \Omega_3$ werden als **Gleichungs-**, **Ungleichungs-** bzw. **Ganzzahligkeitsrestriktionen** bezeichnet.

Ist X eine Menge von diskreten Punkten, so spricht man von einem **diskreten** oder **kombinatorischen** Optimierungsproblem, andernfalls von einem **stetigen** Optimierungsproblem.

Ist f nicht differenzierbar, so nennt man (1.1) ein **nicht-differenzierbares** Optimierungsproblem.

Definition 1.2.

Sei $f : X \rightarrow \mathbb{R}$ mit $X \subseteq \mathbb{R}^n$. Ein Punkt $x^* \in X$ heißt

1. **globale Minimalstelle** von f auf X , wenn $f(x^*) \leq f(x)$ für alle $x \in X$.
 $f(x^*)$ heißt dann **globales Minimum**.
2. **strikte globale Minimalstelle** von f auf X , wenn $f(x^*) < f(x)$ für alle $x \in X \setminus \{x^*\}$.
 $f(x^*)$ heißt dann **striktes globales Minimum**.
3. **lokale Minimalstelle** von f auf X , wenn es eine Umgebung U von x^* gibt, so dass $f(x^*) \leq f(x)$ für alle $x \in X \cap U$.
 $f(x^*)$ heißt dann **lokales Minimum**.
4. **strikte lokale Minimalstelle** von f auf X , wenn es eine Umgebung U von x^* gibt mit $f(x^*) < f(x)$ für alle $x \in (U \cap X) \setminus \{x^*\}$.
 $f(x^*)$ heißt dann **striktes lokales Minimum**.

Bemerkung 1.3.

Ein Punkt $x^* \in X$ ist genau dann (**globale, strikte globale, lokale, strikte lokale**) **Maximalstelle** von f auf X , wenn x^* (**globale, strikte globale, lokale, strikte lokale**) Minimalstelle von $-f$ auf X ist. \diamond

Die Existenz von (globalen) Lösungen für das Problem (1.2) kann man unter sehr milden Bedingungen zeigen; vergleiche dazu [8, Satz 1.2].

Satz 1.4.

Die Funktion $f : X \rightarrow \mathbb{R}$ sei stetig, und es gebe $x_0 \in X \subset \mathbb{R}^n$, so dass die Niveaumenge

$$N_f(x_0) = \{x \in X \mid f(x) \leq f(x_0)\}$$

kompakt ist. Dann besitzt das Problem 1.2 mindestens ein globales Minimum.

Beweis.

Es ist klar, dass Punkte, an denen f sein globales Minimum annimmt, in $N_f(x_0)$ liegen müssen. Da f stetig auf der kompakten Menge $N_f(x_0)$ ist, nimmt f sein globales Minimum in einem Punkt $x^* \in N_f(x_0)$ an. Dieser Punkt x^* ist auch die globale Minimalstelle von f auf X . \square

Im Folgenden bezeichne $\nabla f(x) = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}(x), \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n}(x) \right)^T \in \mathbb{R}^n$ den Gradienten von f in x .

Definition 1.5.

Seien $X \subseteq \mathbb{R}^n$ eine offene Menge und $f : X \rightarrow \mathbb{R}$ eine stetig differenzierbare Funktion.

Ein Punkt $x^* \in X$ heißt **stationärer Punkt** von f , wenn $\nabla f(x^*) = 0$ gilt.

2. Optimalitätskriterien**2.1. Bedingungen erster und zweiter Ordnung**

Wir behandeln unter geeigneten Differenzierbarkeitsannahmen notwendige und hinreichende Bedingungen für lokale Minimalstellen.

Satz 2.1. (Notwendige Optimalitätsbedingung erster Ordnung)

Seien $X \subseteq \mathbb{R}^n$ offen und $f : X \rightarrow \mathbb{R}$ stetig differenzierbar. Ist $x^* \in X$ eine lokale Minimalstelle von f auf X , so gilt $\nabla f(x^*) = 0$, d.h. x^* ist ein stationärer Punkt.

Beweis. (Analysis II)

Sei $x^* \in X$ eine lokale Minimalstelle von f , aber $\nabla f(x^*) \neq 0$. Dann existiert $d \in \mathbb{R}^n$ mit $\nabla f(x^*)^T d < 0$ (z.B. $d = -\nabla f(x^*)$). Da nach Voraussetzung f stetig differenzierbar ist, existiert die Richtungsableitung $f'(x^*; d)$ von f in x^* in Richtung d . Es gilt

$$f'(x^*; d) = \lim_{t \searrow 0} \frac{f(x^* + td) - f(x^*)}{t} = \nabla f(x^*)^T d < 0.$$

Folglich existiert ein $t_0 > 0$ mit $x^* + td \in X$ und $\frac{1}{t}(f(x^* + td) - f(x^*)) < 0$ für alle $t \in (0, t_0]$. Somit ist auch $f(x^* + td) < f(x^*)$ für alle $t \in (0, t_0]$, was einen Widerspruch zur Voraussetzung ergibt. \square

Bemerkung 2.2.

Die Bedingungen aus Satz 2.1 sind nicht hinreichend dafür, dass x^* eine lokale Minimalstelle ist.

Betrachte zum Beispiel die Funktion $f(x) = x_1^2 - x_2^2$ auf \mathbb{R}^2 und den Punkt $x^* = (0, 0)$, dann gilt $\nabla f(x_1, x_2) = (2x_1, -2x_2)^T$, also ist $x^* = (0, 0)$ ein stationärer Punkt von f , aber für beliebig kleines $\epsilon > 0$ ist $f(x_\epsilon) = -\epsilon^2 < 0 = f(x^*)$ mit $x_\epsilon = (0, \epsilon)$, d.h. in jeder Umgebung von x^* existiert ein Punkt mit kleinerem Funktionswert.

Da Satz 2.1 nur Ableitungen bis zur ersten Ordnung verwendet, gibt er eine notwendige Bedingung erster Ordnung an. \diamond

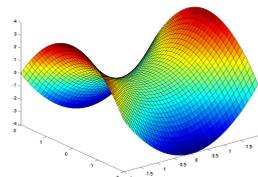


Fig. 1: Eine Funktion mit einem **Sattelpunkt**, d.h. einem kritischen Punkt, der kein Optimum ist.

Wir zitieren folgende Abschätzung aus der Spektraltheorie symmetrischer Matrizen:

Lemma 2.3.

Sei \mathcal{S}_n der Vektorraum der symmetrischen $(n \times n)$ -Matrizen. Für $A \in \mathcal{S}_n$ sei $\lambda(A)$ der kleinste Eigenwert von A . Dann gilt

$$|\lambda(A) - \lambda(B)| \leq \|A - B\|_2 \quad \text{für alle } A, B \in \mathcal{S}_n,$$

wobei $\|\cdot\|_2$ hier die **Spektralnorm** $\|A\|_2 = \max\{|\lambda| \mid \lambda \text{ ist Eigenwert von } A\}$ bezeichnet.

Vergleiche dazu das Kapitel zur Störepfindlichkeit bei Eigenwertaufgaben aus [6, Kapitel 11.4].

Mithilfe Lemma 2.3 folgt aus der Stetigkeit der Hessematrix $\nabla^2 f(x) = \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(x)\right) \in \mathbb{R}^{n \times n}$ von f : Ist $\nabla^2 f(x^*)$ positiv definit, dann ist $\nabla^2 f(x)$ positiv definit in einer Umgebung von x^* . Eine analoge Folgerung gilt für den Fall, dass $\nabla^2 f(x^*)$ negativ definit ist.

Satz 2.4. (Notwendige Optimalitätsbedingung zweiter Ordnung)

Seien $X \subseteq \mathbb{R}^n$ offen und $f : X \rightarrow \mathbb{R}$ zweimal stetig differenzierbar. Ist $x^* \in X$ eine lokale Minimalstelle von f auf X , so ist $\nabla f(x^*) = 0$ und $\nabla^2 f(x^*)$ ist positiv semidefinit.

Beweis. (Analysis II)

Die Bedingung $\nabla f(x^*) = 0$ folgt aus Satz 2.1. Sei x^* eine lokale Minimalstelle von f , jedoch $\nabla^2 f(x^*)$ nicht positiv semidefinit. Dann existiert ein $d \in \mathbb{R}^n$ mit $d^T \nabla^2 f(x^*) d < 0$.

Mit Hilfe des Satzes von TAYLOR ergibt sich

$$f(x^* + td) = f(x^*) + \underbrace{t \nabla f(x^*)^T}_{=0} d + \frac{1}{2} t^2 d^T \nabla^2 f(\xi_t) d$$

für kleines $t > 0$. Dabei ist $\xi_t = x^* + \vartheta_t td$ für $\vartheta_t \in (0, 1)$. Aus Lemma 2.3 und der Stetigkeit der zweiten Ableitung von f folgt die Existenz von $t_0 > 0$ mit $d^T \nabla^2 f(\xi_t) d < 0$ für alle $t \in (0, t_0]$, wegen $\nabla f(x^*) = 0$ also $f(x^* + td) < f(x^*)$ für alle $t \in (0, t_0]$, was einen Widerspruch zur Voraussetzung ergibt. \square

Bemerkung 2.5.

Die Bedingungen aus Satz 2.4 sind nicht hinreichend dafür, dass x^* eine lokale Minimalstelle ist.

Betrachte zum Beispiel die Funktion $f(x) = x_1^2 + x_2^3$ auf \mathbb{R}^2 und den Punkt $x^* = (0, 0)^T$, dann gelten

$$\nabla f(x^*) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \nabla^2 f(x^*) = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Da Satz 2.4 Ableitungen bis zur zweiten Ordnung verwendet, gibt es eine notwendige Bedingung zweiter Ordnung an. \diamond

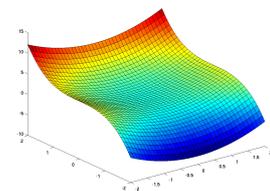


Fig. 2: Ein Sattelpunkt mit semidefiniter Hessematrix.

Nun kommen wir zu einer hinreichenden Optimalitätsbedingung.

Satz 2.6. (Hinreichende Optimalitätsbedingung zweiter Ordnung)

Seien $X \subseteq \mathbb{R}^n$ offen und $f : X \rightarrow \mathbb{R}$ zweimal stetig differenzierbar. Gilt $\nabla f(x^*) = 0$ und ist $\nabla^2 f(x^*)$ positiv definit, dann ist x^* eine strikte lokale Minimalstelle von f auf X .

Beweis. (Analysis II)

Aus der positiven Definitheit der Hessematrix folgt die Existenz eines $\mu > 0$ mit $d^T \nabla^2 f(x^*) d \geq \mu d^T d$ für alle $d \in \mathbb{R}^n$, wähle etwa μ als den kleinsten Eigenwert von $\nabla^2 f(x^*)$. Da x^* ein stationärer Punkt ist, gilt nach dem Satz von TAYLOR für alle $d \in \mathbb{R}^n$, die hinreichend nahe bei 0 aber $d \neq 0$ sind, dass

$$f(x^* + d) = f(x^*) + \underbrace{\nabla f(x^*)^T d}_{=0} + \frac{1}{2} d^T \nabla^2 f(\xi_d) d$$

mit $\xi_d = x^* + \vartheta_d d$ für $\vartheta_d \in (0, 1)$ erfüllt ist. Man erhält so mit der CAUCHY-SCHWARZschen Ungleichung

$$\begin{aligned} f(x^* + d) &= f(x^*) + \frac{1}{2} d^T \nabla^2 f(x^*) d + \frac{1}{2} d^T (\nabla^2 f(\xi_d) - \nabla^2 f(x^*)) d \\ &\geq f(x^*) + \frac{1}{2} (\mu - \|\nabla^2 f(\xi_d) - \nabla^2 f(x^*)\|_2) \|d\|_2^2. \end{aligned}$$

Da f zweimal stetig differenzierbar ist, gibt es ein $\delta = \delta(\mu) > 0$, so dass $\|\nabla^2 f(\xi_d) - \nabla^2 f(x^*)\|_2 \leq \mu/2$ gilt für alle $d \in \mathbb{R}^n$ mit $\|\xi_d - x^*\|_2 = \|\vartheta_d d\|_2 \leq \|d\|_2 < \delta$. Dann erhalten wir

$$f(x^* + d) \geq f(x^*) + \frac{\mu}{4} \|d\|_2^2 > f(x^*) \quad \text{für alle } d \neq 0 \text{ mit } \|d\|_2 < \delta,$$

das heißt, x^* ist eine strikte lokale Minimalstelle von f . □

Bemerkung 2.7.

Die Bedingungen aus Satz 2.6 sind nicht notwendig dafür, dass x^* eine lokale Minimalstelle ist.

Betrachte zum Beispiel die Funktion $f(x) = x_1^2 + x_2^4$ auf \mathbb{R}^2 und den Punkt $x^* = (0, 0)^T$, dann gelten

$$\nabla f(x^*) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \nabla^2 f(x^*) = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Da Satz 2.6 Ableitungen bis zur zweiten Ordnung verwendet, gibt er eine hinreichende Bedingung zweiter Ordnung an. ◇

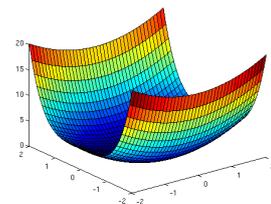


Fig. 3: Ein striktes lokales Minimum mit semidefiniter Hessematrix.

Satz 2.8. (Hinreichendes Kriterium zweiter Ordnung für einen Sattelpunkt)

Seien $X \subseteq \mathbb{R}^n$ offen und $f : X \rightarrow \mathbb{R}$ zweimal stetig differenzierbar.

Für $x^* \in X$ gelte $\nabla f(x^*) = 0$ und $\nabla^2 f(x^*)$ ist indefinit, so hat f in x kein lokales Optimum. x^* heißt **Sattelpunkt** von f auf X .

2.2. Konvexe Funktionen

Definition 2.9.

Eine Menge $X \subseteq \mathbb{R}^n$ heißt **konvex**, wenn für alle $x, y \in X$ und $\lambda \in (0, 1)$ auch $\lambda x + (1 - \lambda)y$ oder äquivalent $y + \lambda(x - y)$ in X liegt.

Seien $X \subseteq \mathbb{R}^n$ eine konvexe Menge und $f : X \rightarrow \mathbb{R}$ eine Funktion.

1. f heißt **strikt konvex** bzw. **konvex**, wenn für alle $x, y \in X$, $x \neq y$ und alle $\lambda \in (0, 1)$ gilt

$$f(\lambda x + (1 - \lambda)y) < \lambda f(x) + (1 - \lambda)f(y) \quad \text{bzw.} \quad f(\lambda x + (1 - \lambda)y) \leq \lambda f(x) + (1 - \lambda)f(y).$$

2. f heißt **gleichmäßig konvex** mit **Modul** $\mu > 0$, falls für alle $x, y \in X$, $\lambda \in (0, 1)$ gilt:

$$f(\lambda x + (1 - \lambda)y) + \mu \lambda(1 - \lambda) \|x - y\|^2 \leq \lambda f(x) + (1 - \lambda)f(y).$$

Bemerkung 2.10.

Aus der Definition folgt, dass jede gleichmäßig konvexe Funktion auch strikt konvex ist und jede strikt konvexe Funktion konvex ist. Die Umkehrungen gelten im Allgemeinen nicht. \diamond

Ist f eine differenzierbare Funktion, so können wir Konvexität wie folgt charakterisieren; vergleiche dazu [8, Satz 6.3].

Satz 2.11.

Sei $f : X \rightarrow \mathbb{R}$ stetig differenzierbar und $X \subseteq \mathbb{R}^n$ offen und konvex. Dann gelten:

1. f ist genau dann konvex, wenn für alle $x, y \in X$ mit $x \neq y$ gilt:

$$\nabla f(x)^T(y - x) \leq f(y) - f(x) \quad (2.1)$$

2. f ist strikt konvex genau dann, wenn für alle $x, y \in X$ mit $x \neq y$

$$\nabla f(x)^T(y - x) < f(y) - f(x)$$

erfüllt ist.

3. Die Funktion f ist gleichmäßig konvex genau dann, wenn es $\mu > 0$ gibt mit

$$\nabla f(x)^T(y - x) + \mu\|y - x\|^2 \leq f(y) - f(x) \quad \text{für alle } x, y \in X$$

Beweis.

1.

„ \Rightarrow “ Sei f konvex für beliebige $x, y \in X$. Für alle $\lambda \in (0, 1]$ bekommen wir

$$\frac{1}{\lambda}(f(x + \lambda(y - x)) - f(x)) \leq \frac{1}{\lambda}((1 - \lambda)f(x) + \lambda f(y) - f(x)) = f(y) - f(x)$$

Bilden wir den Grenzwert $\lambda \rightarrow 0^+$, so gilt

$$\nabla f(x)^T(y - x) = \lim_{\lambda \rightarrow 0^+} \frac{1}{\lambda}(f(x + \lambda(y - x)) - f(x)) \leq f(y) - f(x) \quad \text{also} \quad (2.1)$$

„ \Leftarrow “ Sei (2.1) erfüllt. Wir wählen $x, y \in X$ und $\lambda \in [0, 1]$ beliebig und definieren $x_\lambda = (1 - \lambda)x + \lambda y$. Um $(1 - \lambda)f(x) + \lambda f(y) - f(x_\lambda) \geq 0$ zu zeigen, betrachten wir mit (2.1)

$$\begin{aligned} (1 - \lambda)f(x) + \lambda f(y) - f(x_\lambda) &= (1 - \lambda)(f(x) - f(x_\lambda)) + \lambda(f(y) - f(x_\lambda)) \\ &\stackrel{(2.1)}{\geq} (1 - \lambda)\nabla f(x_\lambda)^T(x - x_\lambda) + \lambda\nabla f(x_\lambda)^T(y - x_\lambda) \\ &= \nabla f(x_\lambda)^T((1 - \lambda)x + \lambda y - x_\lambda) = 0 \end{aligned} \quad (2.2)$$

was zu zeigen war.

2.

„ \Rightarrow “ Sei f streng konvex. Wir wählen $x, y \in X$ mit $x \neq y$ und setzen $z := \frac{1}{2}(x + y)$. Dann erhalten wir $f(z) < \frac{1}{2}(f(x) + f(y))$, also $f(z) - f(x) < \frac{1}{2}(f(y) - f(x))$. Nun verwenden wir 1. Es gilt daher

$$\nabla f(x)^T(y - x) = 2\nabla f(x)^T(z - x) \leq 2(f(z) - f(x)) < f(y) - f(x),$$

was zu zeigen war.

„ \Leftarrow “ Diese Aussage bekommen wir sofort aus der Abschätzung (2.2), wenn wir $>$ statt \geq verwenden.

3.

„ \Rightarrow “ Wir betrachten wie in Teil 1. den Differenzenquotienten

$$\begin{aligned}\nabla f(x)^T(y-x) &= \lim_{\lambda \rightarrow 0^+} \frac{f(x + \lambda(y-x)) - f(x)}{\lambda} \\ &\leq \lim_{\lambda \rightarrow 0^+} \frac{1}{\lambda} ((1-\lambda)f(x) + \lambda f(y) - \mu\lambda(1-\lambda)\|y-x\|^2 - f(x)) \\ &= f(y) - f(x) - \mu\|y-x\|^2\end{aligned}$$

„ \Leftarrow “ Es gelten

$$\|x - x_\lambda\| = \|x - (1-\lambda)x - \lambda y\| = \lambda\|x - y\| \quad \text{und} \quad \|y - x_\lambda\| = \|y - (1-\lambda)x - \lambda y\| = (1-\lambda)\|x - y\|$$

Daher erhalten wir (vgl. das Vorgehen bei der Abschätzung (2.1))

$$\begin{aligned}(1-\lambda)f(x) + f(y) - f(x_\lambda) &= (1-\lambda)(f(x) - f(x_\lambda)) + \lambda(f(y) - f(x_\lambda)) \\ &\geq (1-\lambda)(\nabla f(x_\lambda)^T(x - x_\lambda) + \mu\|x - x_\lambda\|^2) + \lambda(\nabla f(x_\lambda)^T(y - x_\lambda) \\ &\quad + \mu\|y - x_\lambda\|^2) \\ &= \nabla f(x_\lambda)^T((1-\lambda)x + \lambda y - x_\lambda) + \mu((1-\lambda)\|x - x_\lambda\|^2 + \lambda\|y - x_\lambda\|^2) \\ &= \mu((1-\lambda)\lambda^2 + \lambda(1-\lambda)^2)\|x - y\|^2 \\ &= \mu(1-\lambda)(\lambda^2 + \lambda(1-\lambda))\|x - y\|^2 = \mu(1-\lambda)\lambda\|y - x\|^2,\end{aligned}$$

was zu zeigen war. □

Ist das Zielfunktional f zweimal stetig differenzierbar, so können wir die Konvexität von f mittels der Hessematrix von f charakterisieren. Ohne Beweis geben wir dazu folgende Charakterisierung zweimal stetig differenzierbarer Funktionen an; vergleiche dazu [8, Satz 6.4].

Satz 2.12. (Charakterisierung konvexer Funktionen)Seien $X \subseteq \mathbb{R}^n$ offen und konvex sowie $f : X \rightarrow \mathbb{R}$ zweimal stetig differenzierbar. Dann gelten:

1. f ist konvex auf $X \Leftrightarrow \nabla^2 f(x)$ ist für alle $x \in X$ positiv semidefinit.
2. Ist $\nabla^2 f(x)$ für alle $x \in X$ positiv definit, so ist f strikt konvex auf X .
3. f ist genau dann gleichmäßig konvex auf X , wenn $\nabla^2 f(x)$ gleichmäßig positiv definit ist, d.h. wenn es ein $\mu > 0$ gibt, so dass für alle $x \in X$ und alle $d \in \mathbb{R}^n$ gilt: $d^T \nabla^2 f(x) d \geq \mu \|d\|^2$.

Beweis.

1.

„ \Rightarrow “ Sei also f konvex und $x \in X$, $d \in \mathbb{R}^n$ beliebig. Da X offen ist, gibt es $\tau = \tau(x, d) > 0$ mit $x + td \in X$ für alle $t \in [0, \tau]$. Für $0 < t \leq \tau$ folgt aus Satz 2.11 mit (2.1)

$$t\nabla f(x)^T d = \nabla f(x)^T(td) = \nabla f(x)^T(x + td - x) \leq f(x + td) - f(x).$$

TAYLOREntwicklung ergibt daher

$$0 \leq f(x + td) - f(x) - t\nabla f(x)^T d = \frac{t^2}{2} d^T \nabla^2 f(x) d + o(t^2),$$

wobei $r(t) = o(t^2)$ die in der Landau-Symbol-Formalierung übliche Notation ist, das heißt, es gilt

$$\frac{r(t)}{t^2} \rightarrow 0 \quad \text{für} \quad t \searrow 0.$$

Wir erhalten die Behauptung nach Multiplikation mit $\frac{2}{t^2}$ und dem Grenzübergang $t \rightarrow 0^+$.

„ \Leftarrow “ Seien $x, y \in X$ beliebig. Mit TAYLOREntwicklung folgt für ein $\vartheta \in [0, 1]$

$$\begin{aligned} f(y) - f(x) &= \nabla f(x)^T(y - x) + \frac{1}{2}(y - x)^T \nabla^2 f(x + \vartheta(y - x))(y - x) \\ &\geq \nabla f(x)^T(y - x). \end{aligned} \quad (2.3)$$

Aus Satz 2.11 mit (2.1) folgt, dass f konvex ist.

2. Wir erhalten die Aussagen aus (2.3), wenn wir $x, y \in X$ mit $x \neq y$ beliebig wählen und \geq durch $>$ ersetzen.

3.

„ \Rightarrow “ Wie in Teil 1. erhalten wir für beliebige $x \in X$ und $d \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$ ein $\tau = \tau(x, d) > 0$, so dass

$$0 \leq f(x + td) - f(x) - t\nabla f(x)^T d - \mu \|td\|^2 = \frac{t^2}{2} d^T \nabla^2 f(x) d - t^2 \mu \|d\|^2 + o(t^2)$$

für alle $0 < t \leq \tau$. Nach Multiplikation mit $\frac{2}{t^2}$ und Grenzübergang $t \rightarrow 0^+$ folgt

$$d^T \nabla^2 f(x) d \geq \mu \|d\|^2.$$

„ \Leftarrow “ Seien $x \in X$, $d \in \mathbb{R}^n$ beliebig gewählt. Nach Satz von TAYLOR existiert ein $\vartheta \in [0, 1]$ mit

$$\begin{aligned} f(y) - f(x) &= \nabla f(x)^T(y - x) + \frac{1}{2}(y - x)^T \nabla^2 f(x + \vartheta(y - x))(y - x) \\ &\geq \nabla f(x)^T(y - x) + \frac{\mu}{2} \|y - x\|^2 \end{aligned}$$

da $\nabla^2 f$ gleichmäßig positiv definit ist. Daraus folgt, dass f gleichmäßig konvex ist. □

Bemerkung 2.13.

- Die 2. Aussage von Satz 2.12 lässt sich nicht ohne Weiteres umkehren: Die Funktion $f(x) = x^4$ mit $X = \mathbb{R}$ beispielsweise ist strikt konvex, aber es gilt $f''(0) = 0$.
- $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ sei eine quadratische Funktion, d.h. von der Gestalt

$$f(x) = \frac{1}{2} x^T Q x + c^T x + \gamma$$

mit symmetrischer Matrix $Q \in \mathcal{S}_n$, Vektor $c \in \mathbb{R}^n$ und Skalar $\gamma \in \mathbb{R}$. Dann gelten:

- f ist genau dann konvex, wenn Q positiv semidefinit ist.
- f ist strikt konvex $\Leftrightarrow f$ ist gleichmäßig konvex $\Leftrightarrow Q$ ist positiv definit. ◇

Wir kommen nun zum Optimierungsproblem zurück; vergleiche dazu [8, Satz 6.5]

Satz 2.14. (Existenz und Eindeutigkeit für konvexe Optimierungsaufgaben)

Seien $f: X \rightarrow \mathbb{R}$ konvex, stetig differenzierbar und $X \subseteq \mathbb{R}^n$ konvex. Wir betrachten das Optimierungsproblem

$$\min f(x) \quad \text{u.d.N.} \quad x \in X \quad (2.4)$$

Dann gelten:

- Jedes lokale Minimum von f ist ein globales Minimum.
- Die Lösungsmenge von (2.4) ist konvex (gegebenenfalls leer).
- Ist f strikt konvex auf X , so besitzt (2.4) höchstens eine Lösung. Diese ist - im Falle der Existenz - nach Teil 1. das strikte globale Minimum von f auf X .
- Ist X offen und $x^* \in X$ ein stationärer Punkt von f , so ist x^* ein globales Minimum von f auf X .

Beweis.

1. Sei x^* eine lokale Minimalstelle von f auf X . Angenommen, es existiert ein $x \in X$ mit $f(x) < f(x^*)$. Dann folgt für alle $\lambda \in [0, 1]$

$$\begin{aligned} f(x^* + \lambda(x - x^*)) &\leq (1 - \lambda)f(x^*) + \lambda f(x) \\ &< (1 - \lambda)f(x^*) + \lambda f(x^*) = f(x^*) \end{aligned}$$

d.h., aber x^* ist keine lokale Minimalstelle, was ein Widerspruch ist.

2. Seien x^1, x^2 Lösungen von (2.4), also $f(x^1) = f(x^2) = \min_{x \in X} f(x)$. Für $\lambda \in (0, 1)$ gelten dann

$$\lambda x^1 + (1 - \lambda)x^2 \in X \quad \text{und} \quad f(\lambda x^1 + (1 - \lambda)x^2) \leq \lambda f(x^1) + (1 - \lambda)f(x^2) = \min_{x \in X} f(x).$$

Also nimmt f auch an $\lambda x^1 + (1 - \lambda)x^2$ sein Minimum an.

3. Angenommen, (2.4) hat zwei verschiedene Lösungen x^1, x^2 mit $f(x^1) = f(x^2) = \min_{x \in X} f(x)$. Für $\lambda \in (0, 1)$ gelten dann

$$\lambda x^1 + (1 - \lambda)x^2 \in X \quad \text{und} \quad f(\lambda x^1 + (1 - \lambda)x^2) < \lambda f(x^1) + (1 - \lambda)f(x^2) = \min_{x \in X} f(x),$$

was einen Widerspruch ergibt.

4. Für alle $x \in X$ folgt aus Satz 2.11 mit (2.1)

$$f(x) - f(x^*) \geq \nabla f(x^*)^T (x - x^*) = 0$$

Somit ist x^* eine lokale Minimalstelle von f auf X . □

Bemerkung 2.15.

- Das Problem (2.4) muss selbst für strikt konvexes f keine Lösung besitzen. Betrachte dazu zum Beispiel $f(x) = \exp(x)$ auf $X = \mathbb{R}$.
- Aus der 4. Aussage von Satz 2.14 folgt, dass $\nabla f(x^*) = 0$ auch hinreichend dafür ist, dass x^* eine globale Minimalstelle ist. ◇

3. Abstiegsverfahren und Schrittweitenstrategien

Wir betrachten ein Abstiegsverfahren zur Lösung des unrestringierten Optimierungsproblems

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x)$$

mit stetig differenzierbarer Funktion $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$. Die zentrale Idee der Verfahren in diesem Abschnitt ist wie folgt:

- Ist man in einem Punkt $x \in \mathbb{R}^n$, so sucht man eine Richtung $d \in \mathbb{R}^n$ aus, längs welcher der Funktionswert fällt (**Abstiegsverfahren**).
- Entlang dieser Richtung d geht man so lange, bis man den Funktionswert von f hinreichend verkleinert hat (**Schrittweitenstrategie**).

Diese Schritte wollen wir formalisieren.

Definition 3.1.

Seien $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ und $x \in \mathbb{R}^n$. Ein Vektor $d \in \mathbb{R}^n$ heißt **Abstiegsrichtung** von f im Punkt x , wenn es ein $t_0 > 0$ gibt mit

$$f(x + td) < f(x) \quad \text{für alle} \quad t \in (0, t_0].$$

Bemerkung 3.2. (Hinreichende Abstiegsbedingung)

Ist f stetig differenzierbar, dann ist die Bedingung

$$\nabla f(x)^T d < 0 \quad (3.1)$$

hinreichend dafür, dass $d \in \mathbb{R}^n$ eine Abstiegsrichtung von f in x ist.

Um dies einzusehen, definieren wir $\varphi(t) = f(x + td)$. Aus $f \in \mathcal{C}^1(\mathbb{R}^n, \mathbb{R})$ folgt dann

$$\varphi(t) = \varphi(0) + t\varphi'(0) + r(t) \quad \text{mit} \quad \frac{1}{t}r(t) \rightarrow 0 \quad \text{für} \quad t \searrow 0,$$

d.h. $r(t) = o(t)$. Es gelten $\varphi(0) = f(x)$ und $\varphi'(0) = \nabla f(x)^T d < 0$. Also existiert ein $t_0 > 0$ mit

$$\frac{\varphi(t) - \varphi(0)}{t} = \nabla f(x)^T d + \frac{r(t)}{t} \quad \implies \quad \forall t \in (0, t_0]: \quad \frac{\varphi(t) - \varphi(0)}{t} < 0,$$

d.h. $f(x + td) < f(x)$ und somit ist d eine Abstiegsrichtung von f in x . \diamond

Bemerkung 3.3.

- Die Bedingung (3.1) bedeutet, dass der Winkel φ zwischen d und dem negativen Gradienten $-\nabla f(x)$ von f in x weniger als $\frac{\pi}{2}$ beziehungsweise 90° beträgt. Betrachte dazu:

$$0 > \nabla f(x)^T d \quad \implies \quad 0 < -\nabla f(x)^T d = \cos(\varphi) \underbrace{\|-\nabla f(x)\| \|d\|}_{>0}$$

Es folgt $\cos(\varphi) > 0$ und damit $\varphi \in [0, \frac{\pi}{2})$.

- Das Kriterium (3.1) ist nicht notwendig. Ist x beispielsweise eine strikte lokale Maximalstelle, so sind alle $d \in \mathbb{R}^n$ Abstiegsrichtungen von f in x , aber (3.1) ist nicht für alle diese Richtungen erfüllt. \diamond

Beispiel 3.4.

- $d = -\nabla f(x)$ ist stets eine Abstiegsrichtung, sofern x kein stationärer Punkt ist, denn dann gilt $\nabla f(x)^T d = -\|\nabla f(x)\|^2 < 0$. $-\nabla f(x)$ ist sogar die Richtung des steilsten Abstiegs: Unter allen Richtungen $d \in \mathbb{R}^n$ mit $\|d\| = 1$ ist der normierte Gradient von f in x Minimalstelle von $\min \nabla f(x)^T d$ u.d.N. $\|d\| = 1$. Wählt man $d = -\nabla f(x)$, so bezeichnet man das Abstiegsverfahren als **Gradientenverfahren**.
- Ist $M \in \mathcal{S}_n$ positiv definit, dann ist $d = -M\nabla f(x)$ im Fall $\nabla f(x) \neq 0$ eine Abstiegsrichtung, denn es gilt $\nabla f(x)^T d = -\nabla f(x)^T M \nabla f(x) < 0$. Man bezeichnet die Abstiegsverfahren dann als **gradientenähnliche Verfahren**. \diamond

3.1. Abstiegsverfahren

Wir wollen in algorithmischer Form ein allgemeines Abstiegsverfahren angeben. Hier werden iterativ Punkte $x^k \in \mathbb{R}^n$ erzeugt mit $f(x^{k+1}) < f(x^k)$, bis eine Abbruchbedingung beispielsweise von der Form $\|x^k - x^*\| < \epsilon$ für ein $\epsilon > 0$ erfüllt ist.

In theoretischen Konvergenzuntersuchungen betrachten wir kein Konvergenzkriterium. Vielmehr nehmen wir an, dass eine unendliche Folge $(x^k)_{k \in \mathbb{N}}$ erzeugt wird, und untersuchen diese Folge auf Grenzwerte bzw. Häufungspunkte.

Satz 3.6. (Hinreichendes Konvergenzkriterium des Allgemeinen Abstiegsverfahrens)

Seien $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ stetig differenzierbar und $(x^k)_{k \in \mathbb{N}}$ eine durch Algorithmus 3.5 erzeugte Folge. Weiter mögen gelten:

Algorithmus 3.5 (Allgemeines Abstiegsverfahren)**Eingabe:** Startpunkt $x_0 \in \mathbb{R}^n$.

- 1: Setze $k = 0$.
- 2: **while** Konvergenzkriterium nicht erfüllt **do**
- 3: Bestimme Abstiegsrichtung d^k von f in x^k .
- 4: Bestimme eine Schrittweite $t_k > 0$ mit $f(x^k + t_k d^k) < f(x^k)$.
- 5: Setze $x^{k+1} = x^k + t_k d^k$ und $k = k + 1$.
- 6: **end while**

1. Es gibt eine Konstante $\theta_1 > 0$, so dass die folgende **Winkelbedingung** für alle $k \in \mathbb{N}$ erfüllt ist:

$$-\nabla f(x^k)^\top d^k \geq \theta_1 \|\nabla f(x^k)\| \|d^k\|$$

2. Es gibt eine von $(x^k)_{k \in \mathbb{N}}$ und $(d^k)_{k \in \mathbb{N}}$ unabhängige Konstante $\theta_2 > 0$ mit der folgenden Bedingung des **hinreichenden Abstiegs**:

$$f(x^k + t_k d^k) \leq f(x^k) - \theta_2 \left(\frac{\nabla f(x^k)^\top d^k}{\|d^k\|} \right)^2 \quad \text{mit } t_k > 0 \text{ für alle } k \in \mathbb{N}.$$

Dann ist jeder Häufungspunkt der Folge $(x^k)_{k \in \mathbb{N}}$ ein stationärer Punkt von f .

Beweis.

Sei x^* ein Häufungspunkt der durch Algorithmus 3.5 erzeugten Folge $(x^k)_{k \in \mathbb{N}}$. Dann gibt es eine Teilfolge $(x^{k_\nu})_{\nu \in \mathbb{N}}$ mit $x^{k_\nu} \rightarrow x^*$ für $\nu \rightarrow \infty$. Nach Konstruktion ist $(f(x^{k_\nu}))_{\nu \in \mathbb{N}}$ monoton fallend, also folgt aus $f(x^{k_\nu}) \rightarrow f(x^*)$ für $\nu \rightarrow \infty$, dass auch die gesamte Folge der Funktionswerte $(f(x^k))_{k \in \mathbb{N}}$ gegen $f(x^*)$ konvergiert.

Weiter liefern die beiden Bedingungen des Satzes die Abschätzung

$$0 \stackrel{k \rightarrow \infty}{\leftarrow} f(x^{k+1}) - f(x^k) \leq -\theta_2 \left(\frac{\nabla f(x^k)^\top d^k}{\|d^k\|} \right)^2 \leq -\theta_1^2 \theta_2 \|\nabla f(x^k)\|^2 \leq 0,$$

also ist $\lim_{k \rightarrow \infty} \|\nabla f(x^k)\| = 0$. Damit ist jeder Häufungspunkt von f auch ein stationärer Punkt von f . \square

Bemerkung 3.7.

1. Im Allgemeinen gibt es keine Garantie, dass ein (eindeutiger) Häufungspunkt existiert.
2. Bezeichne η_k den Winkel zwischen d^k und $-\nabla f(x^k)$, dann bedeutet die Winkelbedingung aus Satz 3.6, dass

$$\cos(\eta_k) = \frac{-\nabla f(x^k)^\top d^k}{\|\nabla f(x^k)\| \|d^k\|}$$

gleichmäßig größer als 0 ist. Dies impliziert, dass d^k und $-\nabla f(x)$ nur in einem Winkel zwischen 0 und weniger als $\frac{\pi}{2}$ zueinander stehen. Ein wichtiges Beispiel einer Abstiegsrichtung, für welche diese Bedingung erfüllt ist, ist die Wahl $d^k = -\nabla f(x^k)$. \diamond

3.2. Schrittweitenstrategien

Das Allgemeine Abstiegsverfahren (Algorithmus 3.5) besitzt in der Wahl der Abstiegsrichtung d^k und der Schrittweite $t_k > 0$ große Freiheitsgrade. Die nahe liegende Minimierungsregel $t_k = t_k^{\min}$ für die zu wählende Schrittweite mit

$$f(x^k + t_k^{\min} d^k) = \min_{t \geq 0} f(x^k + t d^k)$$

ist unter der Annahme, dass die Niveaumenge $\mathcal{L}(x^0) = \{x \in \mathbb{R}^n \mid f(x) \leq f(x^0)\}$ kompakt ist und $\nabla f(x)$ Lipschitz-stetig auf $\mathcal{L}(x^0)$ ist, wohldefiniert. Allerdings ist diese Regel im Allgemeinen nicht praktikabel:

In jedem Schritt müsste dazu schließlich ein eindimensionales Optimierungsproblem exakt gelöst werden. Wir betrachten im Folgenden **Schrittweitenstrategien**, für welche die zugehörige Folge $(x^k)_{k \in \mathbb{N}}$ gegen x^* konvergiert.

3.2.1. Die Armijo-Regel

Sei ein $\alpha \in [0, 1]$ fest vorgegeben. Die **Armijo-Regel** ist eine Bedingung, die einen hinreichenden Abstieg sichert, und lautet

$$f(x + td) \leq f(x) + \alpha t \nabla f(x)^T d. \quad (3.2)$$

Wegen der stetigen Differenzierbarkeit von f und der Eigenschaft $\nabla f(x)^T d < 0$ ist die Existenz eines $t_0 > 0$ gesichert, so dass für alle $t \in (0, t_0]$ die Bedingung (3.2) erfüllt ist; siehe [8, Lemma 7.5].

Lemma 3.8.

Seien $f : U \rightarrow \mathbb{R}$ stetig differenzierbar auf der offenen Menge $U \subset \mathbb{R}^n$, $x \in U$, $\alpha \in (0, 1)$ und $d \in \mathbb{R}^n$ eine Richtung mit $\nabla f(x)^T d < 0$. Dann existiert ein $\bar{t} > 0$ mit

$$f(x + td) \leq f(x) + \alpha t \nabla f(x)^T d \quad \text{für alle } t \in [0, \bar{t}] \quad (3.3)$$

Beweis.

Für $t = 0$ ist (3.3) offensichtlich erfüllt. Sei nun $t > 0$ hinreichend klein, so dass $x + td \in U$ gilt. Dann erhalten wir

$$\frac{1}{t}(f(x + td) - f(x)) - \alpha \nabla f(x)^T d \xrightarrow{t \rightarrow 0^+} \nabla f(x)^T d (1 - \alpha) < 0,$$

wobei wir die Voraussetzungen $\nabla f(x)^T d < 0$ und $\alpha \in (0, 1)$ genutzt haben. Wir können also \bar{t} so klein wählen, dass

$$\frac{1}{t}(f(x + td) - f(x)) - \alpha \nabla f(x)^T d \leq 0$$

für alle $t \in (0, \bar{t}]$ gilt. Dieses \bar{t} erfüllt (3.3). Zusammenfassend gilt also (3.3) für alle $t \in [0, \bar{t}]$. \square

Wir visualisieren die Armijo-Regel (3.2): Die durchgezogene Linie repräsentiert den Graphen der 1D-Abbildung $f_1 : t \mapsto f(x + td)$ für $t \geq 0$ während die gestrichelte Gerade die affin lineare Funktion $f_2 : t \mapsto f(x) + \alpha t \nabla f(x)^T d$ darstellt.

Da d eine Abstiegsrichtung ist, ist die Existenz von $b > 0$ gesichert, so dass $f_1(t) \leq f_2(t)$ für alle $t \in [a, b]$ erfüllt ist.

Zufällig ist die Armijo-Bedingung auch für alle $t \in [c, d]$ erfüllt (dies wäre beispielsweise bei einer strikt konvexen Funktion nicht der Fall).

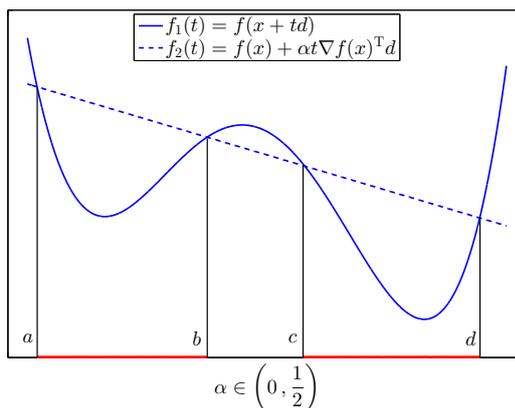


Fig. 4: Die Armijo-Regel.

Zur tatsächlichen Berechnung einer geeigneten **Schrittweite** t überprüft man (3.2) sequenziell zum Beispiel für

$$t = \beta^l, \quad l = 0, 1, 2, \dots \quad (3.4)$$

mit einem fest vorgegebenen $\beta \in (0, 1)$, etwa $\beta = 1/2$. Bei erstmaliger Gültigkeit von (3.2) bricht man ab.

Bemerkung 3.9.

1. Die Variante (3.4) wird *Backtracking*-Strategie genannt.
2. Weitere Strategien basieren auf Polynommodellen, die $\varphi(t) = f(x + td)$ durch ein *quadratisches* oder *kubisches Modell* ersetzen und dann dieses Modell minimieren.

◇

Im Folgenden verallgemeinern wir die Wahl der Schrittweite: Ist (3.2) für ein t_c nicht erfüllt, dann wird ein $t_+ < t_c$ so konstruiert, dass $t_+ \in [\nu_0 t_c, \nu^0 t_c]$ gilt für gewisse Parameter $0 < \nu_0 \leq \nu^0 < 1$.

Algorithmus 3.10 (Armijo-Schrittweitenalgorithmus)

Eingabe: Abstiegsrichtung d , Punkt x , Parameter $\alpha \in (0, 1)$, $0 < \nu_0 \leq \nu^0 < 1$.

- 1: Setze $l = 0$ und $t^{(0)} = 1$.
- 2: **while** Armijo-Bedingung (3.2) nicht erfüllt **do**
- 3: Bestimme $t^{(l+1)} \in [\nu_0 t^{(l)}, \nu^0 t^{(l)}]$ und setze $l = l + 1$.
- 4: **end while**

Im Weiteren behandeln wir **gradientenähnliche Richtungen** d.h. $d = -M\nabla f(x)$ mit positiv definitem $M \in \mathcal{S}_n$ für die Armijo Schrittweitenstrategie. Bei gradientenähnlichen Verfahren lässt sich die Anzahl der Iterationen von Algorithmus 3.10 abschätzen.

Lemma 3.11. (Endliche Terminierungsbedingung des Armijo-Schrittweitenalgorithmus)

Seien $f \in \mathcal{C}^1(\mathbb{R}^n, \mathbb{R})$, ∇f Lipschitz-stetig zur Konstante L , $\alpha \in (0, 1)$, $x \in \mathbb{R}^n$ mit $\nabla f(x) \neq 0$ und $M \in \mathcal{S}_n$ positiv definit. Bezeichne λ_s den kleinsten und λ_g den größten Eigenwert von M^{-1} und $\kappa_2(M^{-1}) = \|M^{-1}\|_2 \|M\|_2 = \frac{\lambda_g}{\lambda_s}$ die spektrale Konditionszahl von M^{-1} . Dann ist (3.2) für alle $0 < t \leq 2\lambda_s(1 - \alpha)(L\kappa_2(M^{-1}))^{-1}$ erfüllt.

Beweis.

Es gilt $f(x + td) - f(x) = t \int_0^1 \nabla f(x + \tau td)^T d \, d\tau$. Wir erhalten daraus

$$f(x + td) = f(x) + t \nabla f(x)^T d + t \int_0^1 (\nabla f(x + \tau td) - \nabla f(x))^T d \, d\tau.$$

Aus der Lipschitz-Stetigkeit des Gradienten von f folgt

$$f(x + td) \leq f(x) + t \nabla f(x)^T d + \frac{Lt^2}{2} \|d\|^2.$$

Mit $\lambda_s^2 \|y\|^2 \leq y^T (M^{-1})^2 y$ für alle $y \in \mathbb{R}^n$ erhalten wir bei der Wahl von $y = Mz$ die Ungleichung

$$z^T M^2 z \leq \lambda_s^{-2} \|z\|^2 \quad \text{für alle } z \in \mathbb{R}^n. \quad (3.5)$$

Ferner impliziert $y^T M^{-1} y \leq \lambda_g \|y\|^2$ für alle $y \in \mathbb{R}^n$, dass wir mit $y = M^{1/2} z$ die Ungleichung

$$\|z\|^2 \leq \lambda_g z^T M z \quad \text{für alle } z \in \mathbb{R}^n \quad (3.6)$$

erhalten. Wegen (3.5) und (3.6) können wir $\|d\|^2$ abschätzen via

$$\begin{aligned} \|d\|^2 &= \|M\nabla f(x)\|^2 = \nabla f(x)^T M^2 \nabla f(x) \leq \lambda_s^{-2} \|\nabla f(x)\|^2 \\ &\leq \lambda_g \lambda_s^{-2} \nabla f(x)^T M \nabla f(x) = -\kappa_2(M^{-1}) \lambda_s^{-1} \nabla f(x)^T d. \end{aligned}$$

Einsetzen ergibt

$$f(x + td) \leq f(x) + t \left(1 - \frac{\kappa_2(M^{-1}) Lt}{\lambda_s} \frac{Lt}{2} \right) \nabla f(x)^T d.$$

Da $\nabla f(x)^T d < 0$ gilt, ist die Armijo-Bedingung (3.2) also erfüllt, falls $\alpha \leq (1 - \kappa_2(M^{-1})Lt)/(2\lambda_s)$ erfüllt ist; denn dann folgt

$$f(x + td) \leq f(x) + \alpha t \nabla f(x)^T d \leq f(x) + t \left(1 - \frac{\kappa_2(M^{-1})Lt}{\lambda_s} \right) \nabla f(x)^T d.$$

Daher bekommen wir die Restriktion $t \leq 2\lambda_s(1 - \alpha)(L\kappa_2(M^{-1}))^{-1}$ für die Schrittweite. \square

Lemma 3.12. (Endliche Terminierung & maximale Iterationszahl für gradientenähnliche Richtungen)

Seien $f \in \mathcal{C}^1(\mathbb{R}^n, \mathbb{R})$, ∇f Lipschitz-stetig zur Konstante L , $\alpha \in (0, 1)$, $(x^k)_{k \in \mathbb{N}} \subseteq \mathbb{R}^n$ eine durch das Allgemeine Abstiegsverfahren 3.5 mit Armijo-Schrittweitenwahl 3.10 generierte Iterationsfolge. Die Folge $(M^k)_{k \in \mathbb{N}} \subseteq \mathcal{S}_n$ der zu den Abstiegsrichtungen $d^k = -M^k \nabla f(x^k)$ gehörigen, positiv definiten Matrizen erfülle $\lambda_0 \leq \lambda_s^k \leq \lambda_g^k \leq \lambda^0$ für geeignete $0 < \lambda_0 \leq \lambda^0$. Dann gelten:

1. Jede Schrittweite t_k genügt der Abschätzung $t_k \geq \tilde{t} = 2\nu_0\lambda_0(1 - \alpha)/(L\tilde{\kappa}_2)$ mit $\tilde{\kappa}_2 = \lambda^0/\lambda_0$.
2. Jede Schrittweitensuche terminiert nach höchstens $\log(2\lambda_0(1 - \alpha)/(L\tilde{\kappa}_2))/\log \nu^0$ Iterationen für jedes $k \in \mathbb{N}$.

Beweis.

1. Mit $\lambda_s^k \geq \lambda_0 > 0$ und $\kappa_2^k = \kappa_2((M^k)^{-1}) = \lambda_g^k/\lambda_s^k \leq \lambda^0/\lambda_0 = \tilde{\kappa}_2$ folgt aus Lemma 3.11:

$$\forall k \in \mathbb{N} : \frac{2\lambda_s^k(1 - \alpha)}{L\kappa_2^k} \geq \frac{2\lambda_0(1 - \alpha)}{L\tilde{\kappa}_2} > 0 \quad \implies \quad \forall k \in \mathbb{N} : t_k \geq \tilde{t}.$$

2. Wegen $t^{(0)} = 1$ und $t^{(k+1)} \leq \nu^0 t^{(k)}$ wird eine zulässige Schrittweite $t^{(k)}$ spätestens nach m Schritten gefunden mit

$$\begin{aligned} t^{(m)} &\leq \nu^0 t^{(m-1)} \leq (\nu^0)^m t^{(0)} = (\nu^0)^m \leq \frac{2\lambda_0(1 - \alpha)}{L\tilde{\kappa}_2} \\ \implies m &= \log_{\nu^0} \left(\frac{2\lambda_0(1 - \alpha)}{L\tilde{\kappa}_2} \right) = \frac{1}{\log \nu^0} \log \left(\frac{2\lambda_0(1 - \alpha)}{L\tilde{\kappa}_2} \right). \end{aligned}$$

\square

Satz 3.13. (Hinreichendes Konvergenzkriterium des Abstiegsverfahrens mit Armijo-Schrittweiten)

Seien $f \in \mathcal{C}^1(\mathbb{R}^n, \mathbb{R})$, ∇f Lipschitz-stetig zur Konstante L , $\alpha \in (0, 1)$, $(x^k)_{k \in \mathbb{N}} \subseteq \mathbb{R}^n$ eine durch das Allgemeine Abstiegsverfahren 3.5 mit Armijo-Schrittweitenwahl 3.10 generierte Iterationsfolge. Die Folge $(M^k)_{k \in \mathbb{N}} \subseteq \mathcal{S}_n$ der zu den Abstiegsrichtungen $d^k = -M^k \nabla f(x^k)$ gehörigen, positiv definiten Matrizen erfülle $\lambda_0 \leq \lambda_s^k \leq \lambda_g^k \leq \lambda^0$ für geeignete $0 < \lambda_0 \leq \lambda^0$.

Ist $(f(x^k))_{k \in \mathbb{N}}$ von unten beschränkt, so ist jeder Häufungspunkt von f ein stationärer Punkt von f .

Beweis.

Sei $(f(x^k))_{k \in \mathbb{N}}$ von unten beschränkt. Da die Folge nach Konstruktion zugleich monoton fällt, folgt die Konvergenz und mit (3.6) sowie Lemma 3.12

$$\begin{aligned} 0 \leftarrow f(x^{k+1}) - f(x^k) &\leq -\alpha t_k \nabla f(x^k)^T M^k \nabla f(x^k) \leq -\frac{\alpha t_k}{\lambda_g^k} \|\nabla f(x^k)\|^2 \leq -\frac{\alpha \tilde{t}}{\lambda_g^0} \|\nabla f(x^k)\|^2 \\ &\leq -\alpha \frac{2\nu_0(1 - \alpha)}{L\tilde{\kappa}_2^2} \|\nabla f(x^k)\|^2 \leq 0, \end{aligned}$$

also ist $\lim_{k \rightarrow \infty} \|\nabla f(x^k)\| = 0$. \square

3.2.2. Die WOLFE-POWELL-Regel

Seien $\alpha \in (0, \frac{1}{2})$ und $\varrho \in [\alpha, 1]$ gegeben. Die **WOLFE-POWELL-Regel** lautet:

Zum Punkt $x \in \mathbb{R}^n$ und zum Richtungsvektor $d \in \mathbb{R}^n$ mit $\nabla f(x)^T d < 0$ bestimme eine Schrittweite $t > 0$ so, dass

$$f(x + td) \leq f(x) + \alpha t \nabla f(x)^T d \quad (3.7a)$$

$$\nabla f(x + td)^T d \geq \varrho \nabla f(x)^T d \quad (3.7b)$$

gelten bzw. gleichbedeutend $\varphi(t) \leq \varphi(0) + \alpha t \varphi'(0)$ und $\varphi'(t) \geq \varrho \varphi'(0)$.

Zusätzlich zur Armijo-Regel (3.7a), welche sicherstellt, dass die gewählte Schrittweite t *hinreichend klein* ist, wird also gefordert, dass der Schritt nicht *zu klein* wird (3.7b).

Diese Bedingung wird dadurch motiviert, dass an einem lokalen Minimum t^* von φ gilt

$$\varphi'(t^*) = \nabla f(x + td)^T d = 0$$

und es daher sinnvoll ist, zu verhindern, dass φ bei t zu steil fällt.

In der Grafik ist die Armijo-Bedingung auf ganz $[a, b]$ erfüllt, die WOLFE-POWELL-Regel allerdings nur auf dem Teilintervall $[\bar{a}, \bar{b}]$. Weiterhin genügen auch alle Schrittweiten $t \in [\bar{c}, d]$ den WOLFE-POWELL-Bedingungen.

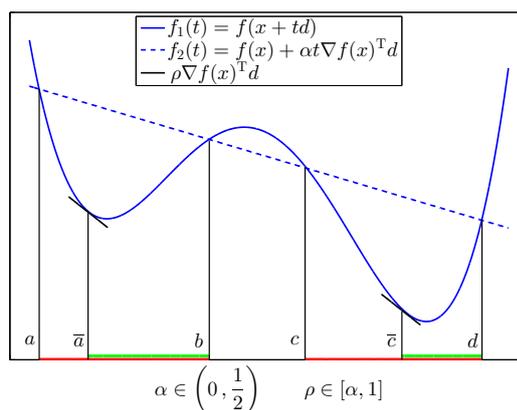


Fig. 5: Die Wolfe-Powell-Regel als modifizierte Armijo-Bedingung.

Lemma 3.14.

Seien $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ stetig differenzierbar, $x \in \mathbb{R}^n$ und $d \in \mathbb{R}^n$ mit $\nabla f(x)^T d < 0$. Ferner sei f an x in Richtung d beschränkt, d.h.,

$$\inf\{f(x + td) \mid t \geq 0\} > -\infty$$

Weiter seien $\alpha \in (0, \frac{1}{2})$ und $\varrho \in (\alpha, 1)$. Dann existiert ein $t > 0$ mit (3.7a) und (3.7b).

Beweis.

Die Funktion

$$\Psi(t) = f(x + td) - f(x) - \alpha t \nabla f(x)^T d \rightarrow -\infty \quad \text{für } t \rightarrow \infty$$

ist wegen $\Psi'(0) = (1 - \alpha) \nabla f(x)^T d < 0$ in $t = 0$ streng monoton fallend. Es gilt $\Psi(0) = 0$ und somit gilt $\Psi(t) < 0$ für kleine $t > 0$ und die Menge $\{t > 0 \mid \Psi(t) = 0\}$ ist abgeschlossen. Die Menge ist auch nichtleer, da f in x in Richtung d nach unten beschränkt ist. Daher existiert ein kleinstes $\bar{t} > 0$ mit $\Psi(\bar{t}) = 0$. Wegen des Zwischenwertsatzes folgt $\Psi(t) < 0$ für alle $t \in (0, \bar{t})$. Es gilt damit (3.7a) für $t = \bar{t}$. Ferner erhalten wir

$$\nabla f(x + \bar{t}d)^T d - \alpha \nabla f(x)^T d = \Psi'(\bar{t}) = \lim_{t \rightarrow 0^+} \frac{1}{t} \left(\underbrace{\Psi(\bar{t})}_{=0} - \underbrace{\Psi(\bar{t} - t)}_{<0} \right) \geq 0$$

Also gilt wegen $0 < \alpha \leq \varrho$

$$\nabla f(x + \bar{t}d)^T d \geq \alpha \nabla f(x)^T d \geq \varrho \nabla f(x)^T d$$

Damit gilt auch (3.7b) für $t = \bar{t}$. □

Wir geben nun einen Algorithmus aus [8, Algorithmus S.3] an, der eine WOLFE-POWELL-Schrittweite berechnet. Die Idee des Verfahrens besteht darin, zuerst ein Intervall $[t, \bar{t}]$ zu bestimmen, so dass (3.7a) für $t = t$ gilt, (3.7a) aber für $t = \bar{t}$ nicht gilt. Für

$$\Psi(t) = f(x + td) - f(x) - \alpha t \nabla f(x)^T d$$

gilt dann $\Psi(\underline{t}) \leq 0$ und $\Psi(\bar{t}) \geq 0$. Nach dem Zwischenwertsatz existiert also ein $t^* \in [\underline{t}, \bar{t}]$ mit $\Psi(t^*) = 0$. Durch Bisektion wird dieser Vorzeichenwechsel von Ψ eingeschachtelt, bis ein $t \in (0, t^*]$ gefunden ist, welches (3.7) erfüllt. Offenbar gilt für $t \leq t^*$ hinreichend klein (3.7).

Algorithmus 3.15 (WOLFE-POWELL-Liniensuche)

Eingabe: $d \in \mathbb{R}^n$ mit $\nabla f(x)^T d < 0$

- 1: Falls an $t = 1$ die Armijo-Bedingung (3.7a) gilt, gehe zu Schritt 3.
 - 2: Bestimme die größte Zahl $\underline{t} \in \{2^{-1}, 2^{-2}, \dots\}$, so dass für $t = \underline{t}$ (3.7a) gilt. Setze $\bar{t} = 2\underline{t}$ und gehe zu Schritt 5.
 - 3: Falls $t = 1$ (3.7b) erfüllt, **stop** mit Ergebnis $t = 1$. Sonst weiter mit Schritt 4.
 - 4: Bestimme die kleinste Zahl $\bar{t} \in \{2, 2^2, \dots\}$, so dass (3.7a) verletzt ist für $t = \bar{t}$. Setze $\underline{t} = \bar{t}/2$.
 - 5: Solange $t = \underline{t}$ (3.7b) nicht erfüllt:
 - Berechne $t = (\underline{t} + \bar{t})/2$.
 - Erfüllt t (3.7a), setze $\underline{t} = t$ sonst $\bar{t} = t$.
 - 6: **stop** mit $t = \underline{t}$
-

Aus [8, Satz 9.4] zitieren wir den folgenden Konvergenzsatz mit Beweis.

Satz 3.16.

Seien $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ stetig differenzierbar, $x \in \mathbb{R}^n$ und $d \in \mathbb{R}^n$ mit $\nabla f(x)^T d < 0$. Ferner sei d eine Richtung an x , in die f nach unten beschränkt ist, d.h.,

$$\inf\{f(x + td) \mid t \geq 0\} > -\infty. \quad (3.8)$$

Weiter seien $\alpha \in (0, \frac{1}{2})$ und $\varrho \in (\alpha, 1)$ gegeben. Dann terminiert Algorithmus 3.15 nach endlich vielen Schritten mit einer Schrittweite t , die (3.7) erfüllt.

Beweis.

Schritt 2 implementiert die Armijo-Regel mit $\beta = 1/2$ und terminiert nach endlich vielen Schritten wegen Lemma 3.12. Wegen (3.8) und $\nabla f(x)^T d < 0$ gilt

$$\Psi(t) = f(x + td) - f(x) - \alpha t \nabla f(x)^T d \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \infty.$$

Damit ist (3.7a) für t hinreichend groß nicht erfüllt. Schritt 4 terminiert daher auch nach endlich vielen Schritten. Zu Beginn von Schritt 5 gelten:

$$\underline{t} < \bar{t}, \quad t = \underline{t} \text{ erfüllt (3.7a)}, \quad t = \bar{t} \text{ erfüllt (3.7a) nicht} \quad (3.9)$$

Nun wird in jeder Iteration von Schritt 5 die Länge des Intervalls $[\underline{t}, \bar{t}]$ halbiert, wobei (3.9) stets gilt. Hierbei wird entweder \underline{t} vergrößert oder \bar{t} verkleinert. Angenommen, Schritt 5 terminiert nicht nach endlich vielen Iterationen. Dann gibt es t^* mit

$$\underline{t} \rightarrow (t^*)^- \quad \bar{t} \rightarrow (t^*)^+$$

Wegen (3.7) gilt aus Stetigkeitsgründen $\Psi(t^*) = 0$ (denn $\Psi(\underline{t}) \leq 0$ und $\Psi(\bar{t}) > 0$). Aus $\Psi(\bar{t}) > 0 = \Psi(t^*)$ und $\bar{t} \rightarrow (t^*)^+$ folgt nun $\Psi'(\bar{t}) = \lim_{\bar{t} \rightarrow (t^*)^+} \frac{1}{\bar{t} - (t^*)^+} (\underbrace{\Psi(\bar{t})}_{>0} - \underbrace{\Psi(t^*)}_{=0}) \geq 0$, also mit $\alpha < \varrho$

$$\nabla f(x + t^*d)^T d \geq \alpha \nabla f(x)^T d > \varrho \nabla f(x)^T d.$$

Für \underline{t} hinreichend nahe bei t^* gilt dann aus Stetigkeitsgründen

$$\nabla f(x + \underline{t}d)^T d \geq \varrho \nabla f(x)^T d,$$

und (3.7b) ist daher an $t = \underline{t}$ erfüllt, so dass die Iterationen in Schritt 5 abbrechen. Dies ist ein Widerspruch. \square

Ohne Beweis geben wir den folgenden Satz an:

Satz 3.17. (Existenz zulässiger Wolfe-Powell-Schrittweiten)

Seien $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ stetig differenzierbar und $\alpha \in (0, \frac{1}{2})$, $\rho \in [\alpha, 1)$ und $x^0 \in \mathbb{R}^n$ fest vorgegeben. Zu $x \in \mathcal{L}(x^0) = \{\tilde{x} \in \mathbb{R}^n \mid f(\tilde{x}) \leq f(x^0)\}$ und einer Richtung $d \in \mathbb{R}^n$ mit $\nabla f(x)^T d < 0$ sei

$$\mathcal{T}_{\text{WP}}(x, d) = \{t > 0 \mid (3.7a) \text{ und } (3.7b) \text{ sind erfüllt}\}.$$

Dann gelten:

1. Ist f nach unten beschränkt, so ist $\mathcal{T}_{\text{WP}}(x, d) \neq \emptyset$, d.h. die Wolfe-Powell-Schrittweitenstrategie ist wohldefiniert.
2. Ist weiter ∇f auf $\mathcal{L}(x^0)$ Lipschitz-stetig, so gibt es eine Konstante $\theta > 0$ (unabhängig von x und d) mit

$$f(x + td) \leq f(x) - \theta \left(\frac{\nabla f(x)^T d}{\|d\|} \right)^2 \quad \text{für alle } t \in \mathcal{T}_{\text{WP}}(x, d).$$

Bemerkung 3.18.

Die WOLFE-POWELL-Schrittweitenstrategie garantiert damit den in Satz 3.6 geforderten Abstieg. \diamond

3.2.3. Die strenge Wolfe-Powell-Regel

Seien $\alpha \in (0, \frac{1}{2})$ und $\varrho \in [\alpha, 1)$ fest vorgegeben. Die **strenge Wolfe-Powell-Regel** lautet:
Zu $x, d \in \mathbb{R}^n$ mit $\nabla f(x)^T d < 0$ bestimme eine Schrittweite $t > 0$ mit

$$f(x + td) \leq f(x) + \alpha t \nabla f(x)^T d, \quad (3.10a)$$

$$|\nabla f(x + td)^T d| \leq -\varrho \nabla f(x)^T d. \quad (3.10b)$$

Im Gegensatz zur klassischen Wolfe-Powell-Regel wird also nicht nur gefordert, dass der Graph von φ nicht zu steil abfällt, sondern auch, dass er nicht zu steil ansteigt.

Die strengen WOLFE-POWELL-Bedingungen gelten für $t \in [\bar{a}, \bar{b}]$ und für $t \in [\bar{c}, \bar{d}]$. Für sehr kleines ϱ (und damit auch kleines α) ist eine Schrittweite, welche Bedingung (3.10b) erfüllt, nahe an einem stationären Punkt von φ .

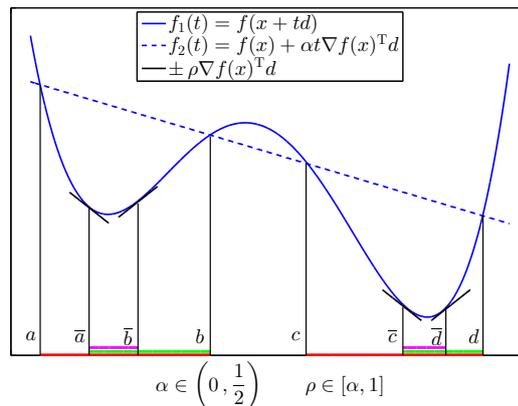


Fig. 6: Die strenge Wolfe-Powell-Regel.

3.3. Praktische Aspekte

Die vorgestellten Schrittweitenalgorithmen sind idealisiert. In der Praxis sind f und ∇f nur maschinen- und/oder problemabhängig genau. Werden diese Ungenauigkeiten nicht berücksichtigt, führt dies schnell zu Endlosschleifen.

Ideal wäre es, wenn mit den Funktionswerten $\varphi(t)$, $\varphi(0)$ und den Ableitungen $\varphi'(t)$, $\varphi'(0)$ Fehlerschranken $\varepsilon(t)$, $\varepsilon(0)$ und $\hat{\varepsilon}(t)$, $\hat{\varepsilon}(0)$ mitgeliefert würden. Dann werden die beiden Bedingungen

$$\varphi(t) \leq \varphi(0) + \alpha t \varphi'(0) \quad \text{bzw.} \quad \varphi'(t) \geq \varrho \varphi'(0)$$

ersetzt durch

$$\varphi(t) \leq \varphi(0) + \alpha t (\varphi'(0) + \hat{\varepsilon}(0)) + \varepsilon(0) + \varepsilon(t) \quad \text{bzw.} \quad \varphi'(t) \geq \varrho (\varphi'(0) - \hat{\varepsilon}(0)) - \hat{\varepsilon}(t).$$

Weiter ist abzubrechen, wenn das Intervall $[\underline{t}, \bar{t}]$ „zu klein“ wird, d.h. wenn $\bar{t} - \underline{t}$ klein wird. Ferner sollte man stets eine untere Schranke für f mitführen.

3.4. Gradientenverfahren

Eine nahe liegende Wahl für d – auch in Hinblick auf die Winkelbedingung aus Satz 3.6 – ergibt sich als Lösung von

$$\min \nabla f(x)^T d \quad \text{u.d.N.} \quad \|d\| = 1.$$

Das Ziel ist also, d als jene Richtung zu bestimmen, in welche f in x am steilsten fällt. Gemäß der CAUCHY-SCHWARZschen Ungleichung folgt mit $\|d\| = 1$

$$\nabla f(x)^T d \geq -\|\nabla f(x)^T\| \|d\| = -\|\nabla f(x)^T\|$$

so dass das Minimierungsproblem von $d = -\frac{\nabla f(x)}{\|\nabla f(x)\|}$ gelöst wird.

Algorithmus 3.19 (Gradientenverfahren, Verfahren des steilsten Abstiegs)

Eingabe: Startwert x^0 , $\alpha \in (0, 1)$, $\beta \in (0, 1)$.

```

1: for  $k = 0, 1, \dots$  do
2:   if  $\nabla f(x^k) = 0$  then
3:     break
4:   else
5:     Setze  $d^k = -\nabla f(x^k) / \|\nabla f(x^k)\|$ .
6:     Bestimme die Schrittweite  $t_k$  gemäß Algorithmus 3.10 mit  $\nu_0 = \nu^0 = \beta$ .
7:     Setze  $x^{k+1} = x^k + t_k d^k$ .
8:   end if
9: end for

```

Bemerkung 3.20.

In der Implementation von Algorithmus 3.10 wird die Abbruchbedingung ersetzt durch

$$\|\nabla f(x^k)\| \leq \tau_{\text{rel}} \|\nabla f(x^0)\| + \tau_{\text{abs}}$$

mit für das vorliegende Problem gewählten relativen und absoluten Toleranz $0 < \tau_{\text{rel}} \leq \tau_{\text{abs}}$. Ferner wird die **for**-Schleife nach einer maximalen Anzahl von Iterationen k_{max} abgebrochen. \diamond

Verwenden wir die WOLFE-POWELL-Schrittweitenstrategie, dann folgt sofort aus den Sätzen 3.6 und 3.17, dass jeder Häufungspunkt der Folge $(x^k)_{k \in \mathbb{N}}$ ein stationärer Punkt von f ist. Eine analoge Aussage gilt auch für die strenge WOLFE-POWELL-Regel. Die Armijo-Bedingung hingegen erfüllt die Bedingung des hinreichenden Abstiegs nicht notwendigerweise.

Das folgende Resultat folgt auch aus Satz 3.13. Wir geben hier einen alternativen Beweis an.

Satz 3.21.

Sei $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ stetig differenzierbar. Dann terminiert der Algorithmus 3.19 entweder endlich mit einem stationären Punkt, oder er erzeugt eine endliche Folge $(x^k)_{k \in \mathbb{N}}$ mit diesen Eigenschaften

1. Für alle k gilt $f(x^{k+1}) < f(x^k)$.
2. Jeder Häufungspunkt von $(x^k)_{k \in \mathbb{N}}$ ist ein stationärer Punkt von f

Beweis. (vergleiche [8, Satz 7.7])

Wir müssen nur den Fall betrachten, dass der Algorithmus nicht endlich abbricht. Nach Lemma 3.8 erzeugt, das Verfahren dann unendliche Folgen $(x^k)_{k \in \mathbb{N}}$ und $(t_k)_{k \in \mathbb{N}} \subset (0, 1]$ mit $\nabla f(x^k) \neq 0$ und

$$f(x^{k+1}) - f(x^k) = f(x^k + t_k d^k) - f(x^k) \leq -\alpha t_k \|\nabla f(x^k)\|^2 < 0$$

und damit ist der 1. Teil gezeigt.

Nun zu Teil 2. Sei x^* ein Häufungspunkt von $(x^k)_{k \in \mathbb{N}}$ und $(x^{k_\nu})_{\nu \in \mathbb{N}}$ eine Teilfolge mit Grenzwert $\lim_{\nu \rightarrow \infty} x^{k_\nu} = x^*$. Die Folge $(f(x^k))_{k \in \mathbb{N}}$ ist monoton fallend und besitzt daher einen Grenzwert $z \in \mathbb{R} \cup \{-\infty\}$. Daraus folgt insbesondere: $(f(x^{k_\nu}))_{\nu \in \mathbb{N}}$ konvergiert gegen z . Wegen der Stetigkeit von f und wegen $\lim_{\nu \rightarrow \infty} x^{k_\nu} = x^*$ folgt aber auch $\lim_{\nu \rightarrow \infty} f(x^{k_\nu}) = f(x^*)$. Aus der Eindeutigkeit des Grenzwertes bekommen wir $z = f(x^*)$ und $\lim_{k \rightarrow \infty} f(x^k) = f(x^*)$.

Aus der Armijo-Regel schließen wir

$$\infty > f(x^0) - f(x^*) = \sum_{k=0}^{\infty} (f(x^k) - f(x^{k+1})) \geq \alpha \sum_{k=0}^{\infty} t_k \|\nabla f(x^k)\|^2$$

Das bedeutet aber

$$t_k \|\nabla f(x^{k_\nu})\|^2 \rightarrow 0 \quad k \rightarrow \infty \quad (3.11)$$

Den Rest des Beweises führen wir per Widerspruch: Angenommen, es gilt $\nabla f(x^*) \neq 0$. Aus der Stetigkeit von ∇f und aus $\lim_{\nu \rightarrow \infty} x^{k_\nu} = x^*$ erhalten wir die Existenz eines $N_1 \in \mathbb{N}$ mit

$$\|\nabla f(x^{k_\nu})\| \geq \frac{1}{2} \|\nabla f(x^*)\| > 0 \quad \text{für alle } \nu \geq N_1$$

Mit (3.11) gilt dann $t_{k_\nu} \rightarrow 0$ für $\nu \rightarrow \infty$. Insbesondere gibt es ein $N_2 \in \mathbb{N}$ mit $N_2 \geq N_1$, so dass $t_{k_\nu} \leq \beta$ für $\nu \geq N_2$ erfüllt ist. Aus der Armijo-Schrittweitenregel ergibt sich dann

$$f(x^{k_\nu} + \underbrace{\beta^{-1} t_{k_\nu} d^{k_\nu}}_{> t_{k_\nu}}) - f(x^{k_\nu}) > -\alpha \beta^{-1} t_{k_\nu} \|\nabla f(x^{k_\nu})\|^2 \quad \text{für alle } \nu \geq N_2 \quad (3.12)$$

Wir setzen $s_{k_\nu} = \beta^{-1} t_{k_\nu}$. Dann ist $(s_{k_\nu})_{\nu \in \mathbb{N}}$ eine Nullfolge, da $t_{k_\nu} \xrightarrow{\nu \rightarrow \infty} 0$. Mit dem Mittelwertsatz folgt

$$\lim_{\nu \rightarrow \infty} \frac{1}{s_{k_\nu}} (f(x^{k_\nu} + s_{k_\nu} d^{k_\nu}) - f(x^{k_\nu})) = \lim_{\nu \rightarrow \infty} \frac{1}{s_{k_\nu}} (s_{k_\nu} \nabla f(x^{k_\nu} + t_{k_\nu} d^{k_\nu})^\top d^{k_\nu}) = -\|\nabla f(x^*)\|_2^2$$

mit Zwischenstellen $t_{k_\nu} \in [0, s_{k_\nu}]$. Ferner gilt

$$\lim_{\nu \rightarrow \infty} \|\nabla f(x^{k_\nu})\|_2^2 = \|\nabla f(x^*)\|_2^2.$$

Damit ergibt sich aus (3.12) der Widerspruch

$$-\|\nabla f(x^*)\|_2^2 = \lim_{\nu \rightarrow \infty} \frac{f(x^{k_\nu} + s_{k_\nu} d^{k_\nu}) - f(x^{k_\nu})}{\beta^{-1} t_{k_\nu}} \geq \lim_{\nu \rightarrow \infty} -\alpha \|\nabla f(x^{k_\nu})\|_2^2 = -\alpha \|\nabla f(x^*)\|_2^2$$

d.h., $0 \geq \underbrace{(1-\alpha)}_{>0} \underbrace{\|\nabla f(x^*)\|_2^2}_{>0} > 0$, was nicht möglich ist. Also ist die Annahme $\nabla f(x^*) \neq 0$ falsch. \square

Bemerkung 3.22.

Das Konvergenzverhalten des steilsten Abstiegs kann sehr schlecht sein. Für eine *quadratische Form* $f(x) = \frac{1}{2} x^\top A x - b^\top x + c$ mit positiv definiten Matrix $A \in \mathcal{S}_n$, $b \in \mathbb{R}^n$ und $c \in \mathbb{R}$ lässt sich zeigen, dass

$$\|x^k - x^*\|_2 \leq \sqrt{\kappa_2(A)} \left(\frac{\kappa_2(A) - 1}{\kappa_2(A) + 1} \right)^k \|x^0 - x^*\|_2, \quad (3.13)$$

erfüllt ist, wobei $\kappa_2(A) = \lambda_g(A)/\lambda_s(A)$ die spektrale Konditionszahl von A bezeichnet mit

$$\lambda_g = \max \{ \lambda \mid \lambda \text{ ist Eigenwert von } A \} \quad \text{und} \quad \lambda_s = \min \{ \lambda \mid \lambda \text{ ist Eigenwert von } A \}.$$

Eine mögliche Abhilfe für die langsame Konvergenz des Verfahrens des steilsten Abstiegs besteht darin, eine Vorkonditionierung durchzuführen. Dazu setzen wir $y = H^{1/2} x$ zu setzen mit geeigneter positiv definiten Matrix $H \in \mathcal{S}_n$. Wir erhalten

$$f(x) = \frac{1}{2} x^\top A x - b^\top x + c = \frac{1}{2} y^\top H^{-1/2} A H^{-1/2} y - (H^{-1/2} b)^\top y + c = \frac{1}{2} y^\top \tilde{A} y - \tilde{b}^\top y + c = \tilde{f}(y),$$

wobei wir $\tilde{A} = H^{-1/2}AH^{-1/2} \in \mathcal{S}_n$ und $\tilde{b} = H^{-1/2}b \in \mathbb{R}^n$ gesetzt haben. Analog zu (3.13) gilt für das Gradientenverfahren, angewandt auf \tilde{f} , die Abschätzung

$$\|y^k - y^*\|_2 \leq \sqrt{\kappa_2(\tilde{A})} \left(\frac{\kappa_2(\tilde{A}) - 1}{\kappa_2(\tilde{A}) + 1} \right)^k \|y^0 - y^*\|_2$$

mit $y^* = H^{1/2}x^*$. Wegen $H^{-1/2}\tilde{A}H^{1/2} = H^{-1}A$ haben \tilde{A} und $H^{-1}A$ dieselben Eigenwerte. Daher sollte die Matrix $H \in \mathcal{S}_n$ so gewählt sein, dass gilt

$$0 < \frac{\lambda_g(H^{-1}A)}{\lambda_s(H^{-1}A)} = \kappa_2(H^{-1}A) < \frac{\lambda_g(A)}{\lambda_s(A)} = \kappa_2(A). \quad \diamond$$

4. Verfahren der konjugierten Gradienten

4.1. A-konjugierte Richtungen

Wir betrachten die Funktion

$$f(x) = \frac{1}{2}x^T Ax - b^T x + c$$

mit $A \in \mathcal{S}_n$ positiv definit, $b \in \mathbb{R}^n$ und $c \in \mathbb{R}$.

Das Verfahren des steilsten Abstiegs kann langsam sein, obwohl wir die exakte Minimierungsregel in der Schrittweitenwahl verwenden. Die Matrix A ist häufig groß und häufig dünn besetzt, bzw. speziell besetzt. Dann ist es oft einfacher, das Matrix-Vektor-Produkt Ax auszugeben. Das **CG-Verfahren** (CG – Conjugate Gradient) bricht nach endlich vielen Schritten ab und A wird nicht als Feld abgespeichert sondern nur Ax wird benötigt.

Die notwendige und hinreichende Bedingung für eine Minimalstelle x^* von

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \left(\frac{1}{2}x^T Ax - b^T x + c \right)$$

lautet

$$Ax^* = b.$$

Gegeben sei ein Startpunkt $x^0 \in \mathbb{R}^n$. Wir wollen nun ein Verfahren angeben, das iterativ eine Lösung von $Ax = b$ konstruiert. Dazu betrachten wir folgende motivierende Aussage:

Lemma 4.1.

Sei $f(x) = \frac{1}{2}x^T Ax - b^T x + c$ mit $A \in \mathcal{S}_n$ positiv definit, $b \in \mathbb{R}^n$, $c \in \mathbb{R}$ und $x^0 \in \mathbb{R}^n$. Seien weiter $d^0, d^1, \dots, d^{n-1} \in \mathbb{R}^n$ mit

$$(d^i)^T Ad^j = 0 \quad \forall 1 \leq i \neq j \leq n-1. \quad (4.1)$$

Dann liefert das Verfahren der sukzessiven eindimensionalen Minimierung längs $d^0, d^1, \dots, d^{n-1} \in \mathbb{R}^n$, d.h. die Berechnung einer Folge $(x^k)_{k \in \mathbb{N}}$ aus $x^{k+1} := x^k + t_k d^k$ mit

$$f(x^k + t_k d^k) = \min_{t \in \mathbb{R}} f(x^k + t d^k) \quad k = 0, 1, \dots, n-1 \quad (4.2)$$

nach höchstens n Schritten mit x^n die Minimalstelle x^* von f . Weiter gelten für $k = 0, 1, \dots, n-1$ mit $g^k := Ax^k - b = \nabla f(x^k)$ die Gleichungen

$$t_k = \frac{-(g^k)^T d^k}{(d^k)^T Ad^k} \quad (4.3)$$

und

$$(g^{k+1})^T d^j = 0, \quad j = 0, 1, \dots, k. \quad (4.4)$$

Beweis.

Es gilt:

$$\begin{aligned} f(x^k + td^k) &= \frac{1}{2}t^2(d^k)^\top Ad^k + t((x^k)^\top Ad^k - b^\top d^k) + c + \frac{1}{2}(x^k)^\top Ax^k - b^\top x^k \\ &= \frac{t^2}{2}(d^k)^\top Ad^k + t \underbrace{(g^k)^\top d^k + c + \frac{1}{2}(x^k)^\top Ax^k - b^\top x^k}_{\text{unabhängig von } t} \end{aligned}$$

Aus (4.2) folgt, dass die Minimalstelle t_k

$$t_k(d^k)^\top Ad^k + (g^k)^\top d^k = 0$$

erfüllt. Dies beweist (4.3). Weiter folgt, dass

$$\begin{aligned} 0 &= t_k(d^k)^\top Ad^k + (g^k)^\top d^k = (t_k(d^k)^\top A + (x^k)^\top A - b^\top) d^k \\ &= (A(x^k + t_k d^k) - b)^\top d^k = (Ax^{k+1} - b)^\top d^k \\ &= (g^{k+1})^\top d^k \quad \text{für } k = 0, 1, \dots, n-1 \end{aligned} \quad (4.5)$$

Verwendung von (4.1) für $i \neq j$ ergibt

$$(g^{i+1} - g^i)^\top d^j = (Ax^{i+1} - b - Ax^i + b)^\top d^j = t_i(d^i)^\top Ad^j = 0$$

Das liefert zusammen mit (4.5) für $j = 0, 1, \dots, k \leq n-1$

$$(g^{k+1})^\top d^j = \underbrace{(g^{j+1})^\top d^j}_{=0 \text{ (4.5)}} + \underbrace{\sum_{i=j+1}^k (g^{i+1} - g^i)^\top d^j}_{=0 \text{ da } i \neq j} = 0$$

woraus (4.4) folgt. Die Vektoren d^0, \dots, d^{n-1} sind wegen (4.1) bezüglich des Skalarproduktes

$$\langle u, v \rangle_A = u^\top Av$$

paarweise orthogonal und linear unabhängig. Aus (4.4) folgt dann sofort, dass $g^n = 0$ oder äquivalent $x^n = x^*$. \square

Bemerkung 4.2.

Die Vektoren d^0, d^1, \dots, d^{n-1} mit der Eigenschaft (4.1) heißen **A-orthogonal** oder **A-konjugiert**. \diamond

4.2. Bestimmung A-konjugierter Richtungen

Wir starten mit

$$d^0 = -\nabla f(x^0) = -g^0$$

Angenommen, es sind bereits $l+1$ Vektoren d^0, d^1, \dots, d^l , die A-konjugiert sind, d.h.

$$(d^i)^\top Ad^j = 0 \quad \text{für } i, j = 0, 1, \dots, l, \quad i \neq j \quad (4.6)$$

Nach Lemma 4.1 gelten (4.3) und (4.4) für $k = 0, \dots, l$. Wir nehmen an, dass $g^{l+1} \neq 0$. Wir verwenden den Ansatz

$$d^{l+1} := -g^{l+1} + \sum_{i=0}^l \beta_i^l d^i \quad (4.7)$$

(wegen (4.4) ist g^{l+1} linear unabhängig von d^i für $i = 0, \dots, l$). Es soll

$$(d^{l+1})^\top Ad^j = 0 \quad \text{für } j = 0, \dots, l$$

gelten. Wir haben:

$$\begin{aligned}(d^{l+1})^T Ad^j &= \left(-g^{l+1} + \sum_{i=0}^l \beta_i^l d^i \right)^T Ad^j \\ &= -(g^{l+1})^T Ad^j + \sum_{i=0}^l \beta_i^l (d^i)^T Ad^j = -(g^{l+1})^T Ad^j + \beta_j^l (d^j)^T Ad^j,\end{aligned}$$

da nach (4.6) $(d^i)^T Ad^j = 0$ für $i \neq j$. Daraus folgt

$$\beta_j^l = \frac{(g^{l+1})^T Ad^j}{(d^j)^T Ad^j} \quad \text{für } j = 0, \dots, l \quad (4.8)$$

Wir wollen noch weitere Eigenschaften herleiten: Multipliziert man (4.7) von links mit $(g^{l+1})^T$ so gilt

$$(g^{l+1})^T \left(-g^{l+1} + \sum_{i=0}^l \beta_i^l d^i \right) = -\|g^{l+1}\|^2 + \sum_{i=0}^l \beta_i^l (g^{l+1})^T d^i = -\|g^{l+1}\|^2 < 0.$$

Offensichtlich ist d^{l+1} eine Abstiegsrichtung für f in x^{l+1} . Aus (4.3) folgt

$$t_{l+1} = \frac{-(g^{l+1})^T d^{l+1}}{(d^{l+1})^T Ad^{l+1}} > 0.$$

Aufgrund der Konstruktion der d^k , $k = 0, \dots, l$, und (4.4) gilt weiter, dass

$$(g^k)^T d^k = -\|g^k\|^2 < 0 \quad \text{und} \quad t_k > 0 \quad \forall k = 0, \dots, l.$$

Eine weitere Orthogonalitätsbedingung ergibt sich folgendermaßen:

$$\begin{aligned}(g^{l+1})^T g^j &= (g^{l+1})^T \left(\sum_{i=0}^{j-1} \beta_i^{j-1} d^i - d^j \right) \\ &= \sum_{i=0}^{j-1} \beta_i^{j-1} \underbrace{(g^{l+1})^T d^i}_{=0} - \underbrace{(g^{l+1})^T d^j}_{=0} = 0 \quad \text{für } j = 0, \dots, l.\end{aligned} \quad (4.9)$$

Also gilt für die rechte Seite von (4.8) wegen

$$g^{j+1} - g^j = Ax^{j+1} - Ax^j = t_j Ad^j \quad \forall j = 0, \dots, l$$

die Gleichheit

$$(g^{l+1})^T Ad^j = \frac{1}{t_j} (g^{l+1})^T (g^{j+1} - g^j) = 0 \quad \forall j = 0, \dots, l-1.$$

Daraus folgt:

$$\beta_j^l = \frac{(g^{l+1})^T Ad^j}{(d^j)^T Ad^j} = 0 \quad \text{für } j = 0, \dots, l-1$$

und

$$\beta_l^l = \frac{(g^{l+1})^T Ad^l}{(d^l)^T Ad^l} = \frac{1}{t_l} \frac{(g^{l+1})^T (g^{l+1} - g^l)}{(d^l)^T Ad^l} = \frac{\|g^{l+1}\|^2}{(d^l)^T (g^{l+1} - g^l)} = \frac{\|g^{l+1}\|^2}{-(d^l)^T g^l} = \frac{\|g^{l+1}\|^2}{\|g^l\|^2} =: \beta_l$$

Somit reduziert sich (4.7) auf

$$d^{l+1} = -g^{l+1} + \beta_l d^l.$$

Weiter sei bemerkt, dass wegen $g^k = Ax^k - b$ gilt:

$$g^{k+1} - g^k = Ax^{k+1} - Ax^k = t_k Ad^k$$

Algorithmus 4.3 (CG-Algorithmus für quadratische Minimierung)**Eingabe:** $x^0 \in \mathbb{R}^n$

- 1: Setze $g^0 = Ax^0 - b$, $d^0 = -g^0$, $k = 0$ und wähle $\epsilon > 0$
- 2: **while** $\|g^k\| \geq \epsilon$ **do**
- 3: Bestimme Schrittweite $t_k = \frac{\|g^k\|^2}{(d^k)^T Ad^k}$
- 4: Bestimme nächste Iterierte $x^{k+1} = x^k + t_k d^k$
- 5: Setze $g^{k+1} = g^k + t_k Ad^k$
- 6: Setze $\beta_k = \frac{\|g^{k+1}\|^2}{\|g^k\|^2}$
- 7: Setze $d^{k+1} = -g^{k+1} + \beta_k d^k$
- 8: $k = k + 1$
- 9: **end while**

Also kann g^k von Schritt zu Schritt aufaddiert werden, ohne dass eine weitere Matrix-Vektor-Multiplikation notwendig ist, da Ad^k bereits in der Bestimmung von t_k aufgetaucht ist. Eine Skalarproduktauswertung erspart man sich, wenn man (4.3) mit Hilfe von $(g^k)^T d^k = -\|g^k\|^2$ umformt zu

$$t_k = \frac{\|g^k\|^2}{(d^k)^T Ad^k}.$$

Der **CG-Algorithmus** lautet nun:

Bemerkung 4.4.

1. Der Hauptaufwand liegt in den Berechnungen von Ad^k . Da dieses Produkt zweimal benötigt wird, sollte man selbiges als $z^k := Ad^k$ abspeichern.
2. Wegen (4.9) kann β_k gemäß

$$\beta_k = \frac{(g^{k+1} - g^k)^T g^{k+1}}{\|g^k\|^2} \quad (4.10)$$

berechnet werden. Der Vorteil von (4.10): Die Richtungen sind in der numerischen Praxis schnell nicht mehr A -konjugiert. Dann kann zum Beispiel t_k sehr klein oder überhaupt negativ werden. Es empfiehlt sich zum Beispiel $t_k := \max\{0, \frac{\|g^k\|^2}{(d^k)^T Ad^k}\}$ zu wählen. Angenommen $t_k \approx 0$: Es ergibt sich aus $g^{k+1} = g^k + t_k Ad^k$ mit (4.10) also $\beta_k \approx 0$ und daher

$$d^{k+1} \approx -g^{k+1}.$$

Es wird daher unter Verwendung von (4.10) ein automatischer **Restart** mit der Richtung des steilsten Abstiegs durchgeführt.

3. Besitzt $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ genau $m \leq n$ paarweise verschiedene Eigenwerte, so bricht das CG-Verfahren nach m Schritten ab. Ferner bricht das Verfahren nach m Schritten ab, wenn b als Linearkombination von höchstens m Eigenvektoren darstellbar ist und mit $x^0 = 0 \in \mathbb{R}^n$ initialisiert wird.

◇

Sei $\kappa_2(Q) = \lambda_{\max}(A)/\lambda_{\min}(A)$, dann gilt für die Folge $(x^k)_{k \in \mathbb{N}}$:

$$\|x^k - x^*\| \leq 2\sqrt{\kappa_2(A)} \left(\frac{\sqrt{\kappa_2(A)} - 1}{\sqrt{\kappa_2(A)} + 1} \right)^k \|x^0 - x^*\|;$$

vergleiche Abschätzung (3.13) für das Gradientenverfahren. Die Absicht besteht nun darin, die Matrix A so zu transferieren, dass möglichst viele Eigenwerte der transformierten Matrix 1 sind (und die restlichen nahe bei 1). Sei $W \in \mathbb{R}^{n \times n}$ positiv definit und symmetrisch. Die Lösung von $Ax = b$ kann gefunden werden, indem man das System

$$W^{-1/2}AW^{-1/2}y = W^{-1/2}b$$

löst und $x = W^{-1/2}y$ verwendet. Die Matrix $R = W^{-1/2}AW^{-1/2}$ besitzt dieselben Eigenwerte wie $W^{-1}A$, da $W^{-1/2}RW^{1/2} = W^{-1}A$. Der Wunsch, die Matrix W so zu bestimmen, dass möglichst viele Eigenwerte eins sind, entspricht der Tatsache, dass $\kappa_2(W^{-1}A)$ möglichst klein ist. Die Matrix W nennt man **Präkonditionierungsmatrix** und nennt das Verfahren **Präkonditionierung**. In der Praxis verwendet man W und nicht $W^{-1/2}$. In der numerischen Praxis wird natürlich nicht W^{-1} gebildet, sondern es wird $Wd = g$ gelöst. Die Umsetzung des vorkonditionierten CG-Verfahrens ist in Algorithmus 4.5 beschrieben.

Algorithmus 4.5 (Präkonditionierter CG-Algorithmus)

Eingabe: $W \in \mathcal{S}_n$ positiv definit $x^0 \in \mathbb{R}^n$

- 1: Setze $g^0 = Ax^0 - b$, $d^0 = -W^{-1}g^0$, $k = 0$ und wähle $\epsilon > 0$
 - 2: **while** $\|g^k\| \geq \epsilon$ **do**
 - 3: Bestimme Schrittweite $t_k = \frac{(g^k)^T W^{-1} g^k}{(d^k)^T A d^k}$
 - 4: Bestimme nächste Iterierte $x^{k+1} = x^k + t_k d^k$
 - 5: Setze $g^{k+1} = g^k + t_k A d^k$
 - 6: Setze $\beta_k = \frac{(g^{k+1})^T W^{-1} g^{k+1}}{(g^k)^T W^{-1} g^k}$
 - 7: Setze $d^{k+1} = -W^{-1}g^{k+1} + \beta_k d^k$
 - 8: $k = k + 1$
 - 9: **end while**
-

5. Newton-Verfahren

5.1. Konvergenzraten und das lokale Newton-Verfahren

Definition 5.1.

Seien $f, g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ und $x, x^* \in \mathbb{R}^n$ geben.

1. $f(x) = o(g(x))$ für $x \rightarrow x^*$, falls eine (uniforme) Konstante $C > 0$ und eine Umgebung U von \bar{x} existieren, so dass gilt

$$\|f(x)\| \leq C \|g(x)\| \quad \text{für alle } x \in U \setminus \{x^*\}.$$

2. $f(x) = \mathcal{O}(g(x))$ für $x \rightarrow x^*$, falls für alle $\epsilon > 0$ eine Umgebung U_ϵ von x^* existiert mit

$$\|f(x)\| \leq \epsilon \|g(x)\| \quad \text{für alle } x \in U_\epsilon \setminus \{x^*\}.$$

Definition 5.2. (Konvergenzraten)

Die Folge $(x^k) \subset \mathbb{R}^n$

1. konvergiert **q-linear** mit Rate $0 < \gamma < 1$ gegen $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$, falls es ein $l \geq$ gibt, so dass gilt:

$$\|x^{k+1} - x^*\| \leq \gamma \|x^k - x^*\| \quad \forall k \geq l.$$

2. konvergiert **q-superlinear** gegen $x^* \in \mathbb{R}^n$, falls $x^k \rightarrow x^*$ gilt sowie

$$\|x^{k+1} - x^*\| \leq o(\|x^k - x^*\|) \quad \text{für } k \rightarrow \infty.$$

Die Bedingung ist gleichbedeutend mit

$$\frac{\|x^{k+1} - x^*\|}{\|x^k - x^*\|} \rightarrow 0 \quad \text{für } k \rightarrow \infty.$$

3. konvergiert **q-quadratisch** gegen $x^* \in \mathbb{R}^n$, falls $x^k \rightarrow x^*$ gilt sowie,

$$\|x^{k+1} - x^*\| \leq \mathcal{O}(\|x^k - x^*\|^2) \quad \text{für } k \rightarrow \infty.$$

Die Bedingung ist gleichbedeutend damit, dass es $C \geq 0$ gibt mit

$$\|x^{k+1} - x^*\| \leq C \|x^k - x^*\|^2 \quad \forall k \geq 0.$$

Bemerkung 5.3.

In der Literatur gibt es ferner die Begriffe r -linear, r -superlinear und r -quadratisch. \diamond

Satz 5.4.

Sei $(x^k)_{k \in \mathbb{N}}$ eine Folge in \mathbb{R}^n mit $\lim x^k = x^* \in \mathbb{R}^n$. Dann folgt

$$0 \leq \left| 1 - \frac{\|x^{k+1} - x^k\|}{\|x^k - x^*\|} \right| \leq \frac{\|x^{k+1} - x^*\|}{\|x^k - x^*\|} \quad \text{für } x^k \neq x^*. \quad (5.1)$$

Wenn $(x^k)_{k \in \mathbb{N}}$ superlinear gegen x^* konvergiert, mit $x^k \neq x^*$ für alle $k \geq k_0$, dann gilt

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|x^{k+1} - x^k\|}{\|x^k - x^*\|} = 1. \quad (5.2)$$

Beweis.

Die linke Ungleichheit ist trivial. Für die rechte Ungleichung nehmen wir zunächst ein positives (und gleich null) Argument im Betrag an. Es gilt

$$\begin{aligned} \|x^k - x^*\| &= \|-x^{k+1} + x^k + x^{k+1} - x^*\| \\ &\leq \|x^{k+1} - x^k\| + \|x^{k+1} - x^*\| \end{aligned} \quad (5.3)$$

Wegen (5.3) erhalten wir

$$\|x^k - x^*\| - \|x^{k+1} - x^k\| \leq \|x^{k+1} - x^*\|,$$

woraus durch Division mit $\|x^k - x^*\| > 0$ bereits die Behauptung folgt

$$1 - \frac{\|x^{k+1} - x^k\|}{\|x^k - x^*\|} \leq \frac{\|x^{k+1} - x^*\|}{\|x^k - x^*\|}.$$

Nehmen wir nun ein strikt negatives Argument im Betrag an. Es gilt

$$\begin{aligned} \|x^{k+1} - x^k\| &= \|x^{k+1} - x^* - x^k + x^*\| \\ &\leq \|x^{k+1} - x^*\| + \|x^k - x^*\| \end{aligned} \quad (5.4)$$

Wegen (5.4) erhalten wir

$$-\|x^k - x^*\| + \|x^{k+1} - x^k\| \leq \|x^{k+1} - x^*\|,$$

woraus durch Division mit $\|x^k - x^*\| > 0$ bereits die Behauptung folgt

$$-1 + \frac{\|x^{k+1} - x^k\|}{\|x^k - x^*\|} \leq \frac{\|x^{k+1} - x^*\|}{\|x^k - x^*\|}.$$

Bilden wir den Grenzwert dieser Ungleichungskette unter der Voraussetzung der Superlinearität so gilt:

$$0 \leq \lim_{k \rightarrow \infty} \left| 1 - \frac{\|x^{k+1} - x^k\|}{\|x^k - x^*\|} \right| \leq \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|x^{k+1} - x^*\|}{\|x^k - x^*\|} = 0$$

und damit $\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|x^{k+1} - x^k\|}{\|x^k - x^*\|} = 1$ \square

Wir charakterisieren superlineare Konvergenz ohne Beweis; vergleiche dazu [8, Satz 11.2]

Satz 5.5.

Seien $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ stetig differenzierbar und $x^* \in \mathbb{R}^n$ ein Punkt, in dem $F'(x^*)$ regulär ist. Sei $(x^k)_{k \in \mathbb{N}} \subset \mathbb{R}^n$ eine gegen x^* konvergente Folge mit $x_k \neq x^*$ für alle $k \geq k_0$. Dann sind folgende Aussagen äquivalent:

1. $(x^k)_{k \in \mathbb{N}}$ konvergiert superlinear gegen x^* , und es gilt $F(x^*) = 0$;
2. $\|F(x^k) + F'(x^*)(x^{k+1} - x^k)\| = o(\|x^{k+1} - x^k\|)$;
3. $\|F(x^k) + F'(x^k)(x^{k+1} - x^k)\| = o(\|x^{k+1} - x^k\|)$.

Sei die Folge $(x^k)_{k \in \mathbb{N}}$ durch $x^{k+1} = x^k + d^k$ gegeben mit $d^k = -(H^k)^{-1}F(x^k)$, wobei $(H^k)_{k \in \mathbb{N}}$ eine Folge invertierbarer Matrizen in $\mathbb{R}^{n \times n}$ ist. Dann folgt:

$$\|(H^k - F'(x^k))(x^{k+1} - x^k)\| = \|F(x^k) + F'(x^k)(x^{k+1} - x^k)\|,$$

was der 2. Aussage von Satz 5.5 entspricht. Wir erhalten auf diese Weise die DENNIS-MORÉ-Bedingung, für die Folge $(x^k)_{k \in \mathbb{N}}$: Gilt $\lim_{k \rightarrow \infty} x^k = x^*$ mit $\det(F'(x^*)) \neq 0$, so sind folgende Aussagen äquivalent:

1. $(x^k)_{k \in \mathbb{N}}$ konvergiert superlinear gegen x^* , und es gilt $F(x^*) = 0$;
2. $\|(H^k - F'(x^*))(x^{k+1} - x^k)\| = o(\|x^{k+1} - x^k\|)$;
3. $\|(H^k - F'(x^k))(x^{k+1} - x^k)\| = o(\|x^{k+1} - x^k\|)$.

Algorithmus 5.6 (lokales Newton-Verfahren für Gleichungssysteme $F(x) = 0$)

Eingabe: Startpunkt $x^0 \in \mathbb{R}^n$

- 1: **for** $k = 0, 1, 2, \dots$ **do**
 - 2: **if** $F(x^k) = 0$ **then**
 - 3: **stop for** und erhalte die Lösung $\bar{x} := x^k \in \mathbb{R}^n$
 - 4: **else**
 - 5: Berechne den Newtonschritt $d^k \in \mathbb{R}^n$ durch Lösen der Newtongleichung $F'(x^k)d^k = -F(x^k)$
 - 6: Setze $x^{k+1} = x^k + d^k$
 - 7: **end if**
 - 8: **end for**
-

5.2. Das lokale Newton-Verfahren in der Optimierung

Wir setzen ab nun voraus, dass f und die lokale Minimalstelle x^* von f folgende Voraussetzungen erfüllen:

$$f \text{ ist zweimal stetig differenzierbar.} \quad (5.5a)$$

$$\exists \gamma > 0 : \forall x, y \in \mathbb{R}^n : \|\nabla^2 f(x) - \nabla^2 f(y)\| \leq \gamma \|x - y\|. \quad (5.5b)$$

$$x^* \text{ ist ein stationärer Punkt von } f: \nabla f(x^*) = 0. \quad (5.5c)$$

$$\nabla^2 f(x^*) \text{ ist positiv definit.} \quad (5.5d)$$

Zur Vereinfachung der Schreibweise bezeichne x_a den aktuellen Iterationspunkt und x_+ die neue Iterierte. Wir betrachten ein **quadratisches Modell** von f um x_a :

$$m_a(x) = f(x_a) + \nabla f(x_a)^T(x - x_a) + \frac{1}{2}(x - x_a)^T \nabla^2 f(x_a)(x - x_a)$$

$$\nabla m_a(x) = \nabla f(x_a) + \nabla^2 f(x_a)(x - x_a)$$

Wenn $\nabla^2 f(x_a)$ positiv definit ist, dann definieren wir x_+ als die (eindeutige) Minimalstelle dieses Modells. Es gilt $0 = \nabla m_a(x_+) = \nabla f(x_a) + \nabla^2 f(x_a)(x_+ - x_a)$. Umformen liefert die **Iterationsvorschrift des Newton-Verfahrens**, d.h.

$$x_+ = x_a - \nabla^2 f(x_a)^{-1} \nabla f(x_a). \quad (5.6)$$

Natürlich wird bei der numerischen Implementierung nicht $\nabla^2 f(x_a)^{-1}$ berechnet, sondern es wird in jedem Iterationsschritt $\nabla^2 f(x_a)d = -\nabla f(x_a)$ gelöst und $x_+ = x_a + d$ gesetzt.

Falls x_a weit von einer lokalen Minimalstelle x^* , die 5.5 erfüllt, entfernt ist, dann kann $\nabla^2 f(x_a)$ negative Eigenwerte haben. Also kann x_+ eine lokale Minimalstelle oder ein Sattelpunkt sein. Um dies zu vermeiden, müssen geeignete Modifikationen eingeführt werden. Zunächst sei aber vorausgesetzt, dass x_a hinreichend nahe an x^* ist.

Satz 5.7. (Quadratische Konvergenz des lokalen Newton-Verfahrens)

1. Sei (5.5) erfüllt. Dann existieren Konstanten $C > 0$ und $\delta > 0$ derart, dass für alle x_a aus der Menge $B(x^*, \delta) = \{x \in \mathbb{R}^n \mid \|x - x^*\| < \delta\}$ der **Newton-Schritt** (5.6) folgende Abschätzung erfüllt:

$$\|x_+ - x^*\| \leq C \|x_a - x^*\|^2.$$

2. Es sei (5.5) erfüllt. Dann existieren ein Radius $\delta > 0$ und eine Konstante $C > 0$, so dass das Newton-Verfahren $x^{k+1} = x^k - \nabla^2 f(x^k)^{-1} \nabla f(x^k)$ für $x^0 \in B(x^*, \delta)$ gegen x^* konvergiert mit

$$\|x^{k+1} - x^*\| \leq C \|x^k - x^*\|^2.$$

Beweis.

1. Wähle $\delta > 0$ derart, dass für alle $x \in B(x^*, \delta)$ gilt

$$\|(\nabla^2 f(x))^{-1}\| \leq 2\|(\nabla^2 f(x^*))^{-1}\|.$$

Da sich die Differenz zwischen x_+ und x^* darstellen lässt als

$$\begin{aligned} x_+ - x^* &= x_a - x^* - (\nabla^2 f(x_a))^{-1} \nabla f(x_a) = (\nabla^2 f(x_a))^{-1} (\nabla^2 f(x_a)(x_a - x^*) - \nabla f(x_a)) \\ &= (\nabla^2 f(x_a))^{-1} \int_0^1 (\nabla^2 f(x_a) - \nabla^2 f(x^* + t(x_a - x^*))) (x_a - x^*) dt, \end{aligned}$$

erhalten wir daraus

$$\begin{aligned} \|x_+ - x^*\| &\leq \|(\nabla^2 f(x_a))^{-1}\| \int_0^1 \|(\nabla^2 f(x_a) - \nabla^2 f(x^* + t(x_a - x^*)))\| dt \cdot \|x_a - x^*\| \\ &\leq 2\|(\nabla^2 f(x^*))^{-1}\| \gamma \int_0^1 \|x_a - x^* - t(x_a - x^*)\| dt \cdot \|x_a - x^*\| \\ &= 2\gamma \|(\nabla^2 f(x^*))^{-1}\| \cdot \|x_a - x^*\|^2 \int_0^1 1 - t dt = \underbrace{\gamma \|(\nabla^2 f(x^*))^{-1}\|}_{=C} \cdot \|x_a - x^*\|^2. \end{aligned}$$

2. Wähle $\tilde{\delta} = \min(\delta, 1/C)$. Dann gilt für jedes $x^k \in B(x^*, \tilde{\delta})$, dass auch x^{k+1} in $B(x^*, \tilde{\delta})$ liegt, denn

$$\|x^{k+1} - x^*\| \leq C \|x^k - x^*\|^2 < C \tilde{\delta} \|x^k - x^*\| \leq \|x^k - x^*\| < \tilde{\delta}.$$

Aus $x^0 \in B(x^*, \tilde{\delta})$ folgt also die Wohldefiniertheit des Newton-Verfahrens und $(x^k)_{k \in \mathbb{N}} \subseteq B(x^*, \tilde{\delta})$. \square

Bemerkung 5.8. (Terminierungsbedingung des lokalen Newton-Verfahrens)

Ein natürliches Abbruchkriterium für das Newton-Verfahren (wie auch für die Gradientenverfahren des letzten Abschnitts) setzt sich aus einer **relativen** und einer **absoluten Fehlerschranke** zusammen: Sei $\tau_{\text{rel}} \in (0, 1)$ eine erwünschte Reduktion in der Gradientennorm und τ_{abs} mit $1 \gg \tau_{\text{abs}} \geq \tau_{\text{rel}} > 0$ eine absolute Fehlerschranke, dann stoppt man das Verfahren, wenn

$$\|\nabla f(x^k)\| \leq \tau_{\text{rel}} \|\nabla f(x^0)\| + \tau_{\text{abs}}$$

erfüllt ist. Ist $\|\nabla f(x^0)\|$ groß, so ist $\tau_{\text{rel}} \|\nabla f(x^0)\|$ der dominante Term. Ist hingegen $\|\nabla f(x^0)\|$ klein, dann dominiert τ_{abs} die rechte Seite der obigen Ungleichung. \diamond

Bemerkung 5.9. (Approximationsfehler diskreter Ableitungen)

Wir nehmen nun an, dass f nur approximativ ausgewertet werden kann. Betrachte der Einfachheit halber die Raumdimension $n = 1$, dann ist

$$\tilde{f}(x) = f(x) + \tilde{\varepsilon}_f(x) \quad \text{mit } \tilde{\varepsilon}_f(x) \geq 0 \text{ und } |\tilde{\varepsilon}_f(x)| \leq \varepsilon_f \text{ für ein } \varepsilon_f > 0.$$

Bestimmen wir nun die Ableitungen numerisch, z.B. durch Vorwärtsdifferenzen, so ergibt sich

$$D_h^+ f(x) = \frac{\tilde{f}(x+h) - \tilde{f}(x)}{h}.$$

Wir schätzen die Ordnung der Differenz zwischen $D_h^+ f$ und f' ab: Nach dem Satz von Taylor existiert eine Zwischenstelle $\xi \in (x, x+h)$ mit

$$\begin{aligned} \|D_h^+ f(x) - f'(x)\| &= \left\| \frac{\tilde{f}(x+h) - \tilde{f}(x)}{h} - f'(x) \right\| \\ &= \left\| \frac{f(x+h) + \tilde{\varepsilon}_f(x+h) - f(x) - \tilde{\varepsilon}_f(x)}{h} - f'(x) \right\| \\ &\leq \left\| \frac{f(x+h) - f(x)}{h} - f'(x) \right\| + \frac{2\varepsilon_f}{h} \\ &\leq \left\| \frac{f(x) + f'(x)h + \frac{1}{2}f''(\xi)h^2 - f(x)}{h} - f'(x) \right\| + \frac{2\varepsilon_f}{h} \\ &= \frac{h}{2} \|f''(\xi)\| + \frac{2\varepsilon_f}{h} = \mathcal{O}\left(h + \frac{\varepsilon_f}{h}\right). \end{aligned}$$

Die Minimalstelle h^* der Fehlerfunktion $\text{err}_+(h) = h + \frac{\varepsilon_f}{h}$ erfüllt $\text{err}'_+(h^*) = 1 - \frac{\varepsilon_f}{(h^*)^2} = 0$. In der Tat ist $h^* = \sqrt{\varepsilon_f}$ Minimalstelle der Fehlerfunktion. Der Fehler ε_g in der Ableitung ist also von der Ordnung $\mathcal{O}(h^*) = \mathcal{O}(\sqrt{\varepsilon_f})$.

Verwenden wir nun abermals Vorwärtsdifferenzen zur Approximation der Hessematrix, so ergibt sich für den Fehler ε_H die Größenordnung $\mathcal{O}(\sqrt{\varepsilon_g}) = \mathcal{O}(\varepsilon_f^{1/4})$. Dies impliziert, dass Hessematrizen, basierend auf zweifacher numerischer Differenzierung, relativ ungenau sind – selbst wenn $\varepsilon_f = 10^{-16}$ die Größenordnung des **Maschinen-Epsilons** erreicht, folgt nur $\varepsilon_H \approx 10^{-4}$.

Im Falle **zentraler Differenzenapproximationen** ergibt sich ein besseres Ergebnis: $\varepsilon_H = \mathcal{O}(\varepsilon_f^{4/9})$. Betragen die Fehler in der ersten Ableitung $\varepsilon_f = 10^{-16}$, so erhalten wir so immerhin $\varepsilon_H \approx 10^{-7.1}$.

Konvergenz des Newton-Verfahrens ist nur zu erwarten, wenn $\varepsilon_g \rightarrow 0$ im Laufe der Iteration gilt. \diamond

Satz 5.10. (Konvergenz des lokalen Newton-Verfahrens bei Diskretisierungsfehlern)

Es seien die Bedingungen (5.5) erfüllt. Dann existieren Konstanten $\bar{K} > 0$, $\delta > 0$ und ein $\varepsilon > 0$, so dass für $x_a \in B(x^*, \delta)$ und $\|\varepsilon_H(x_a)\| < \varepsilon$ gilt

$$x_+ = x_a - (\nabla^2 f(x_a) + \varepsilon_H(x_a))^{-1} (\nabla f(x_a) + \varepsilon_g(x_a))$$

ist wohldefiniert, d.h. $(\nabla^2 f(x_a) + \varepsilon_H(x_a))$ ist regulär, und erfüllt

$$\|x_+ - x^*\| \leq \bar{K} (\|x_a - x^*\|^2 + \underbrace{\|\varepsilon_H(x_a)\|}_{\text{beeinflusst Konv.geschw.}} \|x_a - x^*\| + \underbrace{\|\varepsilon_g(x_a)\|}_{\text{Genauigkeit}}).$$

Bemerkung 5.11.

Wir betrachten das **Newton-ähnliche Verfahren**

$$x^{k+1} = x^k - \nabla^2 f(x^0)^{-1} \nabla f(x^k), \quad x^0 \text{ Startwert, } k = 0, 1, \dots \quad (5.7)$$

Im Gegensatz zum klassischen Newton-Verfahren ist es hier nicht notwendig, in jedem Schritt die Hessematrix $\nabla^2 f(x^k)$ aufzustellen. Es gelten

$$\varepsilon_H(x^k) = \nabla^2 f(x^0) - \nabla^2 f(x^k), \quad \|\varepsilon_H(x^k)\| \leq \varepsilon_H, \quad (5.8a)$$

$$\|\varepsilon_H(x^k)\| = \|\nabla^2 f(x^0) - \nabla^2 f(x^k)\| \leq \gamma \|x^0 - x^k\| \leq \gamma (\|x^0 - x^*\| + \|x^* - x^k\|). \quad (5.8b)$$

Die Konvergenz des Verfahrens (5.7) folgt aus Satz 5.10 mit $\varepsilon_g = 0$ und $\varepsilon_H = \mathcal{O}(\|x^0 - x^*\|)$. \diamond

Satz 5.12. (Lineare Konvergenz des Newton-ähnlichen Verfahrens)

Es sei (5.5) erfüllt. Dann existieren Konstanten $K \in (0, 1)$ und $\delta > 0$, so dass für $x^0 \in B(x^*, \delta)$ gilt: Die Folge der Iterierten $(x^k)_{k \in \mathbb{N}}$, erzeugt durch das Verfahren (5.7), konvergiert linear gegen x^* und man hat

$$\|x^{k+1} - x^*\| \leq K \|x^k - x^*\|.$$

Beweis.

Sei $\delta > 0$ so gewählt, dass Satz 5.10 angewendet werden kann. Mit den Bedingungen (5.8) folgt:

$$\begin{aligned} \|x^{k+1} - x^*\| &\leq \overline{K} (\|x^k - x^*\|^2 + \gamma (\|x^0 - x^*\| + \|x^* - x^k\|)) \|x^k - x^*\| \\ &= \overline{K} (\underbrace{\|x^k - x^*\|}_{\leq \delta} (1 + \gamma) + \gamma \underbrace{\|x^0 - x^*\|}_{\leq \delta}) \|x^k - x^*\| \leq \overline{K} (1 + 2\gamma) \delta \|x^k - x^*\|. \end{aligned}$$

Um Konvergenz zu garantieren, verkleinere δ , sodass $\overline{K} (1 + 2\gamma) \delta < 1$ erfüllt ist. \square

5.3. Das inexakte Newton-Verfahren

Während beim klassischen Newtonverfahren das Update $x_+ = x_a + d_a$ in jedem einzelnen Schritt das (exakte) Lösen des Gleichungssystems $\nabla^2 f(x_a) d_a = -\nabla f(x_a)$ erfordert, verwendet man beim **inexakten Newton-Verfahren** eine approximative Richtung \tilde{d}_a , die mit geringerem Aufwand berechnet werden kann und für ein $\eta_a > 0$ die folgende Bedingung erfüllt:

$$\|\nabla^2 f(x_a) \tilde{d}_a + \nabla f(x_a)\| \leq \eta_a \|\nabla f(x_a)\|. \quad (5.9)$$

Wir wissen, dass $\nabla^2 f(x_a)$ positiv definit ist für x_a nahe x^* . Daher eignet sich zum Beispiel das **CG-Verfahren** (Verfahren der konjugierten Gradienten) zur iterativen Lösung von $\nabla^2 f(x_a) \tilde{d}_a = -\nabla f(x_a)$. Man spricht dann vom **Newton-CG-Verfahren**.

Satz 5.13. (Konvergenzverhalten des inexakten Newton-Verfahrens)

1. Es sei (5.5) erfüllt. Dann existieren eine Konstante $K \geq 0$ und ein Radius $\delta > 0$, so dass für alle Punkte $x_a \in B(x^*, \delta)$ mit zugehöriger Richtung \tilde{d} , welche (5.9) erfüllt, und Update $x_+ = x_a + \tilde{d}$ gilt:

$$\|x_+ - x^*\| \leq K (\|x_a - x^*\| + \eta_a) \|x_a - x^*\|.$$

2. Sei Voraussetzung (5.5) erfüllt. Dann existieren $\delta > 0$ und $\bar{\eta} \geq 0$, sodass die inexakte Newton-Iteration $x^{k+1} = x^k + \tilde{d}^k$ mit

$$\|\nabla^2 f(x^k) \tilde{d}^k + \nabla f(x^k)\| \leq \eta_k \|\nabla f(x^k)\| \quad \text{und} \quad (\eta_k)_{k \in \mathbb{N}} \subseteq [0, \bar{\eta}]$$

linear gegen x^* konvergiert.

Weiterhin gelten:

- a) Falls $\eta_k \xrightarrow{k \rightarrow \infty} 0$, dann ist die Konvergenz **superlinear**, d.h. $\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|x^{k+1} - x^*\|}{\|x^k - x^*\|} = 1$.
- b) Falls $\eta_k \leq K_\eta \|\nabla f(x^k)\|$ für ein $K_\eta > 0$ erfüllt ist, so ist die Konvergenz sogar quadratisch.

5.3.1. Das Newton-CG-Verfahren

Bezeichne $D_h^2 f(x; d)$ eine hinreichend genaue Approximation von $\nabla^2 f(x)d$, etwa eine Diskretisierung der zweiten Ableitung von f im Punkt x in Richtung d . Wir betrachten im Folgenden eine vorkonditionierte CG-Methode, welche mit einer Fehlermeldung abbricht, falls $\nabla^2 f(x)$ in Richtung d degeneriert, d.h. $d^T \nabla^2 f(x)d = 0$ gilt, oder d eine Richtung mit negativer Krümmung ist, d.h. $d^T \nabla^2 f(x)d < 0$ erfüllt ist.

Algorithmus 5.14 (Newton-CG-Verfahren)

Eingabe: Startpunkt $x^0 \in \mathbb{R}^n$, Toleranzen $\tau_{\text{rel}}, \tau_{\text{abs}} > 0$.

```

1: Setze  $r_0 = \|\nabla f(x^0)\|$  und  $k = 0$ .
2: while  $\|\nabla f(x^k)\| > \tau_{\text{rel}} r_0 + \tau_{\text{abs}}$  do
3:   Wähle Parameter  $\eta_k > 0$  und positiv definite Matrix  $W^k \in \mathcal{S}_n$ .
4:   Setze  $d^0 = 0$ ,  $r^0 = \nabla f(x^k)$ ,  $p^0 = -(W^k)^{-1} r^0$  und  $l = 0$ .
5:   while  $\|r^l\| > \eta_k \|\nabla f(x^k)\|$  do
6:     Bestimme  $w^l = D_h^2 f(x, p^l)$ .
7:     if  $(p^l)^T w^l = 0$  then
8:       return mit Fehlermeldung Indefinitheit.
9:     else if  $(p^l)^T w^l < 0$  then
10:      return mit Fehlermeldung Negative Krümmung.
11:     else
12:       Setze  $\alpha_l = \frac{(r^l)^T (W^k)^{-1} r^l}{(p^l)^T w^l}$ ,  $d^{l+1} = d^l + \alpha_l p^l$  und  $r^{l+1} = r^l + \alpha_l w^l$ .
13:       Setze  $\beta_{l+1} = \frac{(r^{l+1})^T (W^k)^{-1} r^{l+1}}{(r^l)^T (W^k)^{-1} r^l}$ ,  $p^{l+1} = -(W^k)^{-1} r^{l+1} + \beta_{l+1} p^l$  und  $l = l + 1$ .
14:     end if
15:   end while
16:   Bestimme Update  $x^{k+1} = x^k + d^k$ .
17:   if  $f(x^{k+1}) > f(x^k)$  then
18:     return mit Fehlermeldung Kein Abstieg.
19:   end if
20: end while

```

Wir werden im Kontext von Trust-Region-Verfahren sehen, wie im Fall negativer Krümmungen verfahren werden kann.

5.4. Das globalisierte Newton-Verfahren

5.4.1. Abstiegsverfahren

Bisher haben wir im Zusammenhang mit dem Newton-Verfahren *lokale Konvergenzaussagen* hergeleitet; wir mussten dabei stets voraussetzen, dass der Startpunkt x^0 hinreichend nahe beim Minimum x^* gewählt war. Um auf diese manchmal problematische Forderung verzichten zu können, führen wir *Globalisierungen* ein, welche die Startpunktwahl relaxieren.

Kann man sicherstellen, dass die **Newton-Iterationsmatrix** $\nabla^2 f(x^k)$ – oder eine entsprechende Approximation für diese – die Bedingung

$$\forall k \in \mathbb{N}, \forall d \in \mathbb{R}^n : c_1 \|d\|^2 \leq d^T \nabla^2 f(x^k) d \leq c_2 \|d\|^2$$

für gewisse Konstanten $c_1, c_2 > 0$ erfüllt, so ist d^k als Lösung von $\nabla^2 f(x^k) d^k = -\nabla f(x^k)$ eine gradien-tenähnliche Abstiegsrichtung. Eingesetzt in das Allgemeine Abstiegsverfahren 3.5, folgt dann die globale Konvergenz des **globalisierten Newton-Verfahrens**, d.h. der Startpunkt x^0 kann dann beliebig gewählt werden.

5.4.2. Die Trust-Region-Methode

Das klassische Newton-Verfahren könnte als Abstiegsverfahren mit gradien-tenähnlichen Richtungen aufgefasst werden (wobei das Problem der Schrittweitensuche entfällt), sofern sichergestellt wäre, dass alle Komponenten der Matrixfolge $(\nabla^2 f(x^k))_{k \in \mathbb{N}}$ positiv definit wären. Das Ziel der Trust-Region-Methode

besteht darin, das Verfahren des steilsten Abstiegs, welches keine Anforderungen an die zweiten Ableitungen stellt, in geeigneter Weise mit dem Newton-Verfahren, das höhere Konvergenzraten zur Verfügung stellt, zu verbinden. Wir verwenden dabei eine Umgebung, in der wir einem Modell von f vertrauen.

Sei m_a ein quadratisches Modell von f um x_a , gegeben durch

$$m_a(x) = f(x_a) + \nabla f(x_a)^T(x - x_a) + \frac{1}{2}(x - x_a)^T H_a(x - x_a),$$

wobei $H_a \in S_n$ eine Approximation oder gleich der Hessematrix $\nabla^2 f(x_a)$ ist. Weiter sei Δ der Radius einer Kugel um x_a , in welcher wir dem Modell von f trauen. Δ nennt man den **Trust-Region-Radius** und die Kugel $\mathcal{T}(\Delta) = \{x \in \mathbb{R}^n \mid \|x - x_a\| \leq \Delta\}$ **Trust-Region**. Die nächste Iterierte wird dann als approximative Minimalstelle von m_a in $\mathcal{T}(\Delta)$ gewählt. Das zugehörige **Trust-Region-Hilfsproblem** lautet daher

$$\min m_a(x_a + d) \quad \text{u.d.N.} \quad d \in \mathbb{R}^n \quad \text{und} \quad \|d\| \leq \Delta. \quad (5.10)$$

Bemerkung 5.15.

Eine einfache Idee zur Lösung des Hilfsproblems beruht auf dem Fixieren der Richtung gemäß des Verfahrens des steilsten Abstiegs unter Berücksichtigung des Trust-Regions. Seien x_a die aktuelle Iterierte und Δ_a der aktuelle Trust-Region-Radius. Der Versuchspunkt $x_V = x_V(t) = x_a - t_a \nabla f(x_a)$ ist dann definiert über die Minimalstelle t_a von

$$\min_{t \geq 0} \psi_a(t) = m_a(x_a - t \nabla f(x_a)) \quad \text{u.d.N.} \quad x_V(t) - x_a \in \mathcal{T}(\Delta_a).$$

Es gelten

$$\begin{aligned} \psi_a(t) &= f(x_a) - t \|\nabla f(x_a)\|^2 + \frac{t^2}{2} \nabla f(x_a)^T H_a \nabla f(x_a), \\ \psi'_a(t) &= -\|\nabla f(x_a)\|^2 + t \nabla f(x_a)^T H_a \nabla f(x_a) \\ \psi''_a(t) &= \nabla f(x_a)^T H_a \nabla f(x_a). \end{aligned}$$

Zur Bestimmung von t_a unterscheiden wir zwei Fälle (vgl. das Problem mit negativen Krümmungen beim Newton-CG-Verfahren 5.14):

1. $\nabla f(x_a)^T H_a \nabla f(x_a) \leq 0$: Offensichtlich wird die Trust-Region-Restriktion aktiv, d.h. x_V liegt auf dem Rand, da H_a negativ semidefinit.

$$\Delta_a = \|x_V(t_a) - x_a\| = t_a \|\nabla f(x_a)\| \quad \implies \quad t_a = \frac{\Delta_a}{\|\nabla f(x_a)\|}.$$

2. $\nabla f(x_a)^T H_a \nabla f(x_a) > 0$: Dann impliziert die Optimalitätsbedingung $\psi'(t_a) = 0$, dass t_a gegeben ist als

$$t_a = \frac{\|\nabla f(x_a)\|^2}{\nabla f(x_a)^T H_a \nabla f(x_a)}.$$

Sollte mit dieser Schrittweite die Trust-Region verlassen werden, wähle t_a aus 1.

Zusammenfassend setzen wir

$$t_a = \begin{cases} \frac{\Delta_a}{\|\nabla f(x_a)\|} & \text{falls } \nabla f(x_a)^T H_a \nabla f(x_a) \leq 0 \\ \min\left\{ \frac{\Delta_a}{\|\nabla f(x_a)\|}, \frac{\|\nabla f(x_a)\|^2}{\nabla f(x_a)^T H_a \nabla f(x_a)} \right\} & \text{falls } \nabla f(x_a)^T H_a \nabla f(x_a) > 0 \end{cases}.$$

Die Minimalstelle $x_V(t_a) := x_a - t_a \nabla f(x_a)$ des quadratischen Modells m_a in Richtung des negativen Gradienten heißt **Cauchy-Punkt** und wird mit x_a^{CP} bezeichnet. Man kann zeigen, dass der Cauchy-Punkt Voraussetzung 5.16 erfüllt. Die Verwendung des Cauchy-Punktes führt zwar zu globaler Konvergenz, aber unter Umständen ist die Konvergenzgeschwindigkeit lokal nur linear. Die sog. **dogleg-Technik** leistet einen „glatten“ Übergang von der Richtung des steilsten Abstiegs zur Newton-Richtung. Lokal liegt dann quadratische Konvergenz vor, wenn $H^k = \nabla^2 f(x^k)$, $k \in \mathbb{N}$, gilt. \diamond

Wir bezeichnen die Lösung von (5.10), die **Versuchslösung**, mit d_V und setzen $x_V = x_a + d_V$. Im Wesentlichen überprüft man, ob das quadratische Modell eine „gute“ Approximation von f in $\mathcal{T}(\Delta)$ ist. Dazu definiert man

$$\begin{aligned} \text{ared}_a &= f(x_a) - f(x_V) && \text{(tatsächliche Reduktion)} \\ \text{pred}_a &= m_a(x_a) - m_a(x_V). && \text{(erwartete Reduktion)} \end{aligned}$$

Es gilt:

$$\begin{aligned} \text{pred}_a &= m_a(x_a) - m_a(x_V) \\ &= f(x_a) - f(x_a) - \nabla f(x_a)^T(x_V - x_a) - \frac{1}{2}(x_V - x_a)^T H_a(x_V - x_a) \\ &= -\nabla f(x_a)^T(x_V - x_a) - \frac{1}{2}(x_V - x_a)^T H_a(x_V - x_a). \end{aligned}$$

Voraussetzung 5.16.

1. Es gibt ein $\sigma > 0$ mit

$$\text{red}_a = f(x_a) - m_a(x_V) = m_a(x_a) - m_a(x_V) \geq \sigma \|\nabla f(x_a)\| \min\{\|d_V\|, \|\nabla f(x_a)\|\}.$$

2. Es gibt ein $M > 0$ mit $\|d_V\| \geq \|\nabla f(x_a)\|/M$ oder $\|d_V\| = \Delta_a$. Gelten sowohl $\|H_a\| \leq M \neq 0$ als auch $H_a d_V = -\nabla f(x^k)$, so ergibt sich $\|d_V\| \geq \|\nabla f(x_a)\|/M$ sofort aus

$$M \|d_V\| \geq \|H_a\| \|d_V\| \geq \|H_a d_V\| = \|\nabla f(x^k)\|$$

und Division durch M .

◇

Sei $0 < \eta_1 < 1$ (z.B. $\eta_1 = 0.1$). Wir setzen $\varrho := \frac{\text{ared}_a}{\text{pred}_a}$ und gehen folgendermaßen vor.

1. Ist die Reduktion von f (beschrieben durch ared_a) klein im Verhältnis zur Reduktion von m_a ($\varrho \leq \eta_1$), so schließen wir, dass Δ zu groß gewählt ist. Wir verwerfen dann die Lösung d_V und verringern Δ_a . Dann lösen wir (5.10) noch einmal.
2. Im Fall von $\varrho > \eta_1$ akzeptieren wir die Lösung d_V und setzen $x_+ = x_a + d_V$. Der Trust-Region-Radius für die nächste Iteration wird dann abhängig von ϱ_a gesetzt: $\Delta_+ \geq \Delta$, wenn $\varrho \approx 1$ gilt, sonst $\Delta_+ \leq \Delta$. In jedem Fall wird $\Delta_+ \geq \Delta_{\min} > 0$ gewählt, wobei Δ_{\min} eine von der Iteration unabhängige untere Schranke für den Radius ist.

Wir geben nun einen Algorithmus an (vgl. [8, Algorithmen 14.3]). Dabei benötigen wir die folgende Bedingung, um die Konvergenz des Verfahrens zu garantieren: Es gibt von k unabhängige Konstanten $\alpha \in (0, 1]$ und $\beta \geq 1$ mit

$$\|d^k\| \leq \beta \Delta_k, \quad \text{pred}_k(d^k) = m_k(x^k) - m_k(x^k + d^k) \geq \alpha \text{pred}_k(d_c^k), \quad (5.11)$$

wobei d_c^k das Problem

$$\min m_k(x^k + d) \quad \text{u.d.N.} \quad d = -t \nabla f(x^k), \quad t \geq 0, \quad \|d\| \leq \Delta_k$$

löst (vgl. Bemerkung 5.15).

Der folgende globale Konvergenzsatz wird in [8, Sätze 4.10 und 4.11] bewiesen.

Satz 5.19.

Seien $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ stetig differenzierbar und nach unten beschränkt. Es gebe eine Konstante $C > 0$, so dass $\|H^k\| \leq C$ für alle $k \in \mathbb{N}$. Dann terminiert Algorithmus 5.17 nach endlich vielen Schritten oder jeder Häufungspunkt von $(x^k)_{k \in \mathbb{N}}$ ist ein stationärer Punkt von f . Ist weiter ∇f gleichmäßig stetig auf $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ mit $(x^k)_{k \in \mathbb{N}} \subset \Omega$, so folgt $\lim_{k \rightarrow \infty} \|\nabla f(x^k)\| = 0$.

Algorithmus 5.17 (Trust-Region-Verfahren)**Eingabe:** $\alpha \in (0, 1], \beta \geq 1, 0 < \eta_1 < \eta_2 < 1, 0 < \gamma_0 < \gamma_1 < 1 < \gamma_2$ und $\Delta_{\min} > 0$

- 1: Wähle Startwerte $x^0 \in \mathbb{R}^n$ und $\Delta^0 \geq \Delta_{\min}$;
- 2: **for** $k = 0, 1, \dots$ **do**
- 3: **if** $\nabla f(x^k) = 0$ **then**
- 4: **stop** und erhalte Lösung $\bar{x} := x^k \in \mathbb{R}^n$;
- 5: **else**
- 6: Bestimme eine Lösung d^k des TR-Hilfsproblems, welche (5.11) erfüllt;
- 7: Berechne $\varrho = \frac{f(x^k) - f(x^k + d^k)}{m_k(x^k) - m_k(x^k + d^k)}$;
- 8: **if** $\varrho_k > \eta_1$ **then**
- 9: $x^{k+1} = x^k + d^k$;
- 10: **else**
- 11: $x^{k+1} = x^k$;
- 12: **end if**
- 13: Bestimme Δ_{k+1} gemäß Algorithmus 5.18;
- 14: **end if**
- 15: **end for**

Algorithmus 5.18 (Trust-Region-Verfahren-Update)**Eingabe:** $\eta_1, \eta_2, \gamma_0, \gamma_1, \gamma_2, \varrho_k, \Delta_{\min}$ aus Algorithmus 5.17

- 1: **if** $\varrho_k \leq \eta_1$ **then**
- 2: $\Delta_{k+1} \in [\max(\Delta_{\min}, \gamma_0 \Delta_k), \max(\Delta_{\min}, \gamma_1 \Delta_k)]$
- 3: **else if** $\varrho_k \in (\eta_1, \eta_2]$ **then**
- 4: $\Delta_{k+1} \in [\max(\Delta_{\min}, \gamma_1 \Delta_k), \max(\Delta_{\min}, \Delta_k)]$
- 5: **else if** $\varrho_k > \eta_2$ **then**
- 6: $\Delta_{k+1} \in [\max(\Delta_{\min}, \Delta_k), \max(\Delta_{\min}, \gamma_2 \Delta_k)]$
- 7: **end if**

5.5. Quasi-Newton-Verfahren

Wir haben gesehen, dass das (klassische) Newton-Verfahren eine Reihe von Nachteilen hat:

- Zweite Ableitungen werden benötigt (Rechenaufwand).
- Positive Definitheit muss gesichert werden.
- $\mathcal{O}(n^3)$ Multiplikationen (Lösung des linearen Systems mit direktem Verfahren).

Quasi-Newton-Verfahren gleichen diese Nachteile teilweise aus:

- Zweite Ableitungen werden durch erste Ableitungen approximiert.
- Positive Definitheit bleibt bei einigen QN-Verfahren erhalten.
- $\mathcal{O}(n^2)$ Multiplikationen bei QN-Varianten, welche direkt $\nabla f(x^k)^{-1}$ approximieren.

H^k wird dabei von Iteration zu Iteration aufdatiert. Die allgemeine Grundstruktur ist wie folgt:

1. Wähle eine Richtung $d^k = -(H^k)^{-1} \nabla f(x^k)$.
2. Bestimme das Update $x^{k+1} = x^k + t_k d^k$ mit Schrittweitenstrategie.
3. Verwende x^k, x^{k+1} und H^k , um H^k zu H^{k+1} aufzudatieren.

Bemerkung 5.20. (Aufdatierungsformeln)

Seien $s_a = t_a d_a = -t_a H_a^{-1} \nabla f(x_a)$, $y_a = \nabla f(x_+) - \nabla f(x_a)$ und $x_+ = x_a + s_a$. Dann gilt

$$\begin{aligned}
 y_a &= \nabla f(x_+) - \nabla f(x_a) \\
 &= \nabla f(x_a) + \nabla^2 f(x_a)(x_+ - x_a) + \mathcal{O}(\|x_+ - x_a\|) - \nabla f(x_a) \\
 &= \nabla^2 f(x_a) s_a + \mathcal{O}(\|s_a\|).
 \end{aligned}$$

1. Eine nahe liegende Forderung für das Update H_+ von H_a ist die **QN-Bedingung** oder auch **Sekantenbedingung**

$$H_+ s_a = y_a. \quad (5.12)$$

Ein einfacher Ansatz für H_+ ist dann die **symmetrische Rang 1-Korrektur** $H_+ = H_a + \alpha u u^T$ für zu bestimmendes $\alpha \in \mathbb{R}$ und $u \in \mathbb{R}^n$. Einsetzen in die QN-Bedingung liefert $H_+ s_a = H_a s_a + \alpha u (u^T s_a) = y_a$, d.h. u ist proportional zu $y_a - H_a s_a$. Wähle daher $u = y_a - H_a s_a$ und berücksichtige die Länge im Parameter α : Aus $\alpha (u^T s_a) = 1$ folgt $\alpha = (y_a^T s_a - s_a^T H_a s_a)^{-1}$. Also lautet die Update-Formel für H :

$$H_+ = H_a + \frac{(y_a - H_a s_a)(y_a - H_a s_a)^T}{(y_a - H_a s_a)^T s_a}.$$

Die Rang-1-Korrektur hat aber zwei Nachteile: Die positive Definitheit von H geht meist verloren und $y_a - H_a s_a$ liegt nahe bei 0.

2. Flexibler sind **Rang 2-Korrekturen** $H_+ = H_a + \alpha u u^T + \beta v v^T$. Eingesetzt in die QN-Bedingung ergibt sich $H_+ s_a = H_a s_a + \alpha u (u^T s_a) + \beta v (v^T s_a) = y_a$. Die Vektoren u und v sind dann allerdings nicht mehr eindeutig bestimmt. Es bietet sich an, $u = y_a$ und $v = H_a s_a$ zu wählen (**Broyden/Fletcher/Goldfarb/Shanno**). Dann gilt

$$H_a s_a + \alpha y_a y_a^T s_a + \beta (H_a s_a)(H_a s_a)^T s_a = y_a \iff \alpha y_a (y_a^T s_a) + \beta H_a s_a (s_a^T H_a s_a) = y_a - H_a s_a$$

ergeben sich $\alpha (y_a^T s_a) = 1$ und $\beta (s_a^T H_a s_a) = -1$. Die **BFGS-Formel** zum Update der Hessematrix lautet dann

$$H_+ = H_a + \frac{y_a y_a^T}{y_a^T s_a} - \frac{H_a s_a (H_a s_a)^T}{s_a^T H_a s_a}.$$

3. Man kann auch die inverse Hessematrix $\nabla^2 f(x^k)^{-1}$ durch ein geeignetes B^k approximieren. Die QN-Bedingung lautet in dem Fall $B_+ y_a = s_a$. Verwenden wir die symmetrische Rang 2-Korrektur mit $u = s_a$ und $v = B_a y_a$ (**Davidon/Fletcher/Powell**), dann erhalten wir die (**DFP-Formel**)

$$B_+ = B_a + \frac{s_a s_a^T}{s_a^T y_a} - \frac{(B_a y_a)(B_a y_a)^T}{y_a^T B_a y_a}. \quad \diamond$$

Lemma 5.21. (Positive Definitheit des BFGS-Updates)

Seien $H_a \in \mathcal{S}_n$ positiv definit, $y_a^T s_a > 0$ und H_+ gemäß der BFGS-Formel bestimmt.

Dann ist H_+ symmetrisch und positiv definit.

Beweis.

Aus H_a positiv definit und $y_a^T s_a \neq 0$ folgt für alle Vektoren $z \neq 0$, dass

$$z^T H_+ z = z^T H_a z + \frac{z^T y_a y_a^T z}{y_a^T s_a} - \frac{z^T (H_a s_a)(H_a s_a)^T z}{s_a^T H_a s_a} = \frac{(z^T y_a)^2}{y_a^T s_a} + z^T H_a z - \frac{(z^T H_a s_a)^2}{s_a^T H_a s_a}$$

erfüllt ist. Da H_a symmetrisch und positiv definit ist, existiert $H_a^{1/2}$ mit $H_a = H_a^{1/2} H_a^{1/2}$. Damit gilt

$$\begin{aligned} z^T H_a s_a &= z^T H_a^{1/2} H_a^{1/2} s_a \leq \|H_a^{1/2} z\| \|H_a^{1/2} s_a\| \\ \implies (z^T H_a s_a)^2 &\leq \underbrace{\|H_a^{1/2} z\|^2}_{z^T H_a z} \underbrace{\|H_a^{1/2} s_a\|^2}_{s_a^T H_a s_a} \\ \implies z^T H_a z - \frac{(z^T H_a s_a)^2}{s_a^T H_a s_a} &\geq z^T H_a z - z^T H_a z = 0. \end{aligned}$$

Ferner gilt $z^T H_a z - \frac{(z^T H_a s_a)^2}{s_a^T H_a s_a} = 0$, wenn $H_a^{1/2} z$ und $H_a^{1/2} s_a$ linear abhängig sind. Da $H_a^{1/2}$ regulär ist, gilt in diesem Fall $z = \lambda s_a \neq 0$, d.h. $\lambda \neq 0$ (da nach Voraussetzung $y_a^T s_a > 0$). Also ist $z^T y_a = \lambda s_a^T y_a \neq 0$ und wir erhalten

$$z^T H_+ z = \frac{(z^T y_a)^2}{y_a^T s_a} > 0 \text{ für } H_a^{1/2} z = \lambda H_a^{1/2} s_a \quad \text{und} \quad z^T H_+ z > \frac{(z^T y_a)^2}{y_a^T s_a} \geq 0 \text{ sonst.} \quad \square$$

Bemerkung 5.22.

Die Bedingung $y_a^T s_a > 0$ ist realistisch. Für quadratische Probleme von der Form $f(x) = \frac{1}{2}x^T Gx + g^T x + b$ mit symmetrischer, positiv definiter Hessematrix G gilt die Beziehung

$$y_a^T s_a = (\nabla f(x_+) - \nabla f(x_a))^T (x_+ - x_a) = (x_+ - x_a)^T G(x_+ - x_a) > 0 \quad \text{für } x_+ \neq x_a.$$

Für allgemeine Probleme wird $y_a^T s_a > 0$ durch Verwendung von Schrittweitenstrategien (Wolfe-Powell) sichergestellt. \diamond

Algorithmus 5.23 (Globalisiertes BFGS-Verfahren)

Eingabe: $\alpha \in (0, \frac{1}{2})$, $\rho \in (\alpha, 1)$, $x^0 \in \mathbb{R}^n$ und $H_0 \in \mathbb{R}^{n \times n}$ symmetrisch, positiv definit;

- 1: **if** $\nabla f(x^0) = 0$ **then**
- 2: **stop**
- 3: **else**
- 4: **for** $k = 0, 1, \dots$ **do**
- 5: Berechne die Suchrichtung $d^k = H_k^{-1} \nabla f(x^k)$;
- 6: Bestimme die Schrittweite $t_k > 0$ mit Hilfe der WOLFE-POWELL-Regel;
- 7: Setze $x^{k+1} = x^k + t_k d^k$;
- 8: **if** $\nabla f(x^{k+1}) = 0$ **then**
- 9: **stop**
- 10: **end if**
- 11: Setze $s^k = x^{k+1} - x^k$, $y^k = \nabla f(x^{k+1}) - \nabla f(x^k)$ und berechne

$$H_{k+1} = H_k + \frac{y^k (y^k)^T}{(y^k)^T s^k} - \frac{H_k s^k (H_k s^k)^T}{(s^k)^T H_k s^k};$$

- 12: **end for**
- 13: **end if**

Zunächst einmal stellen wir fest, dass $(y^k)^T s^k > 0$ durch die WOLFE-POWELL-Regel garantiert ist.

Lemma 5.24.

Sei $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ differenzierbar. Ist H_k positiv definit und genügt die Schrittweite $t_k > 0$ der WOLFE-POWELL-Bedingung, so gilt $(y^k)^T s^k > 0$.

Beweis.

Aus der WOLFE-POWELL-Regel und $d^k = -(H^k)^{-1} \nabla f(x^k)$ folgt

$$\begin{aligned} (y^k)^T s^k &= (y^k)^T (t_k d^k) = t_k (\nabla f(x^{k+1})^T d^k - \nabla f(x^k)^T d^k) \\ &\geq t_k (\underbrace{\rho \nabla f(x^k)^T d^k}_{>0} - \nabla f(x^k)^T d^k) = t_k \underbrace{(1 - \rho) \nabla f(x^k)^T H_k^{-1} \nabla f(x^k)}_{>0} > 0 \end{aligned}$$

was zu zeigen war. \square

Satz 5.25.

Der Punkt x^* erfülle die hinreichende Optimalitätsbedingung zweiter Ordnung. Erzeugt Algorithmus 5.23 eine Folge $(x^k)_{k \in \mathbb{N}}$, die gegen x^* konvergiert, und gilt $\lim_{k \rightarrow \infty} \|H_k - H_{k+1}\| = 0$, so erfüllen die H_k die DENNIS-MORE-Bedingung und (x^k) konvergiert q -superlinear gegen x^* .

Beweis.

TAYLOREntwicklung und die Quasi-NEWTON-Bedingung $H_{k+1}d^k = y^k$ ergeben

$$\begin{aligned} \|(H_k - \nabla^2 f(x^k))d^k\| &\leq \|(H_k - H_{k+1})d^k\| + \|(H_{k+1} - \nabla^2 f(x^k))d^k\| \\ &\leq \underbrace{\|H_k - H_{k+1}\|}_{\rightarrow 0 \text{ (} k \rightarrow \infty)} \|d^k\| + \|\nabla f(x^{k+1}) - \nabla f(x^k) - \nabla^2 f(x^k)d^k\| \\ &= \mathcal{O}(\|d^k\|). \end{aligned}$$

Damit folgt die Aussage aus der Dennis-Moré-Bedingung. □

Bemerkung 5.26.

Ist $\|H_0 - \nabla^2 f(x^k)\|$ hinreichend klein, so kann die Konvergenz von Algorithmus 5.23 für Startwerte, die ebenfalls hinreichend nahe an x^* liegen, gezeigt werden. ◇

Index

- Abstiegsrichtung, 11
- Abstiegsverfahren, 11
- Algorithmus
 - Abstiegs-, 12
 - Armijo-, 13
 - Grad-, 14
 - Newton-CG-, 22
 - Trust-Region-, 24
- Armijo-Regel, 13
- Bedingung erster Ordnung, 5
- Bedingung zweiter Ordnung, 5, 6
- BFGS-Formel, 26
- Cauchy-Punkt, 25
- CG-Verfahren, 22
- Definitheit der Hessematrix, 5
- DFP-Formel, 26
- dogleg-Technik, 25
- Fehlerfunktion, 20
- Fehlerschranke
 - absolute, 20
 - relative, 20
- globalisiertes Newton-Verfahren, 23
- Gradient, 4
- gradientenähnliche Richtung, 13
- gradientenähnliches Verfahren, 11
- Gradientenverfahren, 11, 17
- Hessematrix, 5
- Konvergenzordnung, superlineare, 22
- konvex
 - gleichmäßig, 7
 - strikt, 7
- konvexe Funktion, 7
- konvexe Menge, 7
- Maschinen-Epsilon, 21
- Maximalstelle
 - globale, 3
 - lokale, 3
 - strikte globale, 3
 - strikte lokale, 3
- Minimalstelle
 - globale, 3
 - lokale, 3
 - strikte globale, 3
 - strikte lokale, 3
- Minimum
 - globales, 3
 - lokales, 3
 - striktes globales, 3
 - striktes lokales, 3
- Modell, 15
- Modell, polynomiales, 15
- Modul, 7
- Nebenbedingung, 3
- Newton-CG-Verfahren, 22
- Newton-Iterationsmatrix, 23
- Newton-Schritt, 19
- Newton-Verfahren, 19
 - inexaktes, 21
- Optimalitätskriterien, 5
- Optimierungsproblem
 - diskretes, 3
 - endlichdimensionales, 3
 - kombinatorisches, 3
 - nicht-differenzierbares, 3
 - restringiertes, 3
 - stetiges, 3
 - unrestringiertes, 3
- QN-Bedingung, 26
- QN-Verfahren, 26
- Rang 1-Korrektur, symmetrische, 26
- Rang 2-Korrekturen, 26
- Reduktion
 - erwartete, 23
 - tatsächliche, 23
- Restriktion
 - Ganzzahligkeits-, 3
 - Gleichungs-, 3
 - Ungleichungs-, 3
- Sattelpunkt, 5
- Schrittweite, 13
- Schrittweitenstrategie, 11
- Schrittweitenstrategien, 13
- Sekantenbedingung, 26
- Spektralnorm, 5
- stationärer Punkt, 4
- steilster Abstieg, 11
- Trust-Region, 23
- Trust-Region-Hilfsproblem, 23
- Trust-Region-Radius, 23
- Versuchslösung, 23
- Vorwärtsdifferenz, 20
- Winkelbedingung, 12
- Wolfe-Powell-Regel, 15
- Wolfe-Powell-Regel, strenge, 16
- zentrale Differenz, 21
- Zielfunktion, 3
- Zulässigkeitsbereich, 3

Literaturverzeichnis

- [1] Boyd, S. & Vandenberghe, L.: *Convex Optimization*. Cambridge University Press, 2004.
- [2] Geletu, A.: *Solving Optimization Problems using the Matlab Optimization Toolbox*. Vorlesungsskript Technische Universität Ilmenau, 2007.
- [3] Harbrecht, H.: *Nichtlineare Optimierung*. Vorlesungsskript Universität Stuttgart, 2011.
- [4] Hintermüller, M.: *Nonlinear Optimization*. Vorlesungsskript Universität Berlin, 2010.
- [5] Kelley, C. T.: *Iterative Methods for Optimization*. SIAM Frontiers in Applied Mathematics, 1999.
- [6] Luik, E.: *Numerik I*. Vorlesungsskript Universität Konstanz, 2010.
- [7] Nocedal, J. & Wright, S. J.: *Numerical Optimization*. Springer Series in Operations Research, 1999.
- [8] Ulbrich, M. & Ulbrich, S.: *Nichtlineare Optimierung*. Birkhäuser Verlag, 2012.
- [9] Volkwein, S.: *Numerische Verfahren der restringierten Optimierung*. Vorlesungsskript Universität Graz, 2009.
- [10] Werner, J.: *Optimierung*. Vorlesungsskript Universität Hamburg, 2008.