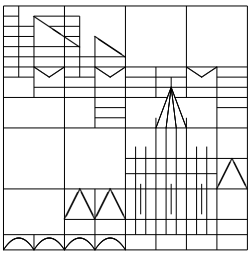
Skript zur Vorlesung

Optimierung

Sommersemester 2010

Johannes Schropp



Universität Konstanz

Fachbereich Mathematik und Statistik

Stand: 16. Juli 2010

Kapitel I: Optimierungsaufgaben und Optimierungskriterien

1 Einführende Beispiele und Problemstellung

Beispiel 1.1
Betrachte den Prozess

$$W \xrightarrow{E} P$$

d.h. das Substrat W wird mit Hilfe des Enzyms E in ein Produkt P umgewandelt. Die Geschwindigkeit v dieser Umwandlung hängt gemäß der Michaelis-Menten-Theorie aus der Biologie wie folgt von w ab

$$v = \frac{\mu w}{K + w} = g(\mu, K, w)$$

mit $w \mathrel{\widehat{=}} [W]$ Konzentration von W. Es ist

$$g(\mu, K, K) = \frac{\mu}{2}\,, \quad \lim_{w \to \infty} g(\mu, K, w) = \mu\,.$$

μ bezeichnet die maximal mögliche Geschwindigkeit und K die halbmaximale Rate. Die Geschwindig-

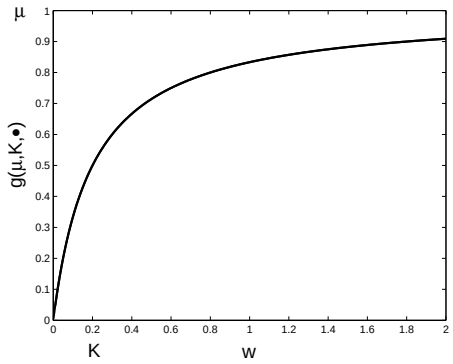


Abbildung 1: $g(\mu, K, w)$ für $K = 0.2$ und $\mu = 1$.

keit v kann nun in Abhängigkeit von w gemessen werden, d.h. wir erhalten die Messwerte $(v_i, w_i), i = 1, ..., m$.

Ziel: *Bestimme die Parameter (μ, K) aus den Messdaten. Setze dazu $x = (x_1, x_2) = (\mu, K)$*

$$f(x_1, x_2) = \sum_{i=1}^{m} \left(g(w_i, x_1, x_2) - v_i\right)^2$$

und bestimme ein x^* mit

$$f(x^*) \leq f(x) \text{ für } x \in \mathbb{R}^2, x \geq 0.$$

Beispiel 1.2 (Gleichgewichtslagen eines Ringelwurms)
Verwende als Modell eines Ringelwurms eine Folge von N aneinandergereihten Segmenten. Als Segmentform verwenden wir symmetrische Pyramidenstümpfe Aufgrund der Symmetrie wird das Aussehen des Ringelwurms mit N Segmenten vollständing durch den Vektor

$$x = (b_1, c_1, b_2, c_2, ..., b_N, c_N, b_{n+1}) \in \mathbb{R}^{2N+1}$$

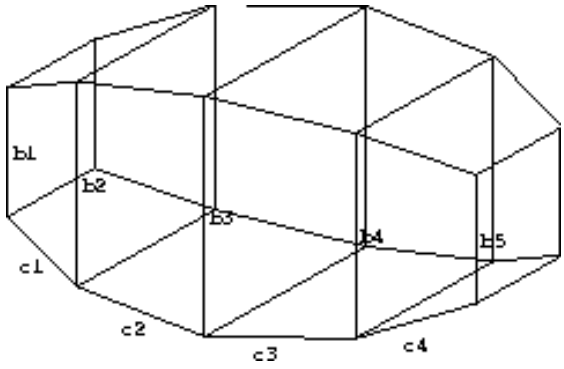


Abbildung 2: Symmetrisches Modell für $N = 4$.

beschrieben. Dabei bezeichnet $c_i, i = 1, .., N$ die Länge des Längsmuskels des i-ten Segmentes und $b_i, i = 1, ..., N$ die Länge des Ringmuskels des i-ten Segmentes. b_{N+1} bezeichnet die Länge des abschließenden Ringmuskels.

Das Volumen des Ringelwurms ergibt sich zu

$$V(x) = \frac{1}{3} \sum_{i=1}^{N} \left[c_i^2 - \frac{(b_i - b_{i+1})^2}{2} \right]^{1/2} \cdot (b_i^2 + b_i b_{i+1} + b_{i+1}^2) \, .$$

Das N-segmentige Modell hat $8N + 4$ Kanten, die Längs- bzw. Ringmuskeln entsprechen. Wir modellieren alle Muskeln als Federn. Die in einer Feder mit Ruhelage L_0 in Abhängigkeit der Federkonstante α enthaltene Energie ist

$$P_\varepsilon(L, \alpha) = \int_{L_0}^{L} F_\varepsilon(l, \alpha) \, dl$$

mit dem Kraftgesetz

$$F_\varepsilon(L, \alpha) = \frac{\alpha}{\varepsilon} \tan(\varepsilon(L - L_0)) \, , \quad L_0 - \frac{\pi}{2\varepsilon} < L < L_0 + \frac{\pi}{2\varepsilon} \, .$$

Mit dem Superpositionsprinzip erhält man für den Ringelwurm im Zustand x mit den Federkonstanten β und γ die Energie

$$E(x) = 4 \left(\sum_{j=1}^{N+1} P_\varepsilon(b_j, \beta) + \sum_{j=1}^{N} P_\varepsilon(c_j, \gamma) \right) \, .$$

Die Gleichgewichtslagen eines Ringelwurms mit vorgegebenen Volumen V_0 ergeben sich nun als Zustände x^* mit minimaler Energie $E(x^*)$ unter der Nebenbedingung $V(x^*) = V_0$. x^* löst also die Aufgabe:

$$\textit{Minimiere } E(x) \textit{ unter der Nebenbedingung } V(x) - V_0 = 0.$$

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

$$(I) = \begin{cases} \textit{Sei } D \subset \mathbb{R}^N \textit{ offen }, f : D \to \mathbb{R}, g : D \to \mathbb{R}^l \textit{ und } k : D \to \mathbb{R}^q. \textit{ Setze} \\ \qquad Z = \{x \in D \,|\, g_i(x) = 0, i = 1, ..., l \textit{ und } k_i(x) \geq 0, i = 1, ..., q\} \, . \\ \textit{Gesucht ist } x^* \in Z \textit{ mit } f(x^*) \leq f(x), x \in Z. \end{cases}$$

Bemerkung 1.3

a.) Ist $l = q = 0$, d.h. treten g und k nicht auf, so heißt das Problem **unrestringiert**, andernfalls **restringiert**.

b.) Z heißt **Zulässigkeitsbereich** und f nennt man die $Zielfunktion$.

c.) Soll f maximiert werden, so ist dies gleichbedeutend damit, dass $-f$ minimiert wird.

d.) Ist $l, q > 0$, so nennt man $g(x) = 0$ die **Gleichungs-** und $k(x) \geq 0$ die **Ungleichheitsrestriktionen**.

Definition 1.4
Vorgelegt sei (I). $x^* \in D$ heißt

a.) ***globale Minimalstelle*** *von f, falls $f(x^*) \leq f(x)$ für alle $x \in Z$. $f(x^*)$ heißt dann* ***globales Minimum****.*

b.) ***strikte globale Minimalstelle*** *von f, falls $f(x^*) < f(x)$ für alle $x \in Z \setminus \{x^*\}$. $f(x^*)$ heißt dann* ***striktes globales Minimum****.*

c.) ***lokale Minimalstelle*** *von f, wenn es eine Umgebung U von $x^* \in \mathbb{R}^N$ gibt mit $f(x^*) \leq f(x)$ für alle $x \in U \cap Z$. $f(x^*)$ heißt dann* ***lokales Minimum****.*

d.) ***strikte lokale Minimalstelle*** *von f, wenn es eine Umgebung U von $x^* \in \mathbb{R}^N$ gibt mit $f(x^*) < f(x)$ für alle $x \in (U \cap Z) \setminus \{x^*\}$. $f(x^*)$ heißt dann* ***striktes lokales Minimum****.*

Bemerkung 1.5
Ein Punkt x^* ist genau dann (globale, strikte globale, lokale, strikte lokale) Maximalstelle von f, wenn x^* (globale, strikte globale, lokale, strikte lokale) Minimalstelle von $-f$ ist.

Definition 1.6
Sei $D \subset \mathbb{R}^N$ offen und sei $h \in C^1(D, \mathbb{R})$. Ein Punkt $x^* \in D$ heißt ***stationärer Punkt*** *von h, falls $\nabla h(x^*) = 0$.*

2 Die Kuhn-Tucker Theorie

2.1 Optimalitätskriterien für lokale Minimalstellen

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

Betrachte zunächst das **freie Minimierungsproblem**:

$$\textit{(II)} = \left\{ \quad \textit{Sei } D \subset \mathbb{R}^N \textit{ offen }, f : D \to \mathbb{R}. \textit{ Gesucht ist } x^* \in D \textit{ mit } f(x^*) \leq f(x) \textit{ für } x \in U(x^*). \right.$$

Aus der Analysis II sind die folgenden Sätze bekannt.

Satz 2.1 (Notwendige Bedingungen für lokale Minima)
Vorgelegt sei (II).

a.) Ist $f \in C^1(D, \mathbb{R})$ und ist x^* ein lokales Minimum von f, so gilt $\nabla f(x^*) = 0$, d.h. x^* ist stationärer Punkt von f.

b.) Ist $f \in C^2(D, \mathbb{R})$ und ist x^* lokales Minimum von f, so gilt $\nabla f(x^*) = 0$ und $\nabla^2 f(x^*)$ positiv semidefinit.

Bemerkung 2.2
Die Bedingungen aus Satz 2.1 sind nicht hinreichend dafür, dass x^* lokales Minimum von f ist. Betrachte z.B. $f(x_1, x_2) = x_1^2 - x_2^4$, $x^* = (0, 0)$. Dann gilt:

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

positiv semidefinit, aber x^* ist kein lokales Minimum.

Satz 2.3 (Hinreichende Bedingungen für lokale Minima)
Vorgelegt sei (II) mit $f \in C^2(D, \mathbb{R})$. Gelten

a.) $\nabla f(x^*) = 0$

b.) $\nabla^2 f(x^*)$ *positiv definit*

für ein $x^* \in D$, so ist x^* strikte lokale Minimalstelle von f.

Bemerkung 2.4
Die Bedingungen aus Satz 2.3 sind nicht notwendig dafür, dass x^* striktes lokales Minimum von f ist.

Betrachte z.B.

$$f(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^4, \quad x^* = (0, 0).$$

Dann gilt

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

d.h. $\nabla^2 f(x^*)$ ist nicht positiv definit, aber x^* ist striktes lokales Minimum von f.

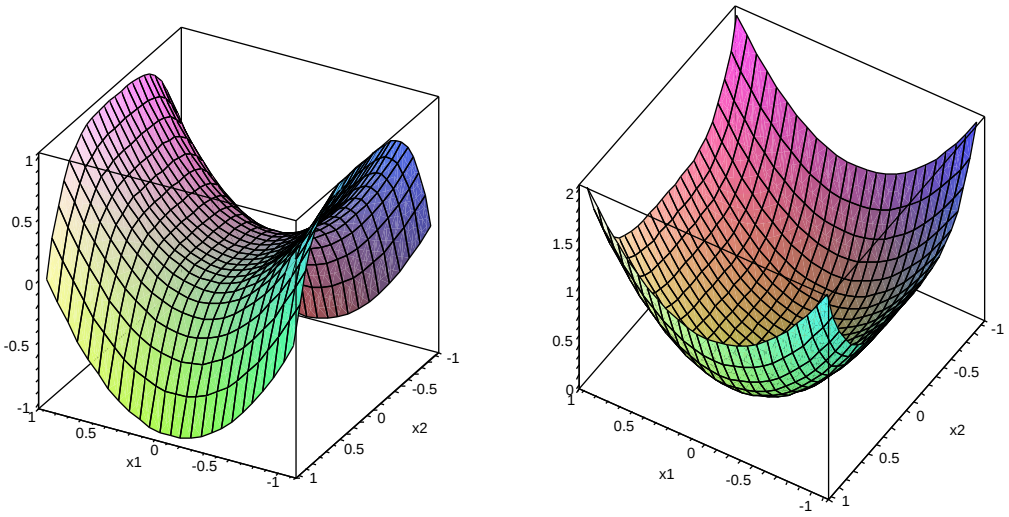


Abbildung 3: Links: $f(x_1, x_2) = x_1^2 - x_2^4$. Rechts: $f(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^4$.

2.2 Tangenten und linearisierte Richtungen

Im Folgenden wollen wir notwendige und hinreichende Bedingungen für lokale Minima für restringierte Optimierungsprobleme herleiten. Dazu betrachten wir wieder die Aufgabe:

$$(III) = \begin{cases} \text{Sei } D \subset \mathbb{R}^N \text{ offen und seien } f \in C^2(D,\mathbb{R}), g \in C^2(D,\mathbb{R}^l) \text{ und } k \in C^2(D,\mathbb{R}^q). \text{ Es sei} \\ \qquad Z = \{x \in D \,|\, g(x) = 0 \text{ und } k(x) \geq 0\} \\ \text{abgeschlossen und nicht-leer. Gesucht wird ein } x^* \in Z \text{ mit} \\ \qquad f(x^*) \leq f(x) \quad \text{für alle } x \in U(x^*) \cap Z\,. \end{cases}$$

x^* heißt **lokales Minimum** von f unter den Nebenbedingungen $g(x) = 0$ und $k(x) \geq 0$. Z heißt Menge der zulässigen Punkte. Ziel dieses Abschnittes ist es, lokale Minima x^* durch analytische Bedingungen zu charakterisieren.

Definition 2.5

a.) *Sei $\tilde{x} \in Z$. Dann heißt*

$$\mathcal{A}_{\tilde{x}} = \{i \in \{1,...,q\} \,|\, k_i(\tilde{x}) = 0\}$$

*Menge der bei $\tilde{x} \in Z$ **aktiven Ungleichheitsrestriktionen**.*

b.) *$\tilde{x} \in Z$ heißt **regulär**, falls die Vektoren*

$$\nabla g_1(\tilde{x}), ..., \nabla g_l(\tilde{x}), \nabla k_i(\tilde{x}), i \in A_{\tilde{x}}$$

linear unabhängig sind.

Definition 2.6

*Sei wieder $x \in Z$. Eine Folge $(y_k)_{k\in\mathbb{N}} \in Z^{\mathbb{N}}$ mit $\lim\limits_{k\to\infty} y_k = x$ heißt **zulässige Folge**. d heißt **Tangente** in x, falls eine zulässige Folge und eine Folge $(t_k)_{k\in\mathbb{N}}, t_k > 0, \lim\limits_{k\to\infty} t_k = 0$ existieren mit*

$$\lim_{k\to\infty} \frac{y_k - x}{t_k} = d\,.$$

*Die Menge aller Tangenten zu Z in x heißt **Tangentenkegel** und wird mit $T_Z(x)$ bezeichnet.*

Bemerkung 2.7

Eine Menge X heißt **Kegel**, falls $0 \in X$ und falls

$$x \in X \;\Rightarrow\; \alpha x \in X \;, \alpha > 0$$

gilt.

Definition 2.8

Sei $x \in Z$ und sei $\mathcal{A}_x$ die Menge der bei x aktiven Ungleichheitsrestriktionen. Dann heißt

$$F(x) = \{d \in \mathbb{R}^N \,|\, d^T \nabla g_i(x) = 0\,, i = 1,...,l \text{ und } d^T \nabla k_i(x) \geq 0,\, i \in \mathcal{A}_x\}$$

Menge der bei x erlaubten linearisierten Richtungen.

Erläuterungen zum Tangentenkegel $T_Z(x)$ und der erlaubten linearisierten Richtungen $F(x)$:

Beispiel 2.9
Sei $f(x_1, x_2) = x_1 + x_2$ und $g(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2 - 2 = 0$. Der Zulässigkeitsbereich lautet

$$Z = \{(x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2 \,|\, x_1^2 + x_2^2 - 2 = 0\}$$

Betrachte $\overline{x} = (-\sqrt{2}, 0)$, dann lautet $\nabla g(-\sqrt{2}, 0) = \begin{pmatrix} -2\sqrt{2} \\ 0 \end{pmatrix}$.

Eine zulässige Folge y_k ist $y_k = \begin{pmatrix} -\sqrt{2 - (\alpha_k)^2} \\ -\alpha_k \end{pmatrix}$, $\alpha_k \to 0$ für $k \to \infty$ mit $\alpha_k > 0$. Setze $t_k =$

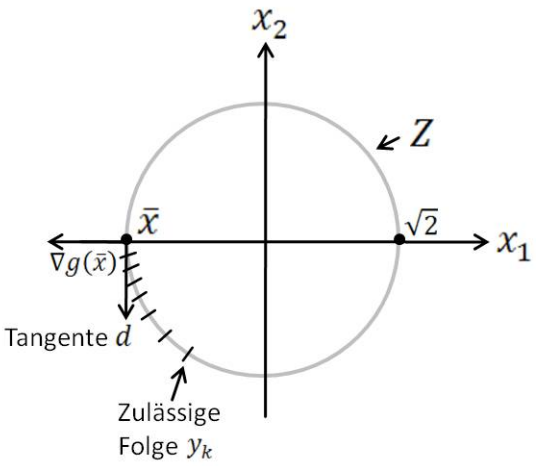


Abbildung 4:

$\alpha_k > 0, t_k \to 0$ für $k \to \infty$ und finde

$$\frac{y_k - \overline{x}}{t_k} = \frac{\begin{pmatrix} y_1^k \\ y_2^k \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} -\sqrt{2} \\ 0 \end{pmatrix}}{\alpha_k} = \frac{\begin{pmatrix} -\sqrt{2 - \alpha_k^2} + \sqrt{2} \\ -\alpha_k \end{pmatrix}}{\alpha_k} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\alpha_k}(\sqrt{2} - \sqrt{2 - \alpha_k^2}) \\ -1 \end{pmatrix}.$$

Sei $h(x) = \frac{\sqrt{2} - \sqrt{2 - x^2}}{x}$.

$$\lim_{x \to 0} h(x) = \lim_{x \to 0} \frac{-\frac{1}{2\sqrt{2-x^2}} \cdot 2x}{1} = \lim_{x \to 0} \frac{-2x}{2\sqrt{2 - x^2}} = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{y_k - \overline{x}}{t_k} = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix} =: d\,.$$

Ferner folgt $\nabla g(\overline{x})^T d = (-2\sqrt{2}, 0) \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix} = 0$, d.h. $d \in F(x)$.

Beispiel 2.10
Sei $f(x_1, x_2) = x_1 + x_2$ und $k(x_1, x_2) = 2 - x_1^2 - x_2^2 \geq 0$. Der Zulässigkeitsbereich lautet

$$Z = \{(x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2 \,|\, 2 - x_1^2 - x_2^2 \geq 0\}$$

Betrachte $\overline{x} = (-\sqrt{2}, 0)$. Wähle eine zulässige Folge auf einer Geraden nach $\overline{x}$:

$$y_k = \begin{pmatrix} -\sqrt{2} \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{k} \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \end{pmatrix},$$

$w = \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^2$ mit $w_1 > 0$. Alle derartigen Folgen sind zulässig. Somit folgt

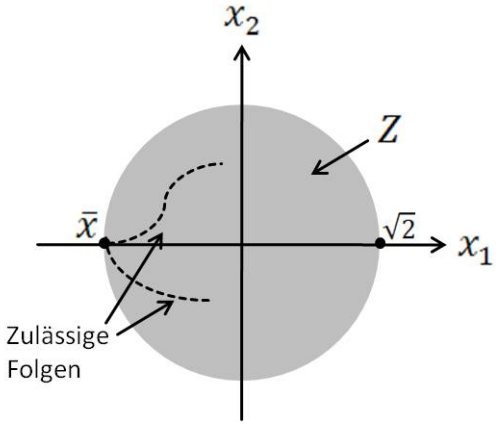


Abbildung 5:

$$y_k = \overline{x} + \frac{1}{k} w = \overline{x} + t_k s_k$$

mit $t_k = \frac{1}{k}$, $\lim\limits_{k\to\infty} t_k = 0, s_k = w$, $\lim\limits_{k\to\infty} s_k = w$ und man findet

$$T_Z(-\sqrt{2}, 0) = \{w \in \mathbb{R}^2 \,|\, w_1 \geq 0\}\,.$$

Für die erlaubten linearen Richtungen in x^* gilt nach Definition

$$F(x^*) = \{d \in \mathbb{R}^2 \,|\, d^T \nabla k(\overline{x}) \geq 0\}\,.$$

Mit $\nabla k(-\sqrt{2}, 0) = \begin{pmatrix} 2\sqrt{2} \\ 0 \end{pmatrix}$ folgt

$$F(-\sqrt{2}, 0) = \{d \in \mathbb{R}^2 \,|\, d^T \begin{pmatrix} 2\sqrt{2} \\ 0 \end{pmatrix} \geq 0\} = \{d \in \mathbb{R}^2 \,|\, d_1 \geq 0\} = T_Z(-\sqrt{2}, 0)\,.$$

In diesem Beispiel stimmen $F(x)$ und $T_Z(x)$ offensichtlich überein.

Lemma 2.11

a.) *Sei $x \in Z$, so gilt*

$$T_Z(x) \subset F(x)\,.$$

b.) *Ist $x \in Z$ regulär, so folgt*

$$T_Z(x) = F(x)\,.$$

Beweis:

a.) Sei $(y_k)_{k\in\mathbb{N}}$ eine zulässige Folge, d.h. $\lim\limits_{k\to\infty} y_k = x$ und sei $(t_k)_{k\in\mathbb{N}}, t_k > 0$, $\lim\limits_{k\to\infty} t_k = 0$ mit $s_k = \frac{y_k - x}{t_k}$, $\lim\limits_{k\to\infty} s_k = d$, d.h. $d \in T_Z(x)$. Dann gilt mit dem Mittelwertsatz

$$0 = g_i(y_k) - g_i(x) = t_k s_k^T \nabla g_i(\eta_i^k)\,, \quad \eta_i^k = x + \theta_i^k (y_k - x)\,,\ \theta_i^k \in [0,1]\,, i = 1, ..., l \tag{1}$$

$$0 \leq \underbrace{k_i(y_k)}_{\geq 0 \text{ da } y_k \in Z} - \underbrace{k_i(x)}_{=0 \text{ da } i \in \mathcal{A}_x} = t_k s_k^T \nabla k_i(\eta_{l+i}^k)\,, \quad \eta_{l+i}^k = x + \theta_{l+i}^k (y_k - x)\,,\ \theta_{l+i}^k \in [0,1]\,, i \in \mathcal{A}_x\,. \tag{2}$$

Dividiert man in (1), (2) durch t_k und geht dann zum Grenzwert $k \to \infty$ über, so erhält man

$$0 = d^T \nabla g_i(x)\,, i = 1, ..., l\,, \qquad 0 \leq d^T \nabla k_i(x)\,, i \in \mathcal{A}_x$$

d.h. $d \in F(x)$.

b.) Sei $x \in Z$ und sei $H(z) = \begin{pmatrix} g(z) \\ k_i(z)\,, i \in \mathcal{A}_x \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{l+m}$, $m = \#\mathcal{A}_x$. Nach Voraussetzung hat dann $DH(x) \in \mathbb{R}^{l+m,N}$ den Rang $l + m$, d.h.

$$\dim(N(DH(x))) = N - \mathrm{rg}(DH(x)) = N - l - m\,,$$

wobei $N(DH)$ der Kern (Nullraum) der Abbildung $DH(x)$ ist. Sei nun $Z \in \mathbb{R}^{N,N-l-m}$ eine Matrix mit $R(Z) = N(DH(x))$, wobei $R(Z)$ das Bild von Z ist, d.h. die Spalten von Z bilden eine Basis des Nullraums von $DH(x)$. Sei nun $d \in F(x)$ beliebig. Zu zeigen: $d \in T_Z(x)$. Setze

$$R(z,t) = \begin{pmatrix} H(z) - tDH(x)d \\ Z^T(z - x - td) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}\,,$$

$R : D \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}^{l+m} \times \mathbb{R}^{N-l-m} = \mathbb{R}^N$ mit $D \subset \mathbb{R}^N$ offen und R zweimal stetig differenzierbar. Nach Konstruktion gilt

$$R(x,0) = \begin{pmatrix} H(x) \\ Z^T(x - x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}\,, \quad \frac{\partial R}{\partial z}(z,t) = \begin{pmatrix} DH(z) \\ Z^T \end{pmatrix} \quad \frac{\partial R}{\partial z}(x,0) = \begin{pmatrix} DH(x) \\ Z^T \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{N,N}$$

invertierbar nach Voraussetzung. Also existiert nach dem Satz über impliziten Funktionen eine Funktion $\varphi \in C^2(]-\varepsilon, \varepsilon[, \mathbb{R}^N)$ mit $\varphi(0) = x$ und

$$R(\varphi(t), t) = 0\,, \quad |t| < \varepsilon. \tag{3}$$

Sei nun $(t_k)_{k\in\mathbb{N}}$, $t_k \in]0, \varepsilon[$, $t_k \to 0$. Dann ist $(y_k)_{k\in\mathbb{N}}$, $y_k = \varphi(t_k)$ eine zulässige Folge, denn

$$\lim_{k\to\infty} y_k = \lim_{k\to\infty} \varphi(t_k) = \varphi(0) = x$$

und nach Konstruktion gilt

$$\begin{pmatrix} g(y_k) \\ k_i(y_k),\, i \in \mathcal{A}_x \end{pmatrix} = H(y_k) = t_k DH(x)d = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_m \end{pmatrix}$$

mit $\alpha_i \geq 0$ für $i = 1, ..., m$ da

$$DH(x) = \begin{pmatrix} \nabla g_1(x)^T \\ \vdots \\ \nabla g_l(x)^T \\ \nabla k_i(x)^T,\, i \in \mathcal{A}_x \end{pmatrix}$$

und $d \in F(x)$, d.h. $y_k \in Z$. Man beachte, dass gilt $k_i(y_k) > 0$ für $i \in \{1, ..., q\} \setminus \mathcal{A}_x$ da $k_i(x) > 0$ für $i \in \{1, ..., q\} \setminus \mathcal{A}_x$.

Außerdem folgt

$$\frac{y^k - x}{t_k} = \frac{\varphi(t_k) - \varphi(0)}{t_k} \to \varphi'(0)$$

für $k \to \infty$. Noch zu zeigen bleibt $\varphi'(0) = d$, denn dann folgt $d \in T_Z(x)$. Differentiation von (3) liefert

$$\frac{\partial R}{\partial z}(\varphi(t), t) \cdot \varphi'(t) + \frac{\partial R}{\partial t}(\varphi(t), t) = 0\,, \quad |t| < \varepsilon$$

und somit folgt mit $\varphi(0) = x$ sofort

$$\varphi'(0) = -\frac{\partial R}{\partial z}(x, 0)^{-1} \frac{\partial R}{\partial t}(x, 0)\,.$$

Finde

$$\frac{\partial R}{\partial t}(z, t) = \begin{pmatrix} -DH(x)d \\ -Z^T d \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} DH(x) \\ -Z^T \end{pmatrix} d = -\frac{\partial R}{\partial z}(x, 0)d$$

und erhalte

$$\varphi'(0) = -\frac{\partial R}{\partial z}(x, 0)^{-1} \left(-\frac{\partial R}{\partial z}(x, 0)\right) d = d\,.$$

□

Desweiteren benötigen wir noch ein fundamentales Resultat über Abstiegsrichungen von Lösungen von Optimierungsproblemen.

Lemma 2.12
Sei $x^* \in Z$ eine Lösung des Optimierungsproblems. Dann gilt

$$\nabla f(x^*)^T d \geq 0 \quad \forall d \in T_Z(x^*)\,.$$

Beweis: Sei $d \in T_Z(x^*)$ beliebig und sei $(y_k) \in Z^{\mathbb{N}}$ eine zulässige Folge, $(t_k)_{k\in\mathbb{N}}$, $t_k > 0$, $\lim\limits_{k\to\infty} t_k = 0$ mit

$$d_k = \frac{y_k - x}{t_k}\,, \quad \lim_{k\to\infty} d_k = d\,.$$

Nach Taylor und da x^* lokale Lösung gilt

$$0 \leq f(y_k) - f(x^*) = t_k d_k^T \nabla f(\eta_0^k)\,, \quad \eta_0^k = x^* + \theta_0^k(y_k - x^*),\ \theta_0^k \in [0, 1],\ k \in \mathbb{N}\,. \tag{4}$$

Division von (4) durch t_k und Grenzübergang $k \to \infty$ liefert

$$0 \leq d^T \nabla f(x^*)\,.$$

□

Der wichtigste Schritt auf dem Weg zur Charakterisierung notwendiger Bedingungen für eine lokale Lösung ist das Lemma von Farkas.

Lemma 2.13 (Farkas)
Sei der Kegel K definiert durch

$$K = \{By + Cw \,|\, y \geq 0\}$$

mit $B \in \mathbb{R}^{n,m}, C \in \mathbb{R}^{n,p}, y \in \mathbb{R}^m, w \in \mathbb{R}^p$ und sei $g \in \mathbb{R}^n$ beliebig. Dann gilt

- *entweder*

$$g \in K$$

- *oder*

$$\textit{es existiert ein } d \in \mathbb{R}^n \textit{ mit } g^T d < 0,\ B^T d \geq 0 \textit{ und } C^T d = 0.$$

Beweis: Wir zeigen zuerst, dass beide Bedingungen zugleich nicht wahr sein können. Sei $g \in K$, d.h. $g = By + Cw$ mit $y \geq 0$. Gilt überdies $d^T g < 0$, so folgt

$$0 > d^T g = d^T By + d^T Cw = \underbrace{(B^T d)}_{\geq 0}^T \underbrace{y}_{\geq 0} + \underbrace{(C^T d)}_{=0}^T w \geq 0$$

und damit der Widerspruch.

Wir zeigen nun, dass eine der beiden Alternativen eintritt. Konkret konstruieren wir d mit $g^T d < 0, B^T d \geq 0, C^T d = 0$ falls $g \notin K$.

Nach Konstruktion ist K abgeschlossen. Sei jetzt $\hat{s}$ die Lösung von

$$f(s) = \min\{||s - g||_2^2 \mid s \in K\}\,.$$

Da K abgeschlossen gilt $\hat{s} \in K$. K ist ein Kegel, da $0 \in K$ und $\hat{s} \in K \Rightarrow \alpha\hat{s} \in K$, $\alpha > 0$.

Betrachte jetzt

$$h(\alpha) = \min\{||\alpha\hat{s} - g||_2^2 \mid \alpha \geq 0\}\,. \tag{5}$$

Wegen $\alpha\hat{s} \in K$ für $\alpha \geq 0$ wird (5) minimiert für $\alpha = 1$ und es folgt

$$\frac{d}{d\alpha}||\alpha\hat{s} - g||^2_{2|\alpha=1} = \frac{d}{d\alpha}\left(\alpha^2\hat{s}^T\hat{s} - 2\alpha\hat{s}^T g + g^T g\right)_{|\alpha=1} = 0 = \left(-2\hat{s}^T g + 2\alpha\hat{s}^T\hat{s}\right)_{|\alpha=1} = -2\hat{s}^T g + 2\hat{s}^T\hat{s}$$

$$\iff \quad \hat{s}^T(\hat{s} - g) = 0\,.$$

Setze $d := \hat{s} - g$ und zeige die 'oder'-Alternative: Es gilt: $d \neq 0$, da $\hat{s} \in K$ und $g \notin K$.

$$d^T g = d^T(\hat{s} - d) = \underbrace{(\hat{s} - g)^T\hat{s}}_{=0} - d^T d = -||d||_2^2 < 0.$$

Zeige nun $d^T s \geq 0$ für alle $s \in K$. Sei $s \in K$ beliebig. Da K konvex und $\hat{s} \in K$ gilt

$$||\hat{s} + \theta(s - \hat{s}) - g||_2^2 \geq ||\hat{s} - g||_2^2 = (\hat{s} - g)^T(\hat{s} - g) \quad \text{für } 0 \leq \theta \leq 1.$$

Also

$$\begin{aligned}(\hat{s} - g)^T(\hat{s} - g) + 2\theta(s - \hat{s})^T(\hat{s} - g) + \theta^2(s - \hat{s})^T(s - \hat{s}) &\geq (\hat{s} - g)^T(\hat{s} - g)\\ 2\theta(s - \hat{s})^T(\hat{s} - g) + \theta^2(s - \hat{s})^T(s - \hat{s}) &\geq 0\\ (s - \hat{s})^T(\hat{s} - g) + \frac{\theta}{2}(s - \hat{s})^T(s - \hat{s}) &\geq 0\,.\end{aligned} \tag{6}$$

Der Grenzübergang $\theta \to 0$ in (6) liefert:

$$(s - \hat{s})^T(\hat{s} - g) = s^T(\hat{s} - g) - \underbrace{\hat{s}^T(\hat{s} - g)}_{=0} = s^T d \geq 0 \quad \forall s \in K\,.$$

Somit folgt

$$0 \leq d^T s = d^T(By + Cw) \quad \forall y \geq 0 \; \forall w \,. \tag{7}$$

Fixiere $y = 0$ in (7) und erhalte $(C^T d)^T w \geq 0$ für alle w, d.h. $C^T d = 0$. Fixiere $w = 0$ in (7) und erhalte $(B^T d)^T y \geq 0$ für alle $y \geq 0$ d.h. $B^T d \geq 0$.
□

Wir betrachten jetzt wieder unser Originalproblem:

$$(IV) = \begin{cases} \textit{Minimiere} \\ \qquad f(x)\,,\ x \in D \\ \textit{unter den Nebenbedingungen} \\ \qquad g_i(x) = 0\,,\ i = 1, ..., l \ \textit{und} \\ \qquad k_i(x) \geq 0\,,\ i = 1, ...q\,. \end{cases}$$

Zu (IV) heißt $L \in C^2(D \times \mathbb{R}^l \times \mathbb{R}^q, \mathbb{R}), L(x, \lambda, \mu) = f(x) - \sum\limits_{i=1}^{l} \lambda_i g_i(x) - \sum\limits_{i=1}^{q} \mu_i k_i(x)$ die zugehörige **Lagrange-Funktion** und $\lambda_i, i = 1, ..., l, \mu_i, i = 1, ...q$ die **Lagrange-Multiplikatoren**.

Satz 2.14 (Notwendige Bedingungen 1-ter Ordnung)
Es sei $x^* \in D$ eine lokale Lösung des Optimierungsproblems. Ferner sei x^* regulär, d.h.

$$\nabla g_1(x^*), ..., \nabla g_l(x^*), \nabla k_i(x^*), i \in \mathcal{A}_{x^*}$$

sind linear unabhängig. Dann existiert ein Vektor $\lambda^* \in \mathbb{R}^l, \mu^* \in \mathbb{R}^q$ mit

$$\frac{\partial L}{\partial x}(x^*, \lambda^*, \mu^*) = \nabla f(x^*) - \sum_{i=1}^{l} \lambda_i^* \nabla g_i(x^*) - \sum_{i=1}^{q} \mu_i^* \nabla k_i(x^*) = 0$$

$$g(x^*) = 0, \quad k(x^*) \geq 0, \quad \mu^* \geq 0, \quad \mu_i^* k_i(x^*) = 0,\ i = 1, ...q\,.$$

"Karush-Kuhn-Tucker (KKT) - Bedingungen"

Beweis: Wende das Lemma von Farkas an auf

$$g = \nabla f(x^*) \in \mathbb{R}^N \quad B = (\nabla k_i(x^*),\ i \in \mathcal{A}_{x^*}) \in \mathbb{R}^{N,m}\,, m = \#\mathcal{A}_{x^*}\,, C = (\nabla g_i(x^*)\,, i = 1, ..., l) \in \mathbb{R}^{N,l}$$

und den Kegel

$$K = \{B\hat{\mu} + C\hat{\lambda}\,, \hat{\mu} \geq 0\} = \left\{ \sum_{i \in \mathcal{A}_x} \hat{\mu}_i \nabla k_i(x^*) + \sum_{i=1}^{l} \hat{\lambda}_i \nabla g_i(x^*) \,|\, \hat{\mu} \geq 0 \right\}.$$

Entweder gilt

$$\nabla f(x^*) = \sum_{i=1}^{l} \hat{\lambda}_i \nabla g_i(x^*) + \sum_{i \in \mathcal{A}_{x^*}} \hat{\mu}_i \nabla k_i(x^*) \tag{8}$$

oder es existiert ein d mit $d^T \nabla f(x^*) < 0$ und

$$\nabla g_i(x^*)^T d = 0,\ i = 1, ..., l \quad \nabla k_i(x^*)^T d \geq 0,\ i \in \mathcal{A}_x \tag{9}$$

(Dies bedeutet $d^T \nabla f(x^*) < 0$ und $d \in F(x^*) = T_Z(x^*)$). Nach Lemma 2.12 gilt aber

$$\nabla f(x^*)^T d \geq 0 \quad \forall d \in T_Z(x^*)$$

d.h. es tritt (8) ein. Setze nun $\lambda_i^* = \lambda_i$, $i = 1, ..., l$

$$\mu_i^* = \begin{cases} \mu_i & \text{falls } i \in \mathcal{A}_{x^*} \\ 0 & \text{für } i \in \{1, ..., q\} \setminus \mathcal{A}_{x^*} \end{cases} \tag{10}$$

und finde

$$\nabla f(x^*) = \sum_{i=1}^{l} \lambda_i^* \nabla g_i(x^*) + \sum_{i=1}^{q} \mu_i^* \nabla k_i(x^*)$$

sowie $\mu_i^* \geq 0$, $i = 1, ..., q$. Die Bedingungen $k(x^*) \geq 0$, $g(x^*) = 0$ folgen direkt aus der Zulässigkeit von x^*. Aus der Definition (10) folgt direkt

$$\mu_i^* k_i(x^*) = 0$$

denn für $i \in \mathcal{A}_{x^*}$ ist $k_i(x^*) = 0$ und für $i \in \{1, ...q\} \setminus \mathcal{A}_{x^*}$ ist $\mu_i^* = 0$.
□

Beispiel 2.15 (Teil 1, notwendige Bedingungen)

a.) Betrachte

$$f(x_1, x_2, x_3) = -x_1 x_2 - x_2 x_3 - x_1 x_3 \stackrel{!}{=} min$$

unter der Nebenbedingung

$$g(x_1, x_2, x_3) = x_1 + x_2 + x_3 - 3 = 0.$$

Mit

$$x = (x_1, x_2, x_3), \quad L(x, \lambda) = f(x) - \lambda g(x), \quad \nabla f(x) = \begin{pmatrix} -x_2 - x_3 \\ -x_1 - x_3 \\ -x_2 - x_1 \end{pmatrix}, \quad \nabla g(x) = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

erhalten wir

$$\frac{\partial L}{\partial x}(x, \lambda) = \begin{pmatrix} -x_2 - x_3 \\ -x_1 - x_3 \\ -x_2 - x_1 \end{pmatrix} - \lambda \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} = 0$$

$$x_1 + x_2 + x_3 - 3 = 0$$

$$\iff \quad \begin{pmatrix} 0 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 0 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & 0 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \lambda \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 3 \end{pmatrix}.$$

Dieses System hat die Lösung $x^* = (1, 1, 1), \lambda^* = -2$.

b.) Betrachte

$$f(x_1, x_2, x_3) = x_2 - \frac{1}{2} x_1 \stackrel{!}{=} min$$

unter den Nebenbedingungen

$$k_1(x_1, x_2, x_3) = -x_1 - \exp(-x_1) - x_3^2 + x_2 \geq 0\,,$$
$$k_2(x_1, x_2, x_3) = x_1 \geq 0\,.$$

Wir finden

$$\nabla f(x) = \begin{pmatrix} -1/2 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \nabla k_1(x) = \begin{pmatrix} -1 + \exp(-x_1) \\ 1 \\ -2x_3 \end{pmatrix}, \quad \nabla k_2(x) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

und somit die KKT-Gleichungen

$$-\frac{1}{2} - \mu_1(-1 + \exp(-x_1)) - \mu_2 = 0 \tag{11}$$
$$1 - \mu_1 = 0 \tag{12}$$
$$2\mu_1 x_3 = 0 \tag{13}$$

sowie

$$\mu_1(-x_1 - \exp(-x_1) - x_3^2 + x_2) = 0\,, \qquad \mu_1 \geq 0 \tag{14}$$
$$\mu_2 x_1 = 0\,, \qquad \mu_2 \geq 0 \tag{15}$$

mit $x = (x_1, x_2, x_3) \in Z$.

(12) liefert $\mu_1 = 1$ und mit (13) folgt $x_3 = 0$. Ferner liefert (14)

$$-x_1 - \exp(-x_1) + x_2 = 0 \quad \text{d.h.} \quad x_2 = x_1 + \exp(-x_1)\,. \tag{16}$$

Annahme: Sei $x_1 = 0$, d.h. die Ungleichung k_2 ist aktiv. Dann folgt mit (16) $x_2 = 1$ und mit (11)

$$-\frac{1}{2} - 1 \cdot (-1 + \exp(0)) - \mu_2 = 0 \quad \text{d.h.} \quad \mu_2 = -\frac{1}{2}\,.$$

Dies ist ein Widerspruch! Also folgt $x_1 \neq 0$, d.h. $k_2(x) = x_1 > 0$ und mit (15) $\mu_2 = 0$. Wir erhalten dann

$$-\frac{1}{2} - 1(-1 + \exp(-x_1)) - 0 = 0 \quad \text{d.h.} \quad x_1 = \ln(2)$$

und mit (16)

$$x_2 = \ln(2) + \exp(-\ln(2)) = \frac{1}{2} + \ln(2)\,.$$

Lösung: $x^* = (\ln(2), \frac{1}{2} + \ln(2), 0)$, $\mu^* = (1, 0)$.

Wir analysieren jetzt die Rolle der Ableitung 2-ter Ordnung. Es ist wieder

$$F(x) = \{d \in \mathbb{R}^N \,|\, \nabla g_i(x)^T d = 0, i = 1, ..., l \text{ und } \nabla k_i(x)^T d \geq 0, i \in \mathcal{A}_x\}$$

der Kegel der linearisierten Richtungen in x. Sei x^* ein KKT-Punkt und seien $\lambda^* \in \mathbb{R}^l$ und $\mu^* \in \mathbb{R}^q$, $\mu^* \geq 0$ die zu x^* gehörigen Lagrange-Multiplikatoren. Dann heißt

$$C(x^*, \mu^*) = \{d \in F(x^*) \,|\, \nabla k_i(x^*)^T d = 0 \text{ für } i \in \mathcal{A}_{x^*} \text{ mit } \mu_i^* > 0\}$$

der **kritische Kegel**, d.h.

$$\begin{aligned} d \in C(x^*, \mu^*) \quad \Longleftrightarrow \quad & \nabla g_i(x^*)^T d = 0,\ i = 1, ..., l \\ & \nabla k_i(x^*)^T d = 0,\ i \in \mathcal{A}_{x^*},\ \mu_i^* > 0 \\ & \nabla k_i(x^*)^T d > 0,\ i \in \mathcal{A}_{x^*},\ \mu_i^* = 0\,. \end{aligned}$$

Aus den notwendigen Bedingungen 1-ter Ordnung folgt nun sofort

$$w \in C(x^*, y^*) \quad \Longrightarrow \quad w^T \nabla f(x^*) = \sum_{i=1}^{l} \lambda_i^* w^T \nabla g_i(x^*) + \sum_{i=1}^{q} \mu_i^* w^T \nabla k_i(x^*) = 0\,.$$

Satz 2.16 (Notwendige Bedingungen 2-ter Ordnung)
Sei x^* eine lokale Lösung des Optimierungsproblems und sei x^* regulär. Ferner seien $\lambda^* \in \mathbb{R}^l$ und $\mu^* \in \mathbb{R}^q$ die zugehörigen Lagrange-Multiplikatoren für welche die KKT-Bedingungen erfüllt seien. Dann gilt

$$w^T \frac{\partial^2 L}{\partial x^2}(x^*, \lambda^*, \mu^*) w = w^T \left(\nabla^2 f(x^*) - \sum_{i=1}^{l} \lambda_i^* \nabla^2 g_i(x^*) - \sum_{i=1}^{q} \mu_i^* \nabla^2 k_i(x^*) \right) w \geq 0$$

für alle $w \in C(x^*, \mu^*)$.

Beweis: Sei $w \in C(x^*, \mu^*) \subset F(x^*) = T_Z(x^*)$. Damit gibt es eine zulässige Folge $(y_k)_{k\in\mathbb{N}} \in Z^{\mathbb{N}}$, $\lim\limits_{k\to\infty} y_k = x^*$, eine Folge $(t_k)_{k\in\mathbb{N}}, t_k > 0$, $\lim\limits_{k\to\infty} t_k = 0$ mit

$$\lim_{k\to\infty} \underbrace{\frac{y_k - x^*}{t_k}}_{w_k} = w$$

d.h. $y_k = x^* + t_k w_k$, $w_k \to w$ für $k \to \infty$. Durch die Konstruktion mittels

$$R(z,t) = \begin{pmatrix} H(z) - tDH(x^*)w \\ Z^T(z - x^* - tw) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad H(z) = \begin{pmatrix} g(z) \\ k_i(z),\ i \in \mathcal{A}_{x^*} \end{pmatrix}$$

(vgl. Beweis von Lemma 2.11) lässt sich für die Folge $(y_k)_{k\in\mathbb{N}}$ überdies

$$g_i(y_k) = t_k \nabla g_i(x^*)^T w,\ i = 1, ..., l \tag{17}$$
$$k_i(y_k) = t_k \nabla k_i(x^*)^T w,\ i \in \mathcal{A}_{x^*} \tag{18}$$

erreichen. (17)-(18) sichert dann

$$\begin{aligned} L(y_k, \lambda^*, \mu^*) &= f(y_k) - \sum_{i=1}^{l} \lambda_i^* g_i(y_k) - \sum_{i\in\mathcal{A}_{x^*}} \mu_i^* k_i(y_k) \\ &= f(y_k) - \sum_{i=1}^{l} \lambda_i^* t_k \underbrace{\nabla g_i(x^*)^T w}_{=0 \text{ für } w\in C(x^*,\lambda^*,\mu^*)} - \underbrace{\sum_{i\in\mathcal{A}_{x^*}} \mu_i^* t_k \underbrace{\nabla k_i(x^*)^T w}_{=0 \text{ für } i\in\mathcal{A}_{x^*},\mu_i^*>0}}_{=0\,\forall i\in\mathcal{A}_{x^*}} \\ &= f(y_k)\,. \end{aligned}$$

Nach Taylor gilt überdies für $k \in \mathbb{N}$

$$f(y_k) - f(x^*) = t_k w_k^T \nabla f(x^*) + \frac{1}{2} t_k w_k^T \nabla^2 f(\eta_0^k) t_k w_k, \quad \eta_0^k = x^* + \theta_0^k (y_k - x^*)$$
$$g_i(y_k) - g_i(x^*) = t_k w_k^T \nabla g_i(x^*) + \frac{1}{2} t_k w_k^T \nabla^2 g_i(\eta_i^k) t_k w_k, \quad \eta_i^k = x^* + \theta_i^k (y_k - x^*)$$
$$k_i(y_k) - k_i(x^*) = t_k w_k^T \nabla k_i(x^*) + \frac{1}{2} t_k w_k^T \nabla^2 k_i(\eta_{l+i}^k) t_k w_k, \quad \eta_{l+i}^k = x^* + \theta_{l+i}^k (y_k - x^*)$$

mit $\theta_0^k \in [0,1]$, $\theta_i^k \in [0,1]$, $i = 1, ...l$ und $\theta_{l+i}^k \in [0,1]$, $i \in \mathcal{A}_{x^*}$. Damit erhalten wir

$$\begin{aligned}
f(y_k) &= f(y_k) - \sum_{i=1}^{l} \lambda_i^* g_i(y_k) - \sum_{i \in \mathcal{A}_{x^*}} \mu_i^* k_i(y_k) \\
&= f(x^*) + t_k w_k^T \nabla f(x^*) + \frac{1}{2} t_k w_k^T \nabla^2 f(\eta_0^k) t_k w_k \\
&\quad - \sum_{i=1}^{l} \lambda_i^* \left(\underbrace{g_i(x^*)}_{=0} + t_k w_k^T \nabla g_i(x^*) + \frac{1}{2} t_k w_k^T \nabla^2 g_i(\eta_i^k) t_k w_k \right) \\
&\quad - \sum_{i \in \mathcal{A}_{x^*}} \mu_i^* \left(\underbrace{k_i(x^*)}_{=0} + t_k w_k^T \nabla k_i(x^*) + \frac{1}{2} t_k w_k^T \nabla^2 k_i(\eta_{l+1}^k) t_k w_k \right) \\
&= f(x^*) + t_k w_k^T \underbrace{\left(\nabla f(x^*) - \sum_{i=1}^{l} \lambda_i^* \nabla g_i(x^*) - \underbrace{\sum_{i \in \mathcal{A}_{x^*}} \mu_i^* \nabla k_i(x^*)}_{= \sum_{i=1}^{q} \mu_i^* \nabla k_i(x^*)} \right)}_{=0} \\
&\quad + \frac{1}{2} t_k w_k^T \left(\nabla^2 f(\eta_0^k) - \sum_{i=1}^{l} \lambda_i^* \nabla^2 g_i(\eta_i^k) - \sum_{i \in \mathcal{A}_{x^*}} \mu_i^* \nabla^2 k_i(\eta_{l+i}^k) \right) t_k w_k \quad k \in \mathbb{N}\,.
\end{aligned}$$

Somit folgt mit $f(y_k) \geq f(x^*)$ sofort

$$0 \leq \frac{f(y_k) - f(x^*)}{2 t_k^2} = w_k^T \left(\nabla^2 f(\eta_0^k) - \sum_{i=1}^{l} \lambda_i^* \nabla^2 g_i(\eta_i^k) - \sum_{i \in \mathcal{A}_{x^*}} \mu_i^* \nabla^2 k_i(\eta_{l+i}^k) \right) w_k$$

und Grenzübergang $k \to \infty$ liefert

$$\begin{aligned}
0 &\leq w^T \left(\nabla^2 f(x^*) - \sum_{i=1}^{l} \lambda_i^* \nabla^2 g_i(x^*) - \overbrace{\sum_{i \in \mathcal{A}_{x^*}} \mu_i^* \nabla^2 k_i(x^*)}^{= \sum_{i=1}^{q} \mu_i^* \nabla^2 k_i(x^*)} \right) w \\
&= w^T \left(\frac{\partial^2 L}{\partial x^2}(x^*, \lambda^*, \mu^*) \right) w\,, \quad w \in C(x^*, \mu^*)\,.
\end{aligned}$$

□

Es fehlt noch eine hinreichende Charakterisierung für lokale Lösungen x^* von nichtlinearen Optimierungsproblemen mit Nebenbedingungen.

Satz 2.17 (Hinreichende Bedingungen 2-ter Ordnung)
Vorgelegt sei das Optimierungsproblem $f(x) \stackrel{!}{=} min$ *unter den Nebenbedingungen* $g(x) = 0$ *und* $k(x) \geq 0$. *Es sei* $x^* \in Z$ *regulär und es existieren* $\lambda^* \in \mathbb{R}^l, \mu^* \in \mathbb{R}^q$, $\mu^* \geq 0$ *mit*

$$\frac{\partial L}{\partial x}(x^*, \lambda^*, \mu^*) = \nabla f(x^*) - \sum_{i=1}^{l} \lambda_i^* \nabla g_i(x^*) - \sum_{i=1}^{q} \mu_i^* \nabla k_i(x^*) = 0\,, \quad \mu_i^* k_i(x^*) = 0,\ i = 1, ..., q\,.$$

Gilt dann

$$w^T \frac{\partial^2 L}{\partial x^2}(x^*, \lambda^*, \mu^*) w > 0 \quad \forall w \in C(x^*, \mu^*) \setminus \{0\}$$

so ist x^* *eine strikte lokale Lösung des Optimierungsproblems.*

Beweis: Indirekt: Angenommen x^* sei keine lokale Lösung des Optimierungsproblems. Dann gibt es eine Folge $(y_k)_{k\in\mathbb{N}} \in Z^{\mathbb{N}}$ mit $\lim\limits_{k\to\infty} y_k = x^*$ und $f(y_k) \leq f(x^*)$. Schreibe $y_k = x^* + t_k w_k$ mit $w_k \in \mathbb{R}^N$, $||w_k||_2 = 1, t_k > 0$, $\lim\limits_{k\to\infty} t_k = 0$. Ferner gelte OE $\lim\limits_{k\to\infty} w_k = w$, da $\{z \in \mathbb{R}^N \,|\, ||z||_2 = 1\}$ kompakt. Wir zeigen nun $w \in C(x^*, \mu^*)$. Nach Taylor gilt

$$0 = g_i(y_k) - g_i(x^*) = t_k w_k^T \nabla g_i(\eta_i^k), \quad \eta_i^k = x^* + \theta_i^k (y_k - x^*)\,, \theta_i^k \in [0,1]\,, i = 1, ..., l,\ , k \in \mathbb{N}$$

$$\Rightarrow 0 = w_k^T \nabla g_i(\eta_i^k) \quad \stackrel{k\to\infty}{\longrightarrow} \quad 0 = w^T \nabla g_i(x^*), \quad i = 1, ..., l\,.$$

Für $i \in \mathcal{A}_{x^*}$ betrachten wir

$$0 \leq \underbrace{k_i(y_k)}_{\geq 0} - \underbrace{k_i(x^*)}_{=0} = t_k w_k^T \nabla k_i(\eta_{l+i}^k)\,, \quad \eta_{l+i}^k = x^* + \theta_{l+i}^k (y^k - x^*),\ \theta_{l+i}^k \in [0,1],\ i \in \mathcal{A}_{x^*},\ k \in \mathbb{N}\,.$$

Analog folgt durch Grenzübergang

$$0 \leq w^T \nabla k_i(x^*), \quad i \in \mathcal{A}_{x^*}\,.$$

Ferner erhalten wir aus

$$0 \geq f(y_k) - f(x^*) = t_k w_k^T \nabla f(\eta_0^k), \quad \eta_0^k = x^* + \theta_0^k (y^k - x^*), \quad \theta_0^k \in [0,1], \quad k \in \mathbb{N}$$

sofort

$$0 \geq w^T \nabla f(x^*)\,.$$

Wegen der Multiplikator-Regel gilt nun

$$0 \geq w^T \nabla f(x^*) = \sum_{i=1}^{l} \lambda_i^* \underbrace{w^T \nabla g_i(x^*)}_{=0} + \sum_{i=1}^{q} \mu_i^* w^T \nabla k_i(x^*) = \sum_{i \in \mathcal{A}_{x^*}} \mu_i^* \underbrace{w^T \nabla k_i(x^*)}_{\geq 0}\,.$$

Ist nun $\mu_i^* > 0$, so muss $w^T \nabla k_i(x^*) = 0$ sein, d.h.

$$w \in \{d \in \mathbb{R}^N \,|\, \nabla g_i(x^*)^T d = 0, i = 1, ..., l \quad \nabla k_i(x^*)^T d \geq 0, i \in \mathcal{A}_{x^*}, \mu_i^* = 0,$$
$$\nabla k_i(x^*)^T d = 0, i \in \mathcal{A}_{x^*}, \mu_i^* > 0\} = C(x^*, \mu^*)\,.$$

Wir folgen nun dem Beweis von Satz (2.16) und entwickeln nach Taylor für $k \in \mathbb{N}$

$$0 \geq f(y_k) - f(x^*) = t_k w_k^T \nabla f(x^*) + \frac{1}{2} t_k w_k^T \nabla^2 f(\tilde{\eta}_0^k) t_k w_k, \quad \tilde{\eta}_0^k = x^* + \tilde{\theta}_0^k (y_k - x^*)$$
$$0 = g_i(y_k) - g_i(x^*) = t_k w_k^T \nabla g_i(x^*) + \frac{1}{2} t_k w_k^T \nabla^2 g_i(\tilde{\eta}_i^k) t_k w_k, \quad \tilde{\eta}_i^k = x^* + \tilde{\theta}_i^k (y_k - x^*)$$
$$0 \leq k_i(y_k) - k_i(x^*) = t_k w_k^T \nabla k_i(x^*) + \frac{1}{2} t_k w_k^T \nabla^2 k_i(\tilde{\eta}_{l+i}^k) t_k w_k, \quad \tilde{\eta}_{l+i}^k = x^* + \tilde{\theta}_{l+i}^k (y_k - x^*)$$

mit $\tilde{\theta}_0^k \in [0,1]$, $\tilde{\theta}_i^k \in [0,1]$, $i = 1, ...l$ und $\tilde{\theta}_{l+i}^k \in [0,1]$, $i \in \mathcal{A}_{x^*}$. Somit folgt

$$\begin{aligned} 0 &\geq f(y_k) - f(x^*) - \sum_{i=1}^{l} \lambda_i^* (g_i(y_k) - g_i(x^*)) - \sum_{i \in \mathcal{A}_{x^*}} \mu_i^* (k_i(y_k) - k_i(x^*)) \\ &= t_k w_k^T \left(\underbrace{\nabla f(x^*) - \sum_{i=1}^{l} \lambda_i^* \nabla g_i(x^*) - \sum_{i \in \mathcal{A}_{x^*}} \mu_i^* \nabla k_i(x^*)}_{=0 \text{ nach Multiplikatorregel}} \right) \\ &\quad + \frac{1}{2} t_k w_k^T \left(\nabla^2 f(\tilde{\eta}_0^k) - \sum_{i=1}^{l} \lambda_i^* \nabla^2 g_i(\tilde{\eta}_i^k) - \sum_{i \in \mathcal{A}_{x^*}} \mu_i^* \nabla^2 k_i(\tilde{\eta}_{l+i}^k) \right) t_k w_k \,. \end{aligned}$$

Division durch $2t_k^2$ liefert

$$w_k^T \left(\nabla^2 f(\tilde{\eta}_0^k) - \sum_{i=1}^{l} \lambda_i^* \nabla^2 g_i(\tilde{\eta}_i^k) - \sum_{i \in \mathcal{A}_{x^*}} \mu_i^* \nabla^2 k_i(\tilde{\eta}_{l+i}^k) \right) w_k \leq 0$$
$$\downarrow k \to \infty$$
$$w^T \underbrace{\left(\nabla^2 f(x^*) - \sum_{i=1}^{l} \lambda_i^* \nabla^2 g_i(x^*) - \sum_{i=1}^{q} \mu_i^* \nabla^2 k_i(x^*) \right)}_{= \frac{\partial^2 L}{\partial x^2}(x^*, \lambda^*, \mu^*)} w \leq 0$$

für ein $w \in C(x^*, \mu^*)$ mit $||w||_2 = 1$. Dies ist ein Widerspruch zur positiven Definitheit von $\frac{\partial^2 L}{\partial x^2}(x^*, \lambda^*, \mu^*)$ auf $C(x^*, \mu^*)$.
□

Die Struktur des Kegels $C(x^*, \mu^*)$ wird entscheidend von den aktiven Ungleichheitstrestriktionen beeinflusst. Ein wichtiger Spezialfall ist die strikte Komplementarität.

Definition 2.18
*Sei x^* eine lokale Lösung des Optimierungsproblem und seien $\lambda^* \in \mathbb{R}^l$ und $\mu^* \in \mathbb{R}^q$ die zugehörigen Lagrange-Multiplikatoren. Ferner bezeichne $\mathcal{A}_{x^*}$ die Menge der aktiven Ungleichheitsrestriktionen. Dann liegt **strikte Komplementarität** vor, falls $\mu_i^* > 0$ für alle $i \in \mathcal{A}_{x^*}$.*

Bemerkung 2.19
Bei strikter Komplementarität erhalten wir

$$C(x^*, \mu^*) = \{d \in \mathbb{R}^N \mid \nabla g_i(x^*)^T d = 0, i = 1, ..., l, \ \nabla k_i(x^*)^T d = 0, i \in \mathcal{A}_{x^*}\} = N(DH(x^*))$$

mit $H(z) = \begin{pmatrix} g(z) \\ k_i(z),\ i \in \mathcal{A}_{x^*} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{l+m}, m = \#\mathcal{A}_{x^*}$. Die hinreichende Bedingung

$$w^T \frac{\partial^2 L}{\partial x^2}(x^*, \lambda^*, \mu^*) w > 0, \quad \forall w \in C(x^*, \mu^*) \setminus \{0\}$$

lautet also, dass $\frac{\partial^2 L}{\partial x^2}(x^*, \lambda^*, \mu^*)$ positiv definit auf dem Nullraum der aktiven Ungleichheits- und den Gleichheitsrestriktionen ist. Ist nun $Z \in \mathbb{R}^{N-l-m,N}$ mit $R(Z) = N(DH(x^*))$, d.h. die Spalten von Z bilden eine Basis von $N(DH(x^*))$ so lautet die hinreichende Bedingung von Satz (2.17) $Z^T \frac{\partial^2 L}{\partial x^2}(x^*, \lambda^*, \mu^*) Z \in \mathbb{R}^{N-l-m,N-l-m}$ ist positiv definit.

Beispiel 2.20 (Aktive und inaktive Ungleichungen)

$$\begin{aligned} f(x_1, x_2) &= (x_1 - 1)^2 + (x_2 - 2)^2 \stackrel{!}{=} min \\ k_1(x_1, x_2) &= x_2 - c \geq 0\,, \quad c \in \mathbb{R}\,. \end{aligned}$$

Man findet

$$\nabla f(x_1, x_2) = \begin{pmatrix} 2(x_1 - 1) \\ 2(x_2 - 2) \end{pmatrix}, \quad \nabla k_1(x_1, x_2) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

und somit die KKT-Bedingungen

$$\begin{aligned} 2(x_1 - 1) &= 0 \\ 2(x_2 - 2) - \mu_1 &= 0 \\ \mu_1(x_2 - c) &= 0 \end{aligned}$$

mit $\mu_1 \geq 0, x_2 - c \geq 0$. Dies liefert

$$x_1 = 1\,, \quad \mu_1 = 2(x_2 - 2)\,, \quad 2(x_2 - 2)(x_2 - c) = 0 \quad \Longrightarrow x_2 = 2 \text{ oder } x_2 = c\,.$$

Unterscheide jetzt 3 Fälle.

a.) $c > 2$: $x_2 = 2$ nicht zulässig, da $2 - c > 0 \Rightarrow x_2 = c$

$$x^* = (1, c)\,, \quad \mu_1^* = 2(c - 2) > 0\,, \quad k_1(x^*) = c - c = 0$$

Ungleichung k_1 ist stark aktiv.

b.) $c = 2$: $\Rightarrow x_2 = 2$

$$x^* = (1, 2) \quad \mu_1^* = 2(2 - 2) = 0 \quad k_1(x^*) = 2 - 2 = 0$$

Ungleichung k_1 ist schwach aktiv.

c.) $c < 2$: $x_2 = c$ nicht zulässig, da $\mu_1 = 2(c - 2) < 0$.

$$\Rightarrow x_2 = 2, \quad x^* = (1, 2), \quad \mu_1^* = 0, \quad k_1(x^*) = 2 - c > 0\,.$$

Die Ungleichung k_1 ist jetzt nicht aktiv.

Beispiel 2.21 (Teil 2, hinreichende Bedingungen)

a.) Betrachte wieder

$$f(x_1, x_2, x_3) = -x_1 x_2 - x_2 x_3 - x_1 x_3 \stackrel{!}{=} min \tag{19}$$

unter der Nebenbedingung

$$g(x_1, x_2, x_3) = x_1 + x_2 + x_3 - 3 = 0\,. \tag{20}$$

Lösung $x^* = (1, 1, 1,), \lambda^* = -2$ (stationärer Punkt der Lagrange- Funktion).

Hinreichende Bedingung:

$$\frac{\partial^2 L}{\partial x^2}(x^*, \lambda^*) = \nabla^2 f(x^*) - \lambda^* \nabla^2 g(x^*)$$

ist positiv definit auf $N(Dg(x^*))$. Mit

$$\nabla^2 f(x^*) = \begin{pmatrix} 0 & -1 & -1 \\ -1 & 0 & -1 \\ -1 & -1 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \nabla^2 g(x^*) = 0$$

erhalten wir $\frac{\partial^2 L}{\partial x^2}(x^*, \lambda^*) = \nabla^2 f(x^*)$. Sei nun

$$y \in N(Dg(x^*)) = N((1,1,1)) = \{z \in \mathbb{R}^3 \,|\, z_1 + z_2 + z_3 = 0\}\,, \quad y \neq 0\,.$$

Dann gilt

$$\begin{aligned} y^T \frac{\partial^2 L}{\partial x^2}(x^*, \lambda^*) y &= y^T \begin{pmatrix} 0 & -1 & -1 \\ -1 & 0 & -1 \\ -1 & -1 & 0 \end{pmatrix} y = (y_1, y_2, y_3) \begin{pmatrix} -y_2 - y_3 \\ -y_1 - y_3 \\ -y_1 - y_2 \end{pmatrix} \\ &= y_1 \underbrace{(-y_2 - y_3)}_{=y_1} + y_2 \underbrace{(-y_1 - y_3)}_{=y_2} + y_3 \underbrace{(-y_1 - y_2)}_{=y_3} = y_1^2 + y_2^2 + y_3^2 > 0\,. \end{aligned}$$

Also ist $x^* = (1, 1, 1)$ ein lokales Minimum für die Aufgabe (19)-(20).

b.) Betrachte jetzt

$$f(x_1, x_2, x_3) = x_2 - \frac{1}{2} x_1 \stackrel{!}{=} min \tag{21}$$

unter den Nebenbedingungen

$$\tag{22}$$

$$k_1(x_1, x_2, x_3) = -x_1 - \exp(-x_1) - x_3^2 + x_2 \geq 0 \tag{23}$$

$$k_2(x_1, x_2, x_3) = x_1 \geq 0\,. \tag{24}$$

Einzige Lösung der KKT-Gleichungen

$$x^* = \left(\ln(2), \frac{1}{2} + \ln(2), 0\right)\,, \quad \mu^* = (1, 0)\,.$$

Es liegt strikte Komplementarität vor, d.h.

$$k_1(x^*) = 0\,, \mu_1^* > 0 \quad k_2(x^*) > 0\,, \mu_2^* = 0$$

d.h. der kritische Kegel lautet

$$C(x^*, \mu^*) = \{d \in \mathbb{R}^2 \,|\, \nabla k_1(x^*)^T d = 0\}\,.$$

Finde nun

$$\nabla^2 f(x^*) = 0 \in \mathbb{R}^{3,3} \quad \text{und} \quad \nabla^2 k_1(x^*) = \begin{pmatrix} -1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}.$$

und somit

$$\frac{\partial^2 L}{\partial x^2}(x^*, \mu^*) = \nabla^2 f(x^*) - \mu_1^* \nabla^2 k_1(x^*) - \mu_2^* \nabla^2 k_2(x^*) = -\nabla^2 k_1(x^*) = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}.$$

Ferner gilt $\nabla k_1(x^*) = \begin{pmatrix} -1/2 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$. Hinreichend ist nun

$$y^T \frac{\partial^2 L}{\partial x^2}(x^*, \mu^*) y > 0 \quad \forall y \in N(\nabla k_1(x^*)^T) \setminus \{0\}.$$

Wir erhalten

$$y^T \begin{pmatrix} 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} y = \frac{1}{2} y_1^2 + y_3^2 \geq 0 \quad \text{für } y \in N((-1/2, 1, 0)) = \{z \in \mathbb{R}^3 \mid -1/2 z_1 + z_2 = 0\}.$$

Sei nun $\frac{1}{2} y_1^2 + y_3^2 = 0 \implies y_1 = y_3 = 0$. Nach Definition von $N((-1/2, 1, 0))$ folgt damit auch $y_2 = 1/2 y_1 = 0$ und somit $y \equiv 0$. Also ist $x^* = (\ln(2), 1/2 + \ln(2), 0)$ ein lokales Minimum von (21)-(24).

Bemerkung 2.22 (Spezialfälle der Kuhn-Tucker Theorie)

a.) **Freie Minimierung:** Dann erhalten wir gemäß Satz 2.14 und 2.16 mit $L(x) = f(x)$ die notwendigen Bedingungen

$$\nabla f(x^*) = 0, \quad w^T \nabla^2 f(x^*) w \geq 0 \quad \forall w \in \mathbb{R}^N$$

sowie die hinreichenden Bedingungen

$$\nabla f(x^*) = 0, \quad w^T \nabla^2 f(x^*) w > 0 \quad \forall w \in \mathbb{R}^N \setminus \{0\}$$

(vgl. Sätze 2.1 und 2.3).

b.) **Minimierung mit Gleichheitsrestriktionen:** D.h. $l > 0, q = 0$. Das Problem lautet

$$f(x) \stackrel{!}{=} min$$

unter der Nebenbedingung

$$g(x) = 0. \tag{25}$$

Die Lagrange-Funktion ist

$$L(x, \lambda) = f(x) - \sum_{i=1}^{l} \lambda_i g_i(x).$$

Anwendung der Sätze 2.14, 2.16 und 2.17 liefert für eine reguläre Lösung x^* (d.h. $\mathrm{rg}(Dg(x^*)) = l$) die notwendigen Bedingungen

$$\frac{\partial L}{\partial x}(x^*, \lambda^*) = \nabla f(x^*) - \sum_{i=1}^{l} \lambda_i^* \nabla g_i(x^*) = 0\,, \quad g(x^*) = 0$$

$$w^T \frac{\partial^2 L}{\partial x^2}(x^*, \lambda^*) w \geq 0\,, \quad \forall w \in C(x^*) = N(Dg(x^*))$$

bzw. die hinreichenden Bedingungen

$$\frac{\partial L}{\partial x}(x^*, \lambda^*) = 0\,, \quad g(x^*) = 0\,, \quad \frac{\partial^2 L}{\partial x^2}(x^*, \lambda^*) \text{ positiv definit auf } C(x^*).$$

Kapitel II: Numerik freier Optimierungsprobleme

1 Grundprinzipen der Abstiegsverfahren

Vorgelegt sei $f \in C^1(\mathbb{R}^N, \mathbb{R})$. Gesucht ist ein lokales Minimum von f.

Idee der Abstiegsverfahren:

- Ist man in einem Punkt $x \in \mathbb{R}^N$, so wähle eine Richtung $d \in \mathbb{R}^N$ aus, in welcher der Funktionswert von f fällt. (*Abstiegsrichtung*)
- Entlang dieser Richtung d geht man solange, bis man den Funktionswert von f hinreichend verkleinert hat. (*Schrittweitensteuerung*)

Definition 1.1
*Sei $f : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}$, und sei $x \in \mathbb{R}^N$ fest. $d \in \mathbb{R}^N$ heißt **Abstiegsrichtung** von f in x, wenn es ein $\bar{t} > 0$ gibt mit*

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

Lemma 1.2
Ist $f \in C^1(D, \mathbb{R})$, $D \subset \mathbb{R}^N$ offen, so ist

$$\nabla f(x)^T d < 0 \tag{26}$$

hinreichend dafür, dass $d \in \mathbb{R}^N$ eine Abstiegsrichung ist.

Setze $\varphi(t) := f(x + td)$, $|t| < \varepsilon$. Aus $f \in C^1(D, \mathbb{R})$ folgt $\varphi \in C^1(]-\varepsilon, \varepsilon[, \mathbb{R})$ und

$$\varphi(t) = \varphi(0) + t\varphi'(0) + r(t)$$

mit $\frac{r(t)}{t} \to 0$ für $t \to 0$. Es gilt:

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

Somit folgt

$$\frac{\varphi(t) - \varphi(0)}{t} = \nabla f(x)^T d + \frac{r(t)}{t}$$

und mit $\frac{r(t)}{t} = o(1)$ erhalten wir

$$\frac{\varphi(t) - \varphi(0)}{t} < 0 \quad \text{für } t \in]0, \bar{t}] \,, \; \bar{t} < \varepsilon \text{ geeignet.}$$

Dies ist äquivalent zu

$$f(x + td) - f(x) < 0 \,, \quad t \in]0, \bar{t}] \,.$$

Bemerkung 1.3

- $\nabla f(x)^T d < 0$ bedeutet, dass der Winkel zwischen d und $-\nabla f(x)$ kleiner als $90°$ ist.
- Mögliche Kandidaten für d sind

  a.) $d = -\nabla f(x) \,, \quad \nabla f(x)^T d = -||\nabla f(x)||_2^2 < 0$

  b.) $d = -M \nabla f(x) \,, \quad M \in \mathbb{R}^{N,N}$ symmetrisch und positiv definit

  $$\nabla f(x)^T d = -\nabla f(x)^T M \nabla f(x) < 0$$

Struktur eines Algorithmus:

Input: $f : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R},\ x_0 \in \mathbb{R}^N$

$k = 0$
while *Konvergenzkriterium nicht erfüllt* **do**
- bestimme Abstiegsrichtung d^k von f in x^k;
- bestimme Schrittweite $t_k > 0$ mit

$$f(x^k + t_k d^k) < f(x^k);$$

- setze $x^{k+1} = x^k + t_k d^k$;
- $k = k + 1$;

end

Algorithmus: `ABSTIEG`

1.1 Konvergenzuntersuchungen

In theoretischen Konvergenzuntersuchungen betrachten wir kein Konvergenzkriterium, d.h. wir nehmen an, dass eine Folge $(x_k)_{k\in\mathbb{N}}$ erzeugt wird. Wichtig ist nun, dass mögliche Häufungspunkte stationäre Punkte von f sind.

Lemma 1.4
Sei $f \in C^1(\mathbb{R}^N, \mathbb{R})$, und sei $(x^k)_{k\in\mathbb{N}}$ eine durch den Algorithmus `ABSTIEG` erzeugte Folge. Ferner gelte:

a.) Es existiere ein $\theta_1 > 0$ mit

$$-\nabla f(x^k)^T d^k \geq \theta_1 ||\nabla f(x^k)||_2 \cdot ||d^k||_2 \ (\geq 0)\,. \quad \textit{(Winkelbedingung)}$$

b.) Es existiere ein $\theta_2 > 0$ mit

$$f(x^k + t_k d^k) \leq f(x^k) - \theta_2 \left(\frac{\nabla f(x^k)^T d^k}{||d^k||_2} \right)^2 .$$

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

Beweis: Mit den beiden Bedingungen a.) und b.) folgt

$$f(x^{k+1}) - f(x^k) = f(x^k + t_k d^k) - f(x^k) \leq -\theta_2 \left(\frac{\nabla f(x^k)^T d^k}{||d^k||_2} \right)^2 \leq -\theta_1^2 \theta_2 ||\nabla f(x^k)||_2^2 \leq 0\,. \qquad (27)$$

Sei nun x^* ein Häufungspunkt von f, d.h. es existiert eine Teilfolge $(x^{k_n})_{n\in\mathbb{N}}$ mit $\lim\limits_{n\to\infty} x^{k_n} = x^*$. Dies impliziert $\lim\limits_{n\to\infty} f(x^{k_n}) = f(x^*)$. Ferner folgt wegen der Monotonie von $(f(x^{k_n}))_{k\in\mathbb{N}}$ (vgl. (27)) sofort

$$\lim_{k\to\infty} f(x^k) = f(x^*)\,.$$

Einsetzen in (27) liefert mit Grenzübergang $k \to \infty$

$$0 = f(x^*) - f(x^*) \leq -\theta_1^2 \theta_2 ||\nabla f(x^*)||_2^2 \leq 0\,.$$

Damit ist jeder Häufungspunkt stationärer Punkt, d.h.

$$0 = ||\nabla f(x^*)||_2 = \lim_{n\to\infty} ||\nabla f(x^{k_n})||_2 \,.$$

□

Bemerkung 1.5

- Forderung *a.*) in Lemma 1.4 bedeutet

$$\cos\Big(\angle(d^k, -\nabla f(x^k))\Big) = \frac{-\nabla f(x^k)^T d^k}{||d^k||_2 \cdot ||\nabla f(x^k)||_2} \geq \theta_1 > 0$$

  gleichmäßig in k.

- Schrittweiten $t_k > 0$, $k \in \mathbb{N}$ mit *b.*) heißen **effizient**.

2 Schrittweitenstrategien

Das allgemeine Abstiegsverfahren

$$x^{k+1} = x^k + t_k d^k \,, \quad k = 0, 1, 2, ...$$

besitzt in der Wahl der Abstiegsrichtung d^k und der Schrittweite $t_k > 0$ große Freiheitsgrade. Ist

$$L(x^0) = \{x \in \mathbb{R}^N \mid f(x) \leq f(x^0)\} \text{ kompakt},$$

so ist die Regel $t_k = t_k^{min}$ mit

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

wohldefiniert und naheliegend. Allerdings ist diese Regel aus Aufwandsgründen meist nicht praktikabel.

2.1 Schrittweiten Regeln

Armijo-Regel:

Betrachte gradientenähnliche Richtungen

$$d := -M\nabla f(x) \,, \quad M \in \mathbb{R}^{N,N} \text{ symmetrisch und positiv definit.}$$

Sei $\alpha \in]0, 1]$ beliebig, aber fest. Wähle $t > 0$ mit

$$\varphi(t) := f(x + td) \leq \underbrace{f(x)}_{=\varphi(0)} + \alpha t \underbrace{\nabla f(x)^T d}_{=\varphi'(0)} =: l(t) \tag{28}$$

$l(t)$ ist linear in t.

...Bild...

Zur tatsächlichen Berechnung von t überprüft man (28) sequentiell z.B. für

$$t^{(l)} = s\beta^l \,, \quad l = 0, 1, 2, ... \quad \text{mit } \beta \in]0, 1[\text{ fest}, s > 0 \text{ fest}.$$

Bei erstmaliger Gültigkeit von (28) bricht man ab. Etwas strenger als die Armijo-Regel ist die

Wolfe-Powell Regel:

Sei $\alpha \in]0, 1/2[$ und $\rho \in]\alpha, 1[$ gegeben. Zu $x, d \in \mathbb{R}^N$ mit $\nabla f(x)^T d < 0$ bestimme man eine Schrittweite $t > 0$ mit

$$f(x + td) \leq f(x) + \alpha t \nabla f(x)^T d \qquad (\varphi(t) \leq \varphi(0) + \alpha t \varphi'(0)), \tag{29}$$

$$\nabla f(x + td)^T d \geq \rho \nabla f(x)^T d \qquad (\varphi'(t) \geq \rho \varphi'(0) \text{ mit } \varphi(t) = f(x + td)). \tag{30}$$

Bemerkung 2.1
Es lässt sich zeigen, dass die Wolfe-Powell Regel wohldefiniert ist für $f \in C^1$ und f nach unten beschränkt.

Satz 2.2 (Theorem von Zoutendijk)
Vorgelegt sei ein Abstiegsverfahren der Form

$$x^{k+1} = x^k + t_k d^k, \quad k = 0, 1, 2, ...$$

wobei $t_k > 0$ die Wolfe Powell Bedingungen (29)-(30) erfülle. Es sei $f \in C^1(\mathbb{R}^N, \mathbb{R})$ nach unten beschränkt und

$$D \supset L(x^0) = \{x \in \mathbb{R}^N \mid f(x) \leq f(x^0)\}, \quad D \text{ offen}.$$

Außerdem gelte

$$||\nabla f(x) - \nabla f(\tilde{x})||_2 \leq L||x - \tilde{x}||_2 \quad \forall x, \tilde{x} \in D.$$

Dann gilt

a.) Es existiert ein $c > 0$ mit

$$f(x^k + t_k d^k) - f(x^k) \leq -c \left(\frac{\nabla f(x^k)^T d^k}{||d^k||_2} \right)^2, \quad k \in \mathbb{N}.$$

b.) Mit $\theta_k := \angle(d^k, -\nabla f(x^k))$ folgt

$$\sum_{k=0}^{\infty} \cos^2(\theta_k) \cdot ||\nabla f(x^k)||_2^2 < \infty.$$

Beweis:

a.) Mit (30) folgt

$$(\nabla f(x^{k+1}) - \nabla f(x^k))^T d^k = (\nabla f(x^k + t_k d^k) - \nabla f(x^k))^T d_k$$
$$\geq \rho \nabla f(x^k)^T d^k - \nabla f(x^k)^T d^k = (\rho - 1) \nabla f(x^k)^T d^k.$$

Andererseits gilt mit der Lipschitzbedingung für ∇f:

$$(\nabla f(x^{k+1}) - \nabla f(x^k))^T d^k \leq ||\nabla f(x^{k+1}) - \nabla f(x^k)||_2 \cdot ||d^k||_2 \leq L||t_k d^k||_2 \cdot ||d^k||_2 = t_k L ||d^k||_2^2.$$

Kombiniert man beide Formeln, so erhält man

$$t_k \geq \frac{(\nabla f(x^{k+1}) - \nabla f(x^k))^T d^k}{L \cdot ||d^k||_2^2} \geq \frac{(\rho - 1) \nabla f(x^k)^T d^k}{L \cdot ||d^k||_2^2}.$$

Setze dies in (29) ein und finde

$$f(x^{k+1}) \leq f(x^k) + \alpha t_k \underbrace{\nabla f(x^k)^T d^k}_{<0} \leq f(x^k) + \underbrace{\frac{\alpha(\rho - 1)}{L}}_{=:-c,\, c>0} \cdot \frac{(\nabla f(x^k)^T d^k)^2}{||d^k||_2^2}, \quad k \in \mathbb{N}.$$

b.) Über *a.*) hinaus folgt

$$f(x^{k+1}) \leq f(x^k) + \frac{\alpha(\rho-1)}{L}\cos^2(\theta_k)\cdot||\nabla f(x^k)||_2^2 \quad \text{mit } \theta^k = \angle(-\nabla f(x^k), d^k)\,. \tag{31}$$

Induktiv folgt mit (31) und $c = \frac{\alpha(\rho-1)}{L} > 0$

$$f(x^{k+1}) - f(x^0) = \sum_{j=0}^{k} f(x^{j+1}) - f(x^j) \leq c\sum_{j=0}^{k}\cos^2(\theta_k)||\nabla f(x^k)||_2^2\,, \quad k \in \mathbb{N}\,.$$

Da f nach unten beschränkt ist, erhalten wir sofort durch Grenzübergang

$$\sum_{j=0}^{\infty}\cos^2(\theta_k)\cdot||\nabla f(x^k)||_2^2 < \infty\,.$$

□

Bemerkung 2.3

- Die Voraussetzungen von Satz 2.2 sind nicht zu restriktiv. Ist f z.B. nicht nach unten beschränkt, so existiert kein globales Minimum und es muss auch kein lokales Mimimum existieren.
- Das Zoutendijk-Theorem impliziert inbesondere

$$\lim_{k\to\infty}\cos^2(\theta_k)\cdot||\nabla f(x^k)||_2^2 = 0\,.$$

- Die Wolfe-Powell Schrittweiten sind nach Satz 2.2 a) effizient.

Korollar 2.4
Seien die Voraussetzungen von Satz 2.2 erfüllt, und es gelte überdies

$$\cos(\theta_k) \geq \delta > 0\,, \quad k \in \mathbb{N}$$

so gilt $\lim_{k\to\infty}||\nabla f(x_k)|| = 0$.

Dies ist z.B. bei gradientenähnlichen Richtungen

$$d^k = -M_k\nabla f(x^k)\,, \quad M_k \in \mathbb{R}^{N,N} \text{ symmetrisch und positiv definit,}$$

erfüllt, falls gilt

$$0 < \underline{\lambda}_{min} < \lambda_{min}^k < \lambda_{max}^k < \overline{\lambda}_{max}\,, \quad k \in \mathbb{N}\,.$$

Dabei bezeichnet $\lambda_{min}^k, \lambda_{max}^k$ den kleinsten bzw. größten Eigenwert der Matrix M_k. Es folgt nämlich

$$\cos(\theta_k) = \frac{\nabla f(x^k)^T M_k \nabla f(x^k)}{||\nabla f(x^k)||_2||M_k\nabla f(x^k)||_2} \geq \frac{\lambda_{min}^k \nabla f(x^k)^T\nabla f(x^k)}{||M_k||_2||\nabla f(x^k)||_2^2} = \frac{\lambda_{min}^k}{||M_k||_2} = \frac{\lambda_{min}^k}{\lambda_{max}^k} \geq \frac{\underline{\lambda}_{min}}{\overline{\lambda}_{max}} \quad \text{für } k \in \mathbb{N}\,.$$

2.2 Abschwächung der Winkelbedingung

Es sei $\theta_k = \angle(d_k, -\nabla f(x^k))$ bzw.

$$\cos(\theta_k) = \frac{-\nabla f(x^k)^T d^k}{||\nabla f(x^k)||_2 ||d^k||_2}$$

Ist $\theta_k < 90°$, so ist d^k eine Abstiegsrichtung. Nach Korollar 2.4 erhält man ein Konvergenzresultat, falls $\cos(\theta_k) \geq \delta > 0$, $k \in \mathbb{N}$. Ist f gleichmäßig konvex, d.h. es gilt $z^T \nabla^2 f(x) z \geq \mu z^T z$, $\mu > 0$, so lässt sich die Winkelbedingung abschwächen.

Satz 2.5
Sei $f \in C^2(\mathbb{R}^N, \mathbb{R})$, und sei $L(x^0) = \{x \in \mathbb{R}^N \mid f(x) \leq f(x^0)\}$ konvex und f gleichmäßig konvex auf $L(x^0)$ mit μ, d.h. $z^T \nabla^2 f(x) z \geq \mu z^T z$ für $x \in L(x^0), z \in \mathbb{R}^N$. Sei $(x^k)_{k\in\mathbb{N}}$ erzeugt durch das Abstiegsverfahren d.h. $x^{k+1} = x^k + t_k d^k$. Ferner gelte:

a.) $\sum_{k=0}^{\infty} \delta_k = \infty$ *mit* $\delta_k = \cos^2(\theta_k) = \left(\frac{\nabla f(x^k)^T d^k}{||\nabla f(x^k)||_2 ||d^k||_2}\right)^2$.

b.) Die Schrittweiten $t_k > 0, k \in \mathbb{N}$ sind effizient.

Dann konvergiert die Folge $(x^k)_{k\in\mathbb{N}}$ gegen das eindeutig bestimmte globale Minimum von f in $L(x^0)$.

Beweis: Sei x^* dieses Minimum. Aus der Effizienz von t_k folgt

$$\begin{aligned} f(x^{k+1}) = f(x^k + t_k d^k) &\leq f(x^k) - c\left(\frac{\nabla f(x^k)^T d^k}{||d^k||_2}\right)^2 \\ &= f(x^k) - c\delta_k ||\nabla f(x^k)||_2^2, \quad k = 0, 1, 2, \ldots, \text{ mit } c > 0\,. \end{aligned} \tag{32}$$

Nun gilt trivialerweise

$$||\sqrt{\frac{\mu}{2}}(x^* - x^k) + \sqrt{\frac{1}{2\mu}}\nabla f(x^k)||_2^2 \geq 0\,.$$

Ausmultiplizieren ergibt

$$\frac{\mu}{2}||x^* - x^k||_2^2 + 2\sqrt{\frac{\mu}{2}}\sqrt{\frac{1}{2\mu}}(x^* - x^k)^T \nabla f(x^k) + \frac{1}{2\mu}||\nabla f(x^k)||_2^2 \geq 0$$

$$\Rightarrow \quad -\frac{1}{2\mu}||\nabla f(x^k)||_2^2 \leq \frac{\mu}{2}||x^* - x^k||_2^2 + \nabla f(x^k)^T (x^* - x^k)\,.$$

Ferner liefert Taylor-Entwicklung

$$f(x^*) - f(x^k) = \nabla f(x^k)^T (x^* - x^k) + \frac{1}{2}(x^* - x^k)^T \nabla^2 f(\eta_k)(x^* - x^k)$$

mit $\eta_k = x^k + \theta_k(x^* - x^k)$, $\theta_k \in [0, 1]$, $\eta_k \in L(x^0)$. Die gleichmäßige Konvexität liefert dann

$$f(x^*) - f(x^k) \geq \nabla f(x^k)^T (x^* - x^k) + \frac{\mu}{2}||x^* - x^k||_2^2 \geq -\frac{1}{2\mu}||\nabla f(x^k)||_2^2 \tag{33}$$

$$\iff \quad 2\mu c\delta_k (f(x^*) - f(x^k)) \geq -c\delta_k ||\nabla f(x^k)||_2^2\,. \tag{34}$$

Mit (32) gilt

$$f(x^{k+1}) \leq f(x^k) - 2\mu c\delta_k (f(x^k) - f(x^*))$$

und damit

$$0 \leq f(x^{k+1}) - f(x^*) = f(x^{k+1}) - f(x^k) + f(x^k) - f(x^*) \leq (1 - 2\mu c\delta_k)(f(x^k) - f(x^*))\,.$$

Induktiv folgt hieraus

$$\begin{aligned} 0 \leq f(x^{k+1}) - f(x^*) &\leq \prod_{j=0}^{k}(1 - 2\mu c\delta_j)(f(x^0) - f(x^*)) \\ &\leq \prod_{j=0}^{k}\exp(-2\mu c\delta_j)(f(x^0) - f(x^*)) = \exp\left(-2c\mu\sum_{j=0}^{k}\delta_j\right)(f(x^0) - f(x^*))\,. \end{aligned}$$

Wegen $\sum\limits_{j=0}^{k}\delta_j \to \infty$ für $k \to \infty$ und $(f(x^k))_{k\in\mathbb{N}}$ monoton gilt

$$\lim_{k\to\infty} f(x^k) = f(x^*)\,.$$

Ferner gilt mit der gleichmäßigen Konvexität

$$f(x^k) - f(x^*) = \underbrace{\nabla f(x^*)}_{=0}(x^k - x^*) + \frac{1}{2}(x^k - x^*)\nabla^2 f(\eta_k)(x^k - x^*) \geq \frac{\mu}{2}||x^k - x^*||_2^2\,,\ \text{d.h.}$$

$$||x^k - x^*||_2 \leq \sqrt{\frac{2}{\mu}(f(x^k) - f(x^*))} \to 0 \text{ für } k \to \infty\,,\ \text{d.h.}\ \lim_{k\to\infty} x^k = x^*\,.$$

□

Lemma 2.6
Sei $f \in C^2(\mathbb{R}^N, \mathbb{R})$, und sei $L(x^0) = \{x \in \mathbb{R}^N \mid f(x) \leq f(x^0)\}$ konvex, und f gleichmäßig konvex auf $L(x^0)$ mit μ, d.h. $z^T\nabla^2 f(x)z \geq \mu z^T z$ für $x \in L(x^0)$, $z \in \mathbb{R}^N$. Dann ist $L(x^0)$ kompakt und die Aufgabe

$$f(x) \stackrel{!}{=} min$$

hat genau eine globale Lösung x^* und x^* liegt in $L(x^0)$.

Beweis: Zeige zunächst: $L(x^0)$ ist kompakt. Aus der gleichmäßigen Konvexität von f folgt (vgl. Formelzeile (33), Beweis Satz 2.5)

$$f(x) - f(x^0) \geq \nabla f(x^0)^T(x - x^0) + \frac{\mu}{2}||x - x^0||_2^2\,.$$

Sei nun $x \in L(x^0)$, d.h. $f(x) \leq f(x^0)$. Dann gilt

$$0 \geq f(x) - f(x^0) \geq \nabla f(x^0)^T(x - x^0) + \frac{\mu}{2}||x - x^0||_2^2$$

$$\begin{aligned} \iff \quad & \frac{\mu}{2}||x - x^0||_2^2 \leq -\nabla f(x^0)^T(x - x^0) \leq ||\nabla f(x^0)||_2 \cdot ||x - x^0||_2 \\ & ||x - x^0||_2 \leq \frac{2}{\mu}||\nabla f(x^0)||_2 =: c \end{aligned}$$

d.h. $||x - x^0||_2 \leq c$ und somit $L(x^0) \subset K_c(x^0)$ beschränkt. Nach Definition ist $L(x^0)$ abgeschlossen und somit kompakt. Die Aussagen von Lemma 2.6 folgen dann aus dem folgenden Lemma.
□

Lemma 2.7
Sei $f \in C^2(\mathbb{R}^N, \mathbb{R})$, und $X \subset \mathbb{R}^N$ konvex. Betrachte das Problem

$$f(x) \stackrel{!}{=} min$$

unter der Nebenbedingung $x \in X$. Dann gilt:

a.) Ist f konvex auf X, so ist die Lösungsmenge von $f(x) \stackrel{!}{=} min$, $x \in X$ konvex.

b.) Ist f strikt konvex (d.h. $f(\lambda x^1 + (1-\lambda)x^2) < \lambda f(x^1) + (1-\lambda)f(x^2)$, $0 < \lambda < 1$, $x_1, x_2 \in X$) auf X, so existiert höchstens eine Lösung.

c.) Ist f gleichmäßig konvex auf X, X nicht leer und abgeschlossen, so gibt es genau eine Lösung $x^* \in X$.

Beweis:

a.) Seien x^1, x^2 zwei Lösungen von $f(x) \stackrel{!}{=} \min$, $x \in X$, also $f(x^1) = f(x^2) = \min\{f(x) \,|\, x \in X\}$. Für $\lambda \in]0,1[$ ist dann auch $\lambda x^1 + (1-\lambda)x^2 \in X$, da X konvex. Da f konvex ist, folgt

$$f(\lambda x^1 + (1-\lambda)x^2) \leq \lambda f(x^1) + (1-\lambda)f(x^2) = f(x^1) = \min\{f(x) \,|\, x \in X\}$$

d.h. auch $\lambda x^1 + (1-\lambda)x^2$ ist ein Minimum.

b.) Angenommen, die Aufgabe

$$f(x) \stackrel{!}{=} \min \quad \text{unter der Nebenbedingung } x \in X$$

besitzt 2 verschiedene Lösungen x^1, x^2, $x^1 \neq x^2$. Für $\lambda \in]0,1[$ ist dann wieder $\lambda x^1 + (1-\lambda)x^2 \in X$ und

$$f(\lambda x^1 + (1-\lambda)x^2) < \lambda f(x^1) + (1-\lambda) \underbrace{f(x^2)}_{=f(x_1)} = f(x^1) = \min\{f(x) \,|\, x \in X\}\,, \quad 0 < \lambda < 1\,.$$

Somit haben wir einen Widerspruch! Also folgt $x^1 = x^2$.

c.) Nach b.) existiert höchstens eine Lösung von

$$f(x) \stackrel{!}{=} \min \quad \text{unter der Nebenbedingung } x \in X\,.$$

Sei nun $x^0 \in X, X \neq \emptyset$ beliebig gewählt. Für $x, y \in L(x^0)$ gilt dann

$$f(\lambda x + (1-\lambda)y) \leq \lambda \underbrace{f(x)}_{\leq f(x^0)} + (1-\lambda) \underbrace{f(y)}_{\leq f(x^0)} \leq f(x^0)\,, \quad 0 \leq \lambda \leq 1$$

d.h. $L(x^0)$ ist eine konvexe Menge und somit nach Lemma 2.6 kompakt. Folglich ist $X \cap L(x^0)$ kompakt und nicht leer. Daher nimmt f als stetige Funktion sein globales Minimum x^* in $L(x^0) \cap X$ an. x^* ist dann natürlich auch das globale Minimum von f auf X.

□

3 Newton und Quasi-Newton Verfahren

3.1 Das lokale Verfahren

Betrachte das Problem

$$f(x) \stackrel{!}{=} \min$$

für $f \in C^2(D, \mathbb{R}), D \subset \mathbb{R}^N$. Ferner existiere ein $x^* \in D$ mit $\nabla f(x^*) = 0$ und $\nabla^2 f(x^*)$ positiv definit. Verwende wieder ein Verfahren der Form

$$x^{k+1} = x^k + t_k d^k\,, \quad k = 0, 1, 2, \cdots\,.$$

An den Iterierten x^k betrachten wir ein quadratisches Modell für f, d.h.

$$m_k(d) = f(x^k) + \nabla f(x^k)^T d + \frac{1}{2} d^T \nabla^2 f(x^k) d\,.$$

Für die Lösung d gilt

$$0 = \nabla m_k(d) = \nabla f(x^k) + \nabla^2 f(x^k) d \quad \Longleftrightarrow \quad \nabla^2 f(x^k) d = -\nabla f(x^k)\,.$$

Man setzt dann $x^{k+1} = x^k + d^k$ (d.h. $t_k = 1$). Dies entspricht gerade dem Newton-Verfahren

$$x^{k+1} = x^k - \nabla^2 f(x^k)^{-1} \nabla f(x^k)\,, \quad k = 0, 1, 2, ...$$

für die Gleichung $\nabla f(x) = 0$. Damit erhalten wir sofort einen lokalen Konvergenzsatz.

Satz 3.1
Vorgelegt sei das Problem $f(x) \stackrel{!}{=} \min$ für $f \in C^2(D, \mathbb{R}), D \subset \mathbb{R}^N$ offen. Ferner existiere ein $x^* \in D$ mit $\nabla f(x^*) = 0$ und $\nabla^2 f(x^*)$ positiv definit. Dann gibt es eine Kugel $K_\varphi(x^*) = \{x \in D \,|\, ||x - x^*||_\infty \leq \varphi\} \subset D$, $\varphi > 0$, so dass für jedes $x^0 \in K_\varphi(x^*)$ die Newtonfolge

$$x^{k+1} = x^k - (\nabla^2 f(x^k))^{-1} \nabla f(x^k)$$

in $K_\varphi(x^*)$ liegt und gegen x^* konvergiert. Überdies gibt es ein $C > 0$ mit

$$||x^{k+1} - x^*||_\infty \leq C ||x^k - x^*||_\infty^2 \quad \forall k \geq 0\,, \quad x^0 \in K_\varphi(x^*)\,.$$

"Lokal quadratische Konvergenzordnung"

3.2 Fehlerentwicklung von Differenzenquotienten

Da die Durchführung des Newton-Verfahrens die Auswertung der 2-ten Ableitung des Originalproblems erfordert, bietet sich eine numerische Approximation von Ableitungen an.

Analysiere jetzt die Fehlerentwicklung bei approximativer Auswertung einer Funktion h bei x und Verwendung von Differenzenquotienten. Sei

$$\tilde{h}(x) = h(x) + \tilde{\varepsilon}(x) \qquad \text{mit } |\tilde{\varepsilon}(x)| \leq \varepsilon\,, \quad \varepsilon > 0\,.$$

Bestimme die Ableitungen von h numerisch, z.B. durch den Vorwärtsdifferenzenquotient

$$D^+_{\Delta x} h(x) = \frac{\tilde{h}(x + \Delta x) - \tilde{h}(x)}{\Delta x}\,.$$

Dann gilt

$$\begin{aligned}
||D^+_{\Delta x}h(x) - h'(x)|| &= ||\frac{\tilde{h}(x+\Delta x) - \tilde{h}(x)}{\Delta x} - h'(x)|| \\
&= ||\frac{h(x+\Delta x) + \tilde{\varepsilon}(x+\Delta x) - h(x) - \tilde{\varepsilon}(x)}{\Delta x} - h'(x)|| \\
&\leq ||\frac{h(x+\Delta x) - h(x)}{\Delta x} - h'(x)|| + \frac{2\varepsilon}{\Delta x} \\
&= ||\frac{h(x) + h'(x)\Delta x + \frac{1}{2}h''(\xi)\Delta x^2 - h(x)}{\Delta x} - h'(x)|| + \frac{2\varepsilon}{\Delta x}\,, \qquad \xi \in]x, x+\Delta x[\\
&= \frac{\Delta x}{2}||h''(\xi)|| + \frac{2\varepsilon}{\Delta x} \\
&= O(\Delta x + \frac{\varepsilon}{\Delta x})\,.
\end{aligned}$$

Die Minimalstelle Δx^* der Fehlerfunktion

$$err(\Delta x) = \Delta x + \frac{\varepsilon}{\Delta x}\,.$$

erfüllt

$$err'(\Delta x) = 1 - \frac{\varepsilon}{\Delta x^2} = 0\,, \quad \text{d.h. } \nabla x^* = \sqrt{\varepsilon}\,.$$

Der Fehler in der 1-ten Ableitung ist also

$$err(\Delta x^*) = \Delta x^* + \frac{\varepsilon}{\Delta x^*} = \sqrt{\varepsilon} + \frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon}} = O(\sqrt{\varepsilon})$$

Ist nun z.B. $\varepsilon = 10^{-16}$ die Maschinengenauigkeit, so wendet man deshalb den Vorwärtsdifferenzenquotienten $D^+_{\Delta x}$ mit der Schrittweite $\Delta x^* = \sqrt{\varepsilon} = 10^{-8}$ an.

Für die Approximation der 2-ten Ableitung basierend auf zweifacher numerischer Differentation hat man den Fehler $O(\sqrt[4]{\varepsilon})$, d.h. die 2-te Ableitung wird basierend auf zweimalig numerischer Differentation relativ ungenau approximiert. Deshalb wertet man normalerweise bei $f(x) \stackrel{!}{=} \min$ die Funktion f und ∇f explizit aus und approximiert höchstens $\nabla^2 f(x)$.

3.3 Quasi-Newton Verfahren

Die Nachteile des Newton-Verfahrens für die Gleichung $\nabla f(x) = 0$ lauten:

- Es werden 2-te Ableitungen von f benötigt.
- $\nabla^2 f(x)$ muss positiv definit sein.
- Bei Lösung des Systems $\nabla^2 f(x^k)d = -\nabla f(x^k)$ mit dem Cholesky-Verfahren werden $O(N^3)$-Multiplikationen benötigt.

Quasi-Newton Verfahren haben folgende Grundstruktur:

- $x^{k+1} = x^k + t_k d^k\,, \quad k = 0, 1, 2, \cdots$.
- $d^k = -(B_k)^{-1}\nabla f(x^k)\,, \quad (B_k)^{-1} \in \mathbb{R}^{N,N}$.
- Verwende B_k um B_{k+1} zu erhalten.

Quasi-Newton Verfahren

- Approximiere 2-te Ableitungen durch 1-te Ableitungen.
- Erhalten die positive Definitheit von B^k.

Zur Motivation der Abstiegsrichtung d^{k+1} in x^{k+1} betrachten wir das quadratische Modell

$$m_{k+1}(d) = f(x^{k+1}) + \nabla f(x^{k+1})^T d + \frac{1}{2} d^T B_{k+1} d$$

mit $\nabla m_{k+1}(d) = \nabla f(x^{k+1}) + B_{k+1} \cdot d$.

Bedingungen an B_{k+1}:

Der Gradient von m_{k+1} und f soll bei x^k und x^{k+1} übereinstimmen, d.h.

$$\nabla m_{k+1}(0) = \nabla f(x^{k+1}),$$
$$\nabla m_{k+1}(-t_k d^k) = \nabla f(x^k).$$

Die erste Bedingung ist nach Konstruktion immer erfüllt, und die zweite Bedingung erfordert

$$\nabla m_{k+1}(-t_k d^k) = \nabla f(x^{k+1}) + B_{k+1}(-t_k d^k) \stackrel{!}{=} \nabla f(x^k) \quad \Longleftrightarrow \quad B_{k+1} t_k d^k = \nabla f(x^{k+1}) - \nabla f(x^k).$$

Mit $s^k = t_k d^k$, $y^k = \nabla f(x^{k+1}) - \nabla f(x^k)$ schreibt sich dies zu

$$B_{k+1} s^k = y^k. \quad \text{"Sekantengleichung"} \tag{35}$$

Die Forderung B_{k+1} positiv definit erzwingt dann insbesondere

$$0 < (s^k)^T B_{k+1} s^k = (s^k)^T y^k = t_k (d^k)^T \left(\nabla f(x^{k+1}) - \nabla f(x^k) \right), \quad k \in \mathbb{N}. \tag{36}$$

(36) ist z.B. erfüllt wenn $t_k > 0$ der Wolfe-Powell Bedingung

$$f(x^{k+1}) \leq f(x^k) + c_1 t_k \nabla f(x^k)^T d^k, \quad c_1 \in]0, \frac{1}{2}[\tag{37}$$
$$\nabla f(x^{k+1})^T d^k \geq c_2 \nabla f(x^k)^T d^k, \qquad c_2 \in]c_1, 1[\tag{38}$$

genügt. Dann gilt nämlich

$$(y^k)^T s^k = \left(\nabla f(x^{k+1}) - \nabla f(x^k) \right)^T t_k d^k \geq \underbrace{(c_2 - 1)}_{<0} t_k \underbrace{\nabla f(x^k)^T d^k}_{<0} > 0$$

d.h. (36) ist erfüllt.

Unter der Voraussetzung $(s^k)^T y^k > 0$ ist die Sekantengleichung lösbar. Eine eindeutige Bestimmung von B_{k+1} ist möglich als Lösung der Aufgabe

$$\min \{ ||B - B_k|| \,|\, B \in \mathbb{R}^{N,N} \text{ symmetrisch und positiv definit, } Bs^k = y^k \}.$$

Wählt man als Matrixnorm eine geeignete gewichtete Frobenius-Norm, so erhält man als eindeutige Lösung

$$B_{k+1} = (I - \rho_k y^k (s^k)^T) B_k (I - \rho_k s^k (y^k)^T) + \rho_k y^k (y^k)^T \quad \text{mit } \rho_k = \frac{1}{(y^k)^T s^k}. \tag{39}$$

(39) heißt die ***DFP-Aufdatierung*** und geht auf Davidon, Fletcher und Powell zurück.

3.4 Alternative Aufdatierung

Eine Alternative zur DFP-Aufdatierung erhält man, indem man nicht Bedingungen an die Matrix B_k sondern an ihre Inverse $H_k = B_k^{-1}$ stellt. Die Sekantengleichung lautet dann

$$s^k = (B_{k+1})^{-1} y^k = H_{k+1} y^k \,. \tag{40}$$

Man bestimmt dann H_{k+1} eindeutig als Lösung der Aufgabe

$$\min \{ ||H - H_k|| \,|\, H \in \mathbb{R}^{N,N} \text{ symmetrisch und positiv definit, } Hy^k = s^k \}$$

in einer gewichteten Frobenius-Norm. Die eindeutige Lösung lautet dann

$$H_{k+1} = (I - \rho_k s^k (y^k)^T) H_k (I - \rho_k y^k (s^k)^T) + \rho_k s^k (s^k)^T \quad \text{mit } \rho_k = \frac{1}{(y^k)^T s^k} \,. \tag{41}$$

(41) ***BFGS-Update-Formel*** (BFGS steht für Broyden, Fletcher, Goldfarb und Shanno).

Bemerkung 3.2
Die zu (41) äquivalente Update Formel für $B_{k+1} = H_{k+1}^{-1}$ lautet

$$B_{k+1} = B_k - \frac{B_k s^k (s^k)^T B_k}{(s^k)^T B_k s^k} + \frac{y^k (y^k)^T}{(y^k)^T s^k} \,. \tag{42}$$

Lemma 3.3
H_{k+1} aus (41) ist symmetrisch und positiv definit, falls H_k dies war.

Beweis: Die Symmetrie $H_{k+1}^T = H_{k+1}$ ist nach Definition klar. Bzgl. der Definitheit berechnet man

$$w^T H_{k+1} w = w^T (I - \rho_k s^k (y^k)^T) H_k (I - \rho_k y^k (s^k)^T) w + \underbrace{\rho_k}_{>0} w^T s^k (s^k)^T w = z^T H_k z + \rho_k (w^T s^k)^2 \geq 0$$

mit $z = (I - \rho_k y^k (s^k)^T) w$. Weiter gilt: Ist $w^T H_{k+1} w = 0$, so folgt $w^T s^k = 0$ und damit

$$w^T (I - \rho_k s^k (yk)^T) H_k (I - \rho_k y^k (s^k)^T w = w^T H_k w = 0 \quad \Rightarrow \quad w = 0$$

da H_k symmetrisch und positiv definit.
□

Dies führt nun zum BFGS-Algorithmus.

Input: $x^0 \in \mathbb{R}^N, \varepsilon > 0$ und $H_0 \in \mathbb{R}^{N,N}$ (Approximation für $(\nabla^2 f(x^0))^{-1}$) positiv definit

$k = 0$
while $||\nabla f(x^k)||_2 \geq \varepsilon$ **do**
  berechne $d^k = -H_k \nabla f(x^k)$;
  setze $x^{k+1} = x^k + t_k d^k$ mit t_k gemäß Wolfe-Powell;
  setze $s^k = x^{k+1} - x^k$, $y^k = \nabla f(x^{k+1}) - \nabla f(x^k)$ und berechne H_{k+1} gemäß

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

  setze $k = k + 1$;
end

`BFGS-Algorithmus`

Bemerkung 3.4

- Jede Iteration des BFGS-Algorithmus kann in $O(N^2)$-Operationen durchgeführt werden.
- Der BFGS-Algorithmus ist numerisch robust.
- Man benutze (41) statt (42) zur Aufdatierung wegen

$$d^k = -H_k \nabla f(x^k) = -B_k^{-1} \nabla f(x^k)\,. \qquad \text{(Aufwand!)}$$

Einige Details zur Implementierung des BFGS-Algoritmus:

- Bei der Liniesuche gemäß Wolfe-Powell sollte man (aus theoretischen Gründen) die Wahl $t_k = 1$ probieren. Praktische Werte für Wolfe- Powell sind $\alpha = 10^{-4}$ und $\rho = 0.9$.
- Für H_0 wählt man oft $H_0 = \beta I$ mit $\beta > 0$.

3.5 Konvergenz-Analyse der BFGS-Mehtode

Satz 3.5
Sei $f \in C^2(\mathbb{R}^N, \mathbb{R})$, und sei

$$L(x^0) = \{x \in \mathbb{R}^N \mid f(x) \leq f(x^0)\}$$

konvex. Ferner existieren $m, M > 0$ mit $mz^T z \leq z^T \nabla^2 f(x) z \leq M z^T z$ für $x \in L(x^0)$, $z \in \mathbb{R}^N$. Sei nun $B_0 \in \mathbb{R}^{N,N}$ symmetrisch und positiv definit, und sei $x^0 \in \mathbb{R}^N$.

Dann konvergiert die Folge $(x^k)_{k\in\mathbb{N}}$, $x^{k+1} = x^k + t_k d^k$, t_k gemäß Wolfe-Powell und $d^k = -B_k^{-1}\nabla f(x^k)$, $B_k^{-1} = H_k$ aus Algorithmus (BFGS) gegen die eindeutige Lösung $x^* \in L(x^0)$.

Bemerkung 3.6
Gemäß Lemma 2.6 und 2.7 hat die Aufgabe $f(x) \stackrel{!}{=} \min$ genau eine Lösung x^* in $L(x^0)$.

Beweis: Wir bemerken, dass das Verfahren in $L(x^0)$ wohldefiniert ist. Es gilt nämlich

$$(s^k)^T y^k > 0 \quad \text{für } k \in \mathbb{N}$$

gemäß (35) und der Wolfe-Powell Schrittweitensteuerung, gemäß Lemma 3.3 sind die Matrizen H_k, $k \in \mathbb{N}$ symmetrisch und positiv definit. Ferner ist $L(x^0)$ gemäß Lemma 2.6 kompakt und somit f nach unten beschränkt, d.h. nach Bemerkung 2.1 existiert eine Wolfe-Powell Schrittweite $t_k, k \in \mathbb{N}$. Sei nun $B_k = H_k^{-1}, k \in \mathbb{N}$ und sei

$$m_k = \frac{(y^k)^T s^k}{(s^k)^T s^k}\,, \quad M_k = \frac{(y^k)^T y^k}{(y^k)^T s^k}\,.$$

Nach Definition gilt

$$y^k = \nabla f(x^{k+1}) - \nabla f(x^k) = \nabla^2 f(\eta^k)(x^{k+1} - x^k) = \nabla^2 f(\eta^k) s^k$$

mit $\eta^k = x^{k+1} + \theta^k (x^{k+1} - x^k) \in L(x^0), \theta^k \in [0,1]$. Somit folgt

$$m_k = \frac{(s^k)^T \nabla^2 f(\eta^k) s^k}{(s^k)^T s^k} \geq m\,, k \in \mathbb{N}$$

$$M_k = \frac{(s^k)^T (\nabla^2 f(\eta^k))^2 s^k}{(s^k)^T \nabla f(\eta^k) s^k} = \frac{(w^k)^T \nabla^2 f(\eta^k) w^k}{(w^k)^T w^k} \leq M$$

für $k \in \mathbb{N}$ mit $w^k = (\nabla^2 f(\eta^k))^{1/2} s^k$, $\nabla^2 f(\eta^k)$ positiv definit. Die Analyse des BFGS-Algorithmus erfolgt mit der Aufdatierungsformel

$$B_{k+1} = B_k - \frac{B_k s^k (s^k)^T B_k}{(s^k)^T B_k s^k} + \frac{y^k (y^k)^T}{(y^k)^T s^k}\,.$$

Mit einigen Hilfslemmata aus der lineare Algebra findet man

$$\operatorname{tr}(B_{k+1}) = \operatorname{tr}(B_k) - \frac{||B_k s^k||_2^2}{(s^k)^T B_k s^k} + \frac{||y^k||_2^2}{(y^k)^T s^k}\,, \tag{43}$$

$$\det(B_{k+1}) = \det(B_k) \cdot \frac{(y^k)^T s^k}{(s^k)^T B_k s^k}\,. \tag{44}$$

Setze nun $\theta_k := \angle(s^k, B_k s^k)$, d.h.

$$\cos(\theta_k) = \frac{(s^k)^T B_k s^k}{||s^k||_2 \cdot ||B_k s^k||_2} \quad \text{und} \quad q_k := \frac{(s^k)^T B_k s^k}{(s^k)^T s^k}\,, \quad k \in \mathbb{N}\,.$$

Einsetzen in (44) liefert

$$\det(B_{k+1}) = \det(B_k) \cdot \frac{(y^k)^T s^k}{(s^k)^T s^k} \cdot \frac{(s^k)^T s^k}{(s^k)^T B_k s^k} = \det(B_k) \cdot \frac{m_k}{q_k}\,.$$

Definiere jetzt die Funktion

$$\psi : SP_n \to \mathbb{R}\,, \quad \psi(B) = \operatorname{tr}(B) - \ln(\det(B))$$

mit $SP_n = \{C \in \mathbb{R}^{N,N} \mid C \text{ symmetrisch und positiv definit}\}$. Dann gilt

$$\psi(B) = \operatorname{tr}(B) - \ln(\underbrace{\det(B)}_{>0}) = \sum_{i=1}^N \lambda_i - \ln\left(\prod_{i=1}^N \lambda_i\right) = \sum_{i=1}^N \lambda_i - \sum_{i=1}^N \ln(\lambda_i) = \sum_{i=1}^N \underbrace{\lambda_i - \ln(\lambda_i)}_{>0} > 0 \quad \forall B$$

mit $\lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_N > 0$ Eigenwerte von $B \in SP_n$. Zusammen mit (43)-(44) folgt dann

$$\begin{aligned}
\psi(B_{k+1}) &= \operatorname{tr}(B_{k+1}) - \ln(\det(B_{k+1})) \\
&= \operatorname{tr}(B_k) - \frac{||B_k s^k||_2^2}{(s^k)^T B_k s^k} + \underbrace{\frac{||y^k||_2^2}{(y^k)^T s^k}}_{=M_k} - \ln\left(\det(B_k) \cdot \frac{m_k}{q_k}\right) \\
&= \operatorname{tr}(B_k) - \underbrace{\frac{(B_k s^k)^T B_k s^k}{(s^k)^T B_k s^k}}_{=\frac{q_k}{\cos^2(\theta_k)}} + M_k - \ln(\det(B_k)) - \ln(m_k) + \ln(q_k) \\
&= \operatorname{tr}(B_k) - \frac{q_k}{\cos^2(\theta_k)} + M_k - \ln(\det(B_k)) - \ln(m_k) + \ln(q_k) \\
&= \psi(B_k) + M_k - \ln(m_k) - 1 + \left[1 - \frac{q_k}{\cos^2(\theta_k)} + \ln\left(\frac{q_k}{\cos^2(\theta_k)}\right)\right] + \ln(\cos^2(\theta_k))\,.
\end{aligned}$$

Mit $h(t) = 1 - t + \ln(t) \leq 0$ für $t \geq 0$ folgt

$$h\left(\frac{q_k}{\cos^2(\theta_k)}\right) = 1 - \frac{q_k}{\cos^2(\theta_k)} + \ln\left(\frac{q_k}{\cos^2(\theta_k)}\right) \leq 0$$

und somit

$$\begin{aligned} 0 < \psi(B_{k+1}) &\leq \psi(B_k) + (M_k - \ln(m_k) - 1) + \ln(\cos^2(\theta_k)) \\ &\leq \psi(B_k) + (M - \ln(m) - 1) + \ln(\cos^2(\theta_k))\,. \end{aligned} \tag{45}$$

Induktiv folgt aus (45)

$$\begin{aligned} 0 < \psi(B_{k+1}) &\leq \psi(B_0) + \underbrace{(M - \ln(m) - 1)}_{=c}(k+1) + \sum_{j=0}^{k} \ln(\cos^2(\theta_j)) \\ &= \varphi(B_0) + c(k+1) + \sum_{j=0}^{k} \ln(\cos^2(\theta_j))\,. \end{aligned} \tag{46}$$

Für die Quasi-Newton BFGS-Algorithmen gilt

$$s^k = -t_k B_k^{-1} \nabla f(x^k) \qquad (\textit{Quasi-Newton Richtung})$$

und somit

$$\theta_k = \angle(s^k, B_k s^k) = \angle(s^k, -t_k \nabla f(x^k)) = \angle(s^k, -\nabla f(x^k))$$

d.h. θ_k ist der Winkel zwischen der Richtung des steilsten Abstiegs ($-\nabla f(x^k)$) und der Suchrichtung s^k. Somit gilt gemäß Satz 2.2 (Theorem von Zoutendijk) sofort

$$\sum_{k=0}^{\infty} \cos^2(\theta_k) ||\nabla f(x^k)||_2^2 < \infty\,.$$

Annahme:

$$\cos(\theta_j) \to 0 \text{ für } j \to \infty.$$

Dann gilt $\ln(\cos^2(\theta_j)) < -2c$ für $j \geq \overline{k}$. Für $k > \overline{k}$ folgt mit (46)

$$0 < \psi(B_0) + c(k+1) + \sum_{l=0}^{\overline{k}} \ln(\cos^2(\theta_l)) + \underbrace{\sum_{l=\overline{k}+1}^{k} (-2c)}_{=(-2c)(k-\overline{k})} = \psi(B_0) + \sum_{l=0}^{\overline{k}} \ln(\cos^2(\theta_l)) + 2c\overline{k} + c - ck < 0$$

für $k \in \mathbb{N}$ hinreichend groß und somit Widerspruch!

Also existiert eine Teilfolge $(\theta_{j_l})_{l \in \mathbb{N}}$ mit

$$\cos^2(\theta_{j_l}) \geq \delta > 0\,, \quad l \in \mathbb{N}$$

und somit erhalten wir

$$\sum_{j=0}^{\infty} \cos^2(\theta_j) \geq \sum_{l=0}^{\infty} \cos^2(\theta_{j_l}) \geq \sum_{l=0}^{\infty} \delta = \infty\,, \quad \text{d.h. } \sum_{j=0}^{\infty} \cos^2(\theta_j) = \infty\,.$$

Da die Wolfe-Powell Schrittweiten $t_k > 0$ effizient sind, ist Satz 2.5 anwendbar und liefert $\lim\limits_{k \to \infty} x^k = x^*$.
□

Bemerkung 3.7

- Man kann nun sogar zeigen, dass der BFGS-Algorithmus unter der Voraussetzung von Satz 3.5 nicht nur global, sondern auch superlinear konvergiert und zwar weiterhin mit beliebigen Startvektoren x^0 und symmetrisch und positiv definiter Startmatrix $H_0 \in \mathbb{R}^{N,N}$.

- Superlineare Konvergenz heißt

$$\lim_{k\to\infty} \frac{||x^{k+1} - x^*||_2}{||x^k - x^*||_2} = 0\,.$$

Kapitel III: Numerische Verfahren für allgemeine Optimierungsprobleme

1 Verfahren für quadratische Optimierungsaufgaben

Vorgelegt sei die Aufgabe

$$(I) = \begin{cases} f(x) = \frac{1}{2}x^TQx + c^Tx + \gamma \stackrel{!}{=} \min \\ \textit{unter den Nebenbedingungen} \\ g_i(x) = a_i^Tx - b_i = 0\,, \qquad i = 1, ..., l \\ k_i(x) = a_{l+i}^Tx - b_{l+i} \geq 0\,, \quad i = 1, ..., q \\ \textit{mit } Q \in \mathbb{R}^{N,N} \textit{ symmetrisch und } c, a_1, ..., a_{l+q} \in \mathbb{R}^N \textit{ sowie } \gamma, b_1, ..., b_{l+q} \in \mathbb{R}. \end{cases}$$

Die Karush-Kuhn-Tucker Bedingungen für (I) lauten

$$\begin{aligned} Qx + c - \sum_{i=1}^{l} \lambda_i a_i - \sum_{i=1}^{q} \mu_i a_{l+i} &= 0 \\ \mu_i(a_{l+i}^Tx - b_{l+i}) &= 0\,, \quad i = 1, ..., q \\ a_i^Tx - b_i &= 0 \\ a_{l+i}^Tx - b_{l+i} &\geq 0\,, \quad \mu \geq 0\,. \end{aligned}$$

Ist nun $Q \in \mathbb{R}^{N,N}$ positiv semidefinit, so wird (I) zu einem konvexen Optimierungsproblem (d.h. f konvex, k_i konkav, $i = 1, ..., q$) und es gilt das folgende Lemma.

Lemma 1.1
Vorgelegt sei ein konvexes Optimierungsproblem der Form (I). Erfüllt x^* die Karuh-Kuhn-Tucker Bedingungen, so ist x^* globales Minimum von (I).

Beweis: Siehe Aufgabe 1b), Blatt 3.

Bemerkung 1.2

- Im Fall der Konvexität folgt also aus den KKT-Bedingungen automatisch die Optimalität.
- Ein konvexes quadratisches Problem (I) kann aber unter Umständen keine zulässigen Punkte besitzen, wie z.B.

  $$f(x) = x^2 \stackrel{!}{=} \min$$

  unter der Nebenbedingung $g(x) = 0^Tx - 1 = 0$.

  Ist die Menge der zulässigen Punkte

  $$Z = \{x \in \mathbb{R}^N \mid a_i^Tx - b_i = 0,\, i = 1, ..., l\,,\ a_{i+l}^Tx - b_{l+i} \geq 0,\, i = 1, ..., q\} \neq \emptyset\,,$$

  so ist diese konvex und die Existenz einer Lösung folgt aus Lemma 2.6, Kapitel II.
- Ist $Q \in \mathbb{R}^{N,N}$ nicht positiv definit, so kann das quadratische Optimierungsproblem (I) mehrere lokale Lösungen haben.

1.1 Innere-Punkte-Verfahren für quadratische Probleme

Vorgelegt sei die Aufgabe

$$(II) = \begin{cases} f(x) = \frac{1}{2}x^T Qx + c^T x + \gamma \stackrel{!}{=} \min, \\ Q \in \mathbb{R}^{N,N} \text{ symmetrisch, positiv definit, } c \in \mathbb{R}^N \text{ und } \gamma \in \mathbb{R} \text{ unter den Nebenbedingungen} \\ k(x) = Ax - b \geq 0\,, \quad A \in \mathbb{R}^{q,N}\,,\ b \in \mathbb{R}^q\,. \end{cases}$$

Lineare Gleichungsrestriktionen lassen wir aus technischen Gründen beiseite, da man sie durch Reduktion der Variablenanzahl beseitigen kann.

Ist x^* eine lokale Lösung von (II), so lauten die notwendigen Optimalitätsbedingungen 1-ter Ordnung

$$\begin{aligned} Qx + c - A^T\mu &= 0 \\ Ax - b &\geq 0 \\ (Ax-b)_i\mu_i = 0\,, \quad i = 1,...,q \text{ und } \mu &\geq 0\,. \end{aligned}$$

Führe nun die Slack-Variablen $y = Ax - b \in \mathbb{R}^q$ ein und erhalte die modifizierten KKT-Gleichungen

$$Qx + c - A^T\mu = 0 \tag{47}$$
$$Ax - b - y = 0 \tag{48}$$
$$y_i\mu_i = 0\,, \quad i = 1,...,q \text{ und } y, \mu \geq 0\,. \tag{49}$$

Mit $Y = \operatorname{diag}(y_1,...,y_q)\,, M = \operatorname{diag}(\mu_1,...,\mu_q)$ schreibt sich (47)-(49) in der Form

$$F(x,y,\mu) = \begin{pmatrix} Qx - A^T\mu + c \\ b - Ax + y \\ YM\mathbb{I} \end{pmatrix} = 0 \quad \text{mit } y, \mu \geq 0 \text{ und } \mathbb{I} = \begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^q\,.$$

Sei (x, y, μ) eine aktuelle Iterierte. Dann nennt man

$$\eta := \frac{y^T\mu}{q}$$

die **gewichtete Dualitätslücke**.

Sei $\tau > 0$. Die Lösungen $(x_\tau, y_\tau, \mu_\tau)$ von

$$F(x,y,\mu) = \begin{pmatrix} Qx - A^T\mu + c \\ b - Ax + y \\ YM\mathbb{I} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \tau\mathbb{I} \end{pmatrix}\,, \quad (y,\mu) > 0 \tag{50}$$

heißen **zentraler Pfad** $\mathcal{C}$. $\mathcal{C}$ ist eine Kurve in $\mathbb{R}^{N+2q}$ welche für $\tau \to 0$ gegen die Lösung des quadratischen Problems (II) konvergiert.

Zur Lösung von (50) geht man wie folgt vor. Wähle $\sigma \in [0,1]$, setze $\tau = \sigma\eta$ und wende ein gedämpftes Newton-Verfahren zur Lösung von (50) an. Ein Newton Schritt für (50) lautet

$$\begin{pmatrix} Q & 0 & -A^T \\ -A & I & 0 \\ 0 & M & Y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta y \\ \Delta\mu \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -Qx + A^T\mu - c \\ Ax - y - b \\ -YM\mathbb{I} + \sigma\eta\mathbb{I} \end{pmatrix}\,. \tag{51}$$

Die nächste Iterierte ist dann für $\alpha \in]0,1]$ gegeben durch

$$(x^+, y^+, \mu^+) = (x, y, \mu) + \alpha(\Delta x, \Delta y, \Delta\mu)\,.$$

Dabei ist $\alpha \in]0,1]$ so zu wählen, dass $(y^+, \mu^+) > 0$ erfüllt ist.

Der Hauptaufwand eines Inneren-Punkte Verfahrens besteht in der Regel in der Lösung des Systems (51). Deshalb ist es wichtig, die spezielle Struktur von (51) auszunutzen.

Aus der 3-ten Zeile von (51) folgt

$$\Delta y = M^{-1}(-MY\mathbb{I} + \sigma\eta\mathbb{I} - Y\Delta\mu) = -Y\mathbb{I} + \sigma\eta M^{-1}\mathbb{I} - M^{-1}Y\Delta\mu = -y + \sigma\eta M^{-1}\mathbb{I} - M^{-1}Y\Delta\mu\,.$$

Setze dies in die 2-te Zeile von (51) ein und finde

$$\begin{aligned} b + y - Ax = A\Delta x - \Delta y &= A\Delta x + y - \sigma\eta M^{-1}\mathbb{I} + M^{-1}Y\Delta\mu \\ &= (A\,, M^{-1}Y)\begin{pmatrix}\Delta x\\ \Delta\mu\end{pmatrix} - (-y + \sigma\eta M^{-1}\mathbb{I})\,, \text{ d.h.} \end{aligned}$$

$$\begin{pmatrix} Q & -A^T \\ A & M^{-1}Y \end{pmatrix}\begin{pmatrix}\Delta x\\ \Delta\mu\end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -Qx + A^T\mu - c \\ -Ax + y + b + (-y + \sigma\eta M^{-1}\mathbb{I})\end{pmatrix}\,. \tag{52}$$

Aus der 2-ten Zeile von (52) folgt

$$\Delta\mu = Y^{-1}M(-Ax + b + \sigma\eta M^{-1}\mathbb{I} - A\Delta x)$$

d.h. die erste Zeile von (52) liefert das System

$$(Q + A^TY^{-1}MA)\Delta x = -Qx + A^T\mu - c - A^TY^{-1}M(-Ax + b + \sigma\eta M^{-1}\mathbb{I})\,. \tag{53}$$

Das System (53) kann z.B. mit dem Cholesky-Verfahren gelöst werden.

Schrittweiten-Bestimmung des gedämpften Newton-Verfahrens

Die am meisten verwendete Variante des Innere-Punkte Algorithmus basiert auf dem Prädiktor-Korrektor-Algorithmus von Mehrotra.

Zuerst wird ein affiner Skalierungsschritt $(\Delta x^{aff}, \Delta y^{aff}, \Delta\mu^{aff})$ bestimmt, indem (51) mit $\sigma = 0$ gelöst wird. Die erhaltene Richtung wird dann in einem Korrekturschritt verbessert, wobei die Lösung von (51) mit

$$\sigma = \left(\frac{\eta^{aff}}{\eta}\right)^3\,, \quad \eta^{aff} = \frac{1}{q}(y + \alpha^{aff}\Delta y^{aff})^T(\mu + \alpha^{aff}\Delta\mu^{aff})$$

$$\text{und} \quad \alpha^{aff} = \max\{\alpha \in]0,1] \,|\, (y,\mu) + \alpha(\Delta y^{aff}, \Delta\mu^{aff}) \geq 0\}$$

berechnet wird. Im Korrekturschritt löst man das System

$$\begin{pmatrix} Q & 0 & -A^T \\ -A & I & 0 \\ 0 & M & Y \end{pmatrix}\begin{pmatrix}\Delta x\\ \Delta y\\ \Delta\mu\end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -Qx + A^T\mu - c \\ Ax - y - b \\ -MY\mathbb{I} - \Delta M^{aff}\Delta Y^{aff}\mathbb{I} + \sigma\eta\mathbb{I}\end{pmatrix} \tag{54}$$

mit $\Delta M^{aff} = \mathrm{diag}(\Delta\mu^{aff}), \Delta Y^{aff} = \mathrm{diag}(\Delta y^{aff})$.

Insgesamt erhalten wir den folgenden Algorithmus:

Wähle (x^0, y^0, μ^0) mit $y^0, \mu^0 > 0$ und wähle $\tau \in]0,1[$.
for $k = 0, 1, 2, ...$ **do**
- mit (x^k, y^k, μ^k) löse (51) mit $\sigma = 0$ für $(\Delta x^{aff}, \Delta y^{aff}, \Delta \mu^{aff})$;
- berechne $\eta = \frac{1}{q}(y^k)^T \mu^k$;
- setze $\hat{\alpha}^{aff} = \max\{\alpha \in]0,1] \,|\, (y^k, \mu^k) + \alpha(\Delta y^{aff}, \Delta \mu^{aff}) \geq 0\}$;
- bestimme $\eta^{aff} = (y^k + \hat{\alpha}^{aff} \Delta y^{aff})^T (\mu^k + \hat{\alpha}^{aff} \Delta \mu^{aff})$ und setze $\sigma = \left(\frac{\eta^{aff}}{\eta}\right)^3$;
- löse (54) für $(\Delta x, \Delta y, \Delta \mu)$;
- setze $\hat{\alpha} := \min(\alpha_y, \alpha_\mu)$ mit
  $\alpha_y = \max\{\alpha \in]0,1[\,|\, y^k + \alpha \Delta y \geq (1-\tau) y^k\}$;
  $\alpha_\mu = \max\{\alpha \in]0,1[\,|\, \mu^k + \alpha \Delta \mu \geq (1-\tau) \mu^k\}$;
- setze $(x^{k+1}, y^{k+1}, \mu^{k+1}) = (x^k, y^k, \mu^k) + \hat{\alpha}(\Delta x, \Delta y, \Delta \mu)$;

end

`PRAED.-KORR Algorithmus` für Quadratische Probleme

Abbruchkriterium: $||F(x^k, y^k \mu^k)||_\infty \leq$ `EPS`.

2 Lokale SQP (sequential quadratic programming) Methoden

Wir betrachten zunächst das Problem

$$(III) = \begin{cases} f(x) \stackrel{!}{=} \min \\ \textit{unter der Nebenbedingung} \\ g(x) = 0 \\ \textit{für } f \in C^2(D, \mathbb{R}), g \in C^2(D, \mathbb{R}^l), D \subset \mathbb{R}^N \textit{ offen.} \end{cases}$$

Die Lagrange-Funktion zu (III) lautet

$$L(x, \lambda) = f(x) - \sum_{i=1}^{l} \lambda_i g_i(x)$$

und die KKT-Bedingungen ergeben sich zu

$$F(x, \lambda) = \begin{pmatrix} \frac{\partial L}{\partial x}(x, \lambda) \\ \frac{\partial L}{\partial \lambda}(x, \lambda) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \nabla f(x) - Dg(x)^T \lambda \\ -g(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{55}$$

Ist x^* eine reguläre Lösung von (III), so existiert zu x^* ein Lagrange-Multiplikator λ^* mit $F(x^*, \lambda^*) = 0$. Wir lösen (55) mit dem Newton-Verfahren. Die Jacobi-Matrix lautet

$$DF(x, \lambda) = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2}{\partial x^2} L(x, \lambda) & -Dg(x)^T \\ -Dg(x) & 0 \end{pmatrix}.$$

Damit ist ein Newton-Schritt gegeben als

$$\begin{pmatrix} x^{k+1} \\ \lambda^{k+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x^k \\ y^k \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \Delta x^k \\ \Delta \lambda^k \end{pmatrix} \tag{56}$$

mit

$$\frac{\partial^2 L}{\partial x^2}(x^k,\lambda^k)\Delta x^k - Dg(x^k)^T\Delta\lambda^k = -\nabla f(x^k) + Dg(x^k)^T\lambda^k\,, \qquad -Dg(x^k)\Delta x^k = g(x^k)\,. \tag{57}$$

(56)-(57) heißt **Lagrange-Newton-SQP Verfahren**.

Bemerkung 2.1
Ist x^* eine reguläre Lösung von (III) und ist $\frac{\partial^2 L}{\partial x^2}(x^*,\lambda^*)$ positiv definit auf dem kritischen Kegel $C(x^*) = N(Dg(x^*))$, so konvergiert das Lagrange-Newton-SQP-Verfahren lokal quadratisch, d.h. es gilt

$$||(x^{k+1},\lambda^{k+1}) - (x^*,\lambda^*)|| \le C||(x^k,\lambda^k) - (x^*,\lambda^*)||^2\,,$$

falls $||(x^0,\lambda^0) - (x^*,\lambda^*)||$ hinreichend klein.

Nach dem lokalen Konvergenzsatz des Newton-Verfahrens ist hierzu zu zeigen, dass

$$DF(x^*,\lambda^*) \text{ invertierbar ist}\,.$$

Sei $h = \begin{pmatrix} h_1 \\ h_2 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{N+l}$ in $N(DF(x^*,\lambda^*))$, d.h.

$$\frac{\partial^2 L}{\partial x^2}(x^*,\lambda^*)h_1 - Dg(x^*)^T h_2 = 0 \tag{58}$$

$$Dg(x^*)h_1 = 0\,. \tag{59}$$

Gemäß (59) gilt $h_1 \in N(Dg(x^*))$. Multipliziere (58) mit h_1^T und finde

$$h_1^T\frac{\partial^2 L}{\partial x^2}(x^*,\lambda^*)h_1 - \underbrace{h_1^T Dg(x^*)^T}_{=(Dg(x^*)h_1)^T=0^T} h_2 = h_1^T\frac{\partial^2 L}{\partial x^2}(x^*,\lambda^*)h_1 = 0 \quad\Longrightarrow\quad h_1 = 0$$

da $\frac{\partial^2 L}{\partial x^2}(x^*,\lambda^*)$ positiv definit auf $N(Dg(x^*))$. (58) liefert dann

$$Dg(x^*)^T h_2 = 0$$

und mit $\mathrm{rg}(Dg(x^*)) = l$ folgt $h_2 = 0$.

2.1 Eine neue Motivation für die Iteration (56) − (57)

Betrachte das quadratische Problem

$$(IV) = \begin{cases} \tilde f(\Delta x) = \nabla f(x^k)^T\Delta x + \frac{1}{2}\Delta x^T\frac{\partial^2 L}{\partial x^2}(x^k,\lambda^k)\Delta x \stackrel{!}{=} \min \\ \textit{unter der Nebenbedingung} \\ \tilde g(\Delta x) = g(x^k) + Dg(x^k)\Delta x = 0\,. \end{cases}$$

Die KKT-Bedingungen für (IV) lauten

$$\nabla\tilde f(\Delta x) - D\tilde g(\Delta x)^T\tilde\lambda = 0\,, \qquad \tilde g(\Delta x) = 0\,.$$

Mit

$$\nabla\tilde f(\Delta x) = \nabla f(x^k) + \frac{\partial^2 L}{\partial x^2}(x^k,\lambda^k)\Delta x \quad \text{ und } \quad D\tilde g(\Delta x) = Dg(x^k)$$

erhalten wir

$$\nabla f(x^k) + \frac{\partial^2 L}{\partial x^2}(x^k, \lambda^k)\Delta x - Dg(x^k)^T\tilde{\lambda} = 0$$
$$g(x^k) + Dg(x^k)\Delta x = 0\,.$$

Dies ist äquivalent zu

$$\frac{\partial^2 L}{\partial x^2}(x^k, \lambda^k)\Delta x - Dg(x^k)^T(\tilde{\lambda} - \lambda^k) = -\nabla f(x^k) + Dg(x^k)^T\lambda^k \tag{60}$$
$$-Dg(x^k)\Delta x = g(x^k)\,. \tag{61}$$

Der Vergleich von (56)-(57) mit (60)-(61) liefert

$$\Delta x^k = \Delta x \text{ und } \Delta\lambda^k = \tilde{\lambda} - \lambda^k\,, \quad \text{d.h.} \quad \Delta x^k = \Delta x \text{ und } \lambda^k + \Delta\lambda^k = \tilde{\lambda} = \lambda^{k+1}\,, \text{ d.h.}$$

das quadratische Problem (IV) hat die Lösung $\Delta x = \Delta x^k$ mit Lagrange-Multiplikator λ^{k+1}.

Damit sind ein Schritt eines Newton-Verfahrens und das Lösen des quadratischen Problems äquivalent.

Wähle Startwerte (x^0, y^0).
for $k = 0, 1, 2, ...$ **do**
- löse das quadratische Problem (IV) für $\Delta x, \tilde{\lambda}$;
- setze $x^{k+1} = x^k + \Delta x$, $\lambda^{k+1} = \tilde{\lambda}$;
- prüfe die Abbruchkriterien;

end

LOKALE SQP-METHODE

Bemerkung 2.2

- Die lokal quadratische Konvergenz des obigen Algorithmus folgt aus der lokal quadratischen Konvergenz des Newton-Verfahren an einer regulären Lösung (x^*, λ^*).

- Unter Umständen ist die Matrix

$$\frac{\partial^2 L}{\partial x^2}L(x^k, \lambda^k) = \nabla^2 f(x^k) - \sum_{i=1}^{l}\lambda_i\nabla^2 g_i(x^k)$$

  schwer zu berechnen oder nicht positiv definit auf $N(Dg(x^k))$. Eine Alternative ist daher, die Matrix $\frac{\partial^2 L}{\partial x^2}(x^k, \lambda^k)$ durch ein Quasi-Newton-BFGS-Update B_k zu ersetzen.

- Der SQP-Rahmen kann leicht auf allgemeine Optimierungsprobleme $f(x) \stackrel{!}{=} \min$ unter der Nebenbedingung $g(x) = 0$ und $k(x) \geq 0$ erweitert werden. Ersetze hierzu an der Stelle (x^k, λ^k, μ^k) (IV) durch das quadratische Problem

$$(V) = \begin{cases} \tilde{f}(\Delta x) = \nabla f(x^k)^T\Delta x + \frac{1}{2}\Delta x^T\frac{\partial^2 L}{\partial x^2}(x^k, \lambda^k, \mu^k)\Delta x \stackrel{!}{=} \min \\ \textit{unter den Nebenbedingungen} \\ \tilde{g}(\Delta x) = g(x^k) + Dg(x^k)\Delta x = 0\,, \\ \tilde{k}(\Delta x) = k(x^k) + Dk(x^k)\Delta x \geq 0\,. \end{cases}$$

  Eventuell wird in (V) $\frac{\partial^2 L}{\partial x^2}(x^k, \lambda^k, \mu^k)$ durch eine positiv definite Matrix H^k ersetzt.

3 Globale SQP-Methoden

3.1 Penalty-Funktionen

Betrachte die Aufgabe

$$(VI) = \begin{cases} f(x) \stackrel{!}{=} \min \\ f \in C^2(\mathbb{R}^N, \mathbb{R}) \text{ mit einem zulässigen Bereich} \\ Z = \{x \in \mathbb{R}^N \mid g(x) = 0,\ k(x) \geq 0\} \\ \text{mit } g \in C^2(\mathbb{R}^N, \mathbb{R}^l), k \in C^2(\mathbb{R}^N, \mathbb{R}^q)\,. \end{cases}$$

Eine Klasse von **Penalty-Funktionen** erhält man aus dem Ansatz

$$P(x, \alpha) = f(x) + \alpha r(x) \tag{62}$$

mit $r \in C(\mathbb{R}^N, \mathbb{R})$, $r(x) \geq 0\ \forall x \in \mathbb{R}^N$ und $r(x) = 0 \Leftrightarrow x \in Z$.

Die Funktion r bestraft also gerade das Verlassen des zulässigen Bereiches Z.

Definition 3.1
*Eine Penalty-Funktion der Form (62) heißt **exakt** in einem lokalen Minimum x^* von (VI), falls ein $\overline{\alpha} > 0$ existiert, so dass x^* für alle $\alpha \geq \overline{\alpha}$ auch ein lokales Minimum von $P(\cdot, \alpha)$ ist.*

Bemerkung 3.2
Es lässt sich zeigen, dass bei exakten Penalty-Funktionen in x^* die zugehörige Funktion r in x^* nicht differenzierbar sein kann.

Wir betrachten hier die l^1-Penalty-Funktion

$$P_1(x, \alpha) = f(x) + \alpha \left(\sum_{j=1}^{l} |g_j(x)| - \sum_{i=1}^{q} \min(0, k_i(x)) \right)\,.$$

Der Nachweis der Exaktheit gelingt am einfachsten bei konvexen Optimierungsproblemen.

Lemma 3.3
Sei (x^*, λ^*, μ^*) KKT-Punkt des Optimierungsproblems (VI) mit $g_i(x) = \alpha_i^T x - \beta_i = 0$, $i = 1, ..., l$, $k_i(x) \geq 0$, $i = 1, ..., q$ mit f konvex und k_i konkav, $i = 1, ..., q$. Dann existiert ein Penalty-Parameter $\overline{\alpha} > 0$, so dass x^* für $\alpha \geq \overline{\alpha}$ auch ein Minimum von $P_1(\cdot, \alpha)$ ist.

Bemerkung 3.4
Nach Aufgabe 1b), Blatt 3, ist x^* auch globales Minimum von (VI).

Lemma 3.5
Voraussetzungen wie in Lemma 3.3. Es sei

$$L(x, \lambda, \mu) = f(x) - \sum_{i=1}^{l} \lambda_i g_i(x) - \sum_{i=1}^{q} \mu_i k_i(x)\,.$$

$(x^*, \lambda^*, \mu^*), \mu^* \geq 0$ sei Sattelpunkt d.h. es gilt

$$L(x^*, \lambda, \mu) \leq L(x^*, \lambda^*, \mu^*) \leq L(x, \lambda^*, \mu^*) \qquad \forall x, \lambda, \mu, \quad \mu \geq 0\,.$$

Erfüllt (x^*, λ^*, μ^*) die KKT-Bedingungen, so ist (x^*, λ^*, μ^*) ein Sattelpunkt.

Beweis: (x^*, λ^*, μ^*) ist KKT-Punkt, d.h. $\frac{\partial L}{\partial x}(x^*, \lambda^*, \mu^*) = 0$, d.h. x^* ist stationärer Punkt von $L(\cdot, \lambda^*, \mu^*)$. Ferner ist $L(\cdot, \lambda^*, \mu^*)$ konvex, da f konvex und k_i, $i = 1, ..., q$ konkav, $\mu^* \geq 0$. Somit gilt

$$L(x, \lambda^*, \mu^*) - L(y, \lambda^*, \mu^*) \geq \frac{\partial L}{\partial x}(y, \lambda^*, \mu^*)(x - y) \qquad \forall x, y \in \mathbb{R}^N .$$

Wende dies an mit $y = x^*$ und finde

$$L(x, \lambda^*, \mu^*) - L(x^*, \lambda^*, \mu^*) \geq 0 \qquad \forall x \in \mathbb{R}^N .$$

Desweiteren folgt mit $k_i(x^*) \geq 0, g_i(x^*) = 0, \mu_i^* k_i(x^*) = 0$ sofort

$$\begin{aligned} L(x^*, \lambda^*, \mu^*) &= f(x^*) - \sum_{i=1}^{l} \lambda_i^* g_i(x^*) - \sum_{i=1}^{q} \mu_i^* k_i(x^*) = f(x^*) \\ &\geq f(x^*) - \sum_{i=1}^{l} \lambda_i \underbrace{g_i(x^*)}_{=0} - \sum_{i=1}^{q} \underbrace{\mu_i}_{\geq 0} \underbrace{k_i(x^*)}_{\geq 0} = L(x^*, \lambda, \mu) \quad \forall \lambda, \mu \text{ mit } \mu \geq 0 . \end{aligned}$$

□

Beweis von Lemma 3.3: Sei (x^*, λ^*, μ^*) KKT-Punkt, so ist nach Lemma 3.5 (x^*, λ^*, μ^*) Sattelpunkt, d.h.

$$L(x^*, \lambda^*, \mu^*) \leq L(x, \lambda^*, \mu^*) \qquad \forall x \in \mathbb{R}^N .$$

Setze jetzt $\overline{\alpha} := ||(\lambda^*, \mu^*)||_\infty = \max\{|\lambda_1^*|, \ldots, |\lambda_l^*|, \mu_1, \ldots, \mu_q\}$ und wähle $\alpha \geq \overline{\alpha}$. Es gilt

$$\begin{aligned} P_1(x^*, \alpha) &= f(x^*) + \alpha \underbrace{\left(\sum_{j=1}^{l} |\overbrace{g_j(x^*)}^{=0}| - \sum_{j=1}^{q} \overbrace{\min(0, k_j(x^*))}^{=0} \right)}_{=r(x^*)} \\ &= f(x^*) \\ &= f(x^*) - \sum_{i=1}^{l} \lambda_i^* g_i(x^*) - \sum_{i=1}^{q} \mu_i^* k_i(x^*) \\ &= L(x^*, \lambda^*, \mu^*) \\ &\leq L(x, \lambda^*, \mu^*) \\ &= f(x) - \sum_{i=1}^{l} \lambda_i^* g_i(x) - \sum_{i=1}^{q} \mu_i^* k_i(x) \\ &\leq f(x) + \sum_{i=1}^{l} |\lambda_i^*||g_i(x)| - \sum_{i=1}^{q} \mu_i^* \min(0, k_i(x)) \\ &\leq f(x) + \overline{\alpha} \underbrace{\left(\sum_{i=1}^{l} |g_i(x)| - \sum_{i=1}^{q} \min(0, k_i(x)) \right)}_{=r(x)} \\ &= f(x) + \overline{\alpha} r(x) \leq f(x) + \alpha r(x) = P_1(x, \alpha) \quad \forall x \in \mathbb{R}^N . \end{aligned}$$

□

3.2 Globalisierung von SQP-Verfahren

Es wird sich herausstellen, dass eine Lösung Δx^k eines bei x^k linearisierten quadratischen Teilproblems unter gewissen Voraussetzungen eine Abstiegsrichtung der l_1-Penalty-Funktion

$$P_1(x,\alpha) = f(x) + \alpha \left(\sum_{j=1}^{l} |g_j(x)| - \sum_{i=1}^{q} \min(0, k_i(x)) \right)$$

ist, so dass sich ein SQP-Verfahren mit einer geeigneten Schrittweitenstrategie für $P_1(\cdot,\alpha)$ globalisieren lässt. Allerdings ist $P_1(\cdot,\alpha)$ nicht überall differenzierbar. Wir berechnen stattdessen die Richtungsableitung im Punkt x in Richtung d gemäß

$$h'(x;d) = \lim_{t \to 0} \frac{h(x+td) - h(x)}{t}, \quad h : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}.$$

Lemma 3.6

a.) *Sei $N = 1$, $h(x) = |x|$, so gilt*

$$h'(x;d) = \begin{cases} d & \text{für } x > 0 \\ |d| & \text{für } x = 0 \\ -d & \text{für } x < 0 \end{cases}.$$

´

b.) *Sei $N = 1$, $h(x) = \min(0,x)$, so folgt*

$$h'(x;d) = \begin{cases} 0 & \text{für } x > 0 \\ \min(0,d) & \text{für } x = 0 \\ d & \text{für } x < 0 \end{cases}.$$

Beweis:

a.) Ist $x \neq 0$, so ist h differenzierbar in x und daher folgt

$$h'(x;d) = h'(x)d = \begin{cases} d & \text{für } x > 0 \\ -d & \text{für } x < 0 \end{cases}.$$

Für $x = 0$ gilt

$$h'(0;d) = \lim_{t \searrow 0} \frac{h(0+td) - h(0)}{t} = \lim_{t \searrow 0} \frac{t|d|}{t} = |d|.$$

b.) Ist $x \neq 0$, so ist h differenzierbar in x mit

$$h'(x;d) = h'(x)d = \begin{cases} d & \text{für } x > 0 \\ 0 & \text{für } x < 0 \end{cases}.$$

Für $x = 0$ erhält man

$$h'(0;d) = \lim_{t \searrow 0} \frac{h(0+td) - h(0)}{t} = \lim_{t \searrow 0} \frac{\min(0,td)}{t} = \min(0,d).$$

Bemerkung 3.7

Ferner gilt für richtungsdifferenzierbare Funktionen die Kettenregel.

Korollar 3.8
Die Richtungsableitung der l^1-Penalty-Funktion

$$P_1(x,\alpha) = f(x) + \alpha \left[\sum_{j=1}^{l} |g_j(x)| - \sum_{i=1}^{q} \min(0, k_i(x)) \right]$$

im Punkt x in Richtung d ist gegeben durch

$$P_1'(x,\alpha;d) = \nabla f(x)^T d + \alpha \Big[\sum_{g_j(x)>0} \nabla g_j(x)^T d + \sum_{g_j(x)=0} |\nabla g_j(x)^T d| + \sum_{g_j(x)<0} (-\nabla g_j(x)^T d) - \sum_{k_j(x)<0} \nabla k_j(x)^T d - \sum_{k_j(x)=0} \min(0, \nabla k_j(x)^T d) - 0 \Big] .$$

Beweis: Anwendung von Lemma 3.6 und Bemerkung 3.7.
□

An dieser Stelle kehren wir zurück zum SQP-Verfahren und betrachten zu einem Punkt x^k und einer gegebenen symmetrisch und positiv definiten Matrix H_k das quadratische Teilproblem

$$(VII) = \begin{cases} \nabla f(x^k)^T \Delta x + \frac{1}{2} \Delta x^T H_k \Delta x \stackrel{!}{=} \min \\ \textit{unter den Nebenbedingungen} \\ g(x^k) + Dg(x^k)\Delta x = 0 \\ k(x^k) + Dk(x^k)\Delta x \geq 0 \,. \end{cases}$$

Satz 3.9
Sei $\Delta x^k \neq 0$ Lösung des quadratischen Teilproblems (VII) mit $H_k \in \mathbb{R}^{N,N}$ symmetrisch und positiv definit, und es sei

$$\alpha \geq \max\{|\lambda_1^{k+1}|, \ldots, |\lambda_l^{k+1}|, \mu_1^{k+1}, \ldots, \mu_q^{k+1}\} ,$$

wobei λ^{k+1}, μ^{k+1} die zu Δx^k gehörigen Lagrange-Multiplikatoren seien. Dann hat die l^1-Penalty-Funktion

$$P_1(x,\alpha) = f(x) + \alpha \left[\sum_{j=1}^{l} |g_j(x)| - \sum_{j=1}^{q} \min(0, k_j(x)) \right]$$

die Richtungsableitung $P_1'(x^k, d; \Delta x^k)$ mit

$$P_1'(x^k, \alpha; \Delta x^k) \leq -(\Delta x^k)^T H_k \Delta x^k < 0 ,$$

d.h. Δx^k ist eine Abstiegsrichtung für $P_1(\cdot, \alpha)$ im Punkte x^k.

Beweis: Gemäß Korollar 3.8 erhalten wir

$$P_1'(x,\alpha;\Delta x^k) = \nabla f(x)^T \Delta x^k + \alpha \Big[\sum_{g_j(x^k)>0} \nabla g_j(x^k)^T \Delta x^k + \sum_{g_j(x^k)=0} |\nabla g_j(x^k)^T \Delta x^k| + \sum_{g_j(x^k)<0} (-\nabla g_j(x^k)^T \Delta x^k) - \sum_{k_j(x^k)<0} \nabla k_j(x^k)^T \Delta x^k - \sum_{k_j(x^k)=0} \min(0, \nabla k_j(x^k)^T \Delta x^k) \Big] . \tag{63}$$

Ferner erfülle $\Delta x^k, \lambda^{k+1}, \mu^{k+1}$ die zu (VII) gehörige KKT-Bedingung, d.h. es gilt

$$\nabla f(x^k) + H_k \Delta x^k - \sum_{j=1}^{l} \lambda_j^{k+1} \nabla g_j(x^k) - \sum_{j=1}^{q} \mu_j^{k+1} \nabla k_j(x^k) = 0$$

und somit folgt

$$\nabla f(x^k)^T \Delta x^k = -\Delta x^k H_k \Delta x^k + \sum_{j=1}^{l} \lambda_j^{k+1} (\Delta x^k)^T \nabla g_j(x^k) + \sum_{j=1}^{q} \mu_j^{k+1} (\Delta x^k)^T \nabla k_j(x^k)\,. \tag{64}$$

Einsetzen von (64) in (63) liefert

$$\begin{aligned} P_1'(x^k, \alpha; \Delta x^k) = &-(\Delta x^k)^T H_k \Delta x^k + \sum_{j=1}^{l} \lambda_j^{k+1} (\Delta x^k)^T \nabla g_j(x^k) + \sum_{j=1}^{q} \mu_j^{k+1} (\Delta x^k)^T \nabla k_j(x^k) \\ &+ \alpha \Big[\sum_{g_j(x^k)>0} \nabla g_j(x^k)^T \Delta x^k + \sum_{g_j(x^k)=0} |\nabla g_j(x^k)^T \Delta x^k| + \sum_{g_j(x^k)<0} (-\nabla g_j(x^k)^T \Delta x^k) \\ &- \sum_{k_j(x^k)<0} \nabla k_j(x^k)^T \Delta x^k - \sum_{k_j(x^k)=0} \min(0, \nabla k_j(x^k)^T \Delta x^k) \Big]\,. \end{aligned} \tag{65}$$

Aus der Zulässigkeit von Δx^k für (VII) folgt

$$g_j(x^k) + \nabla g_j(x^k)^T \Delta x^k = 0 \quad \Longleftrightarrow \quad g_j(x^k) = -\nabla g_j(x^k)^T \Delta x^k\,, \quad j = 1, ..., l$$

sowie

$$k_j(x^k) + \nabla k_j(x^k)^T \Delta x^k \geq 0 \quad \Longleftrightarrow \quad k_j(x^k) \geq -\nabla k_j(x^k)^T \Delta x^k\,, \quad j = 1, ..., q\,.$$

Wir erhalten damit

$$\sum_{g_j(x^k)<0} -\nabla g_j(x^k)^T \Delta x^k = \sum_{g_j(x^k)<0} g_j(x^k) < 0 \tag{66}$$

$$\sum_{g_j(x^k)>0} \nabla g_j(x^k)^T \Delta x^k = \sum_{g_j(x^k)>0} -g_j(x^k) \tag{67}$$

$$\sum_{g_j(x^k)=0} |\nabla g_j(x^k)^T \Delta x^k| = \sum_{g_j(x^k)=0} |-g_j(x^k)| = 0 \tag{68}$$

$$- \sum_{k_j(x^k)=0} \min(0, \nabla k_j(x^k)^T \Delta x^k) = \sum_{k_j(x^k)=0} \min(0, -\nabla k_j(x^k)^T \Delta x^k) \leq \sum_{k_j(x^k)=0} \min(0, k_j(x^k)) = 0 \tag{69}$$

$$- \sum_{k_j(x^k)<0} \nabla k_j(x^k)^T \Delta x^k = \sum_{k_j(x^k)<0} -\nabla k_j(x^k)^T \Delta x^k \leq \sum_{k_j(x^k)<0} k_j(x^k) \leq 0 \tag{70}$$

$$\sum_{j=1}^{l} \lambda_j^{k+1} (\Delta x^k)^T \nabla g_j(x^k) = -\sum_{j=1}^{l} \lambda_j^{k+1} g_j(x^k) \tag{71}$$

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^{q} \mu_j^{k+1} (\Delta x^k)^T \nabla k_j(x^k) &= \underbrace{\sum_{j=1}^{q} \mu_j^{k+1} \Big((\Delta x^k)^T \nabla k_j(x^k) + k_j(x^k) \Big)}_{=0 \text{ nach KKT-Bed.}} - \sum_{j=1}^{q} \mu_j^{k+1} k_j(x^k) \\ &= -\sum_{j=1}^{q} \mu_j^{k+1} k_j(x^k)\,. \end{aligned} \tag{72}$$

Setze (66)-(72) in (65) ein und finde

$$\begin{aligned}
P_1'(x^k,\alpha;\Delta x^k) \leq & -(\Delta x)^T H_k \Delta x^k - \sum_{j=1, g_j(x^k)\neq 0}^{l} \lambda_j^{k+1} g_j(x^k) - \sum_{j=1, k_j(x^k)\neq 0}^{q} \mu_j^{k+1} k_j(x^k) \\
& + \alpha \left[\sum_{g_j(x^k)>0} -g_j(x^k) + \sum_{g_j(x^k)<0} g_j(x^k) + \sum_{k_j(x^k)<0} k_j(x^k) \right] \\
= & (-\Delta x^k)^T H_k \Delta x^k + \sum_{g_j(x^k)>0} (-\lambda_j^{k+1} - \alpha) g_j(x^k) + \sum_{g_j(x^k)<0} (-\lambda_j^{k+1} + \alpha) g_j(x^k) \\
& + \sum_{k_j(x^k)<0} (-\mu_j^{k+1} + \alpha) k_j(x^k) - \sum_{k_j(x^k)>0} \mu_j^{k+1} k_j(x^k) \\
\leq & -(\Delta x)^T H_k \Delta x^k, \quad \text{da } \alpha \geq \overline{\alpha} = \{|\lambda_1^{k+1}|, \ldots, |\lambda_l^{k+1}|, \mu_1^{k+1}, ..., \mu_q^{k+1}\}.
\end{aligned}$$

□

Aus Satz 3.9 folgt nun zusammen mit den Abstiegstechniken der freien Minimierung, dass eine Armijo-artige Schrittweitensteuerung wohldefiniert ist, d.h. es existiert eine Schrittweite $t_k = \beta^{l_k}$, $\beta \in]0,1[$, $l_k \in \mathbb{N}$ und $\sigma \in]0,1[$ mit

$$P_1(x^k + t_k \Delta x^k, \alpha) \leq P_1(x^k, \alpha) + \sigma t_k P_1'(x^k, \alpha; \Delta x^k), \quad k \in \mathbb{N}.$$

Damit erhalten wir den Algorithmus:

Wähle (x^0, y^0, μ^0), $H_0 \in \mathbb{R}^{N,N}$ symmetrisch, positiv definit, $\alpha > 0$, $\sigma, \beta \in]0,1[$, und setze $k = 0$.

while (x^k, λ^k, μ^k) *ist kein KKT-Punkt* **do**

- berechne eine Lösung $\Delta x \in \mathbb{R}^N$ des quadratischen Problems

$$\nabla f(x^k)^T \Delta x + \frac{1}{2} \Delta x^T H_k \Delta x \stackrel{!}{=} \min$$

unter den Nebenbedingungen

$$\begin{aligned}
g(x^k) + Dg(x^k)\Delta x &= 0 \\
k(x^k) + Dk(x^k)\Delta x &\geq 0
\end{aligned}$$

mit zugehörigen Multiplikatoren λ^{k+1}, μ^{k+1};

- bestimme Schrittweite $t_k = \max\{\beta^l \mid l = 0, 1, 2, \ldots\}$ mit

$$P_1(x^k + t_k \Delta x^k, \alpha) \leq P_1(x^k, \alpha) + \sigma t_k P_1'(x^k, \alpha; \Delta x^k);$$

- setze $x^{k+1} = x^k + t_k \Delta x^k$, wähle H_{k+1} symmetrisch und positiv definit;
- setze $k = k + 1$;

end

`Globalisierte SQP-Methode`

Für den obigen Algorithmus lassen sich gute globale Konvergenzresultate beweisen. Trotzdem bleiben noch einige Probleme für eine praktische Realisierung zu lösen, wie z.B. die Aufdatierung von α und

die Wahl der Matrizen H_k. Der heikelste Punkt bleibt allerdings die Lösbarkeit der quadratischen Teilprobleme (VII). Für symmetrisch und positiv definite Matrizen H_k existiert eine Lösung, sofern der zulässige Bereich

$$\tilde{Z} = \{\Delta x \in \mathbb{R}^N \,|\, g(x^k) + Dg(x^k)\Delta x = 0, k(x^k) + Dk(x^k)\Delta x \geq 0\} \neq \emptyset$$

ist. Dies kann aber vorkommen, wie das folgende Beispiel zeigt: Vorgelegt sei

$$f(x) = x^2 \stackrel{!}{=} \min$$

unter der Nebenbedingung $k(x) = x^2 - 1 \geq 0$ mit $Z = \{x \in \mathbb{R} \,|\, |x| \leq 1\} \neq \emptyset$.

Quadratisches Teilproblem bei $x^k = 0$:

$$2x\Delta x + \frac{1}{2}\Delta x^2 H_k \stackrel{!}{=} \min$$

unter der Nebenbedingung

$$k(x^k) + Dk(x^k)\Delta x = -1 + 2 \cdot 0\Delta x = -1$$

d.h. $\tilde{Z} = \{\Delta x \,|\, k(0) + Dk(0)\Delta x \geq 0\} = \emptyset$.

Im konvexen Fall sind die quadratischen Teilprobleme allerdings wohldefiniert.

Lemma 3.10
Vorgelegt sei das Problem $f(x) \stackrel{!}{=} \min$ *unter den Nebenbedingungen* $g(x) = Ax - b = 0$, $k_i(x) \geq 0$, $i = 1, ..., q$ *mit* f *konvex und* k_i *konkav,* $i = 1, ..., q$. *Dann besitzen auch die quadratischen Teilprobleme* (VII) *zulässige Punkte, falls das Ausgangsproblem zulässige Punkte besitzt.*

Beweis: Sei $\tilde{x}$ ein zulässiger Punkt des Originalproblems. Setze $\Delta x^k = \tilde{x} - x^k$. Dann gilt

$$g(x^k) = Dg(x^k)\Delta x^k = g(x^k) + Dg(x^k)(\tilde{x} - x^k) = Ax^k - b + A(\tilde{x} - x^k) = A\tilde{x} - b = 0\,.$$

Da k_j konkav ist, folgt

$$k_j(x^k) + \nabla k_j(x^k)^T \Delta x^k = k_j(x^k) + \nabla k_j(x^k)(\tilde{x} - x^k) \geq k_j(\tilde{x}) \geq 0\,, \quad j = 1, ..., q\,.$$

□

Im konvexen Fall ist damit die globalisierte SQP-Methode wohldefiniert.