Globale Optimierung

Prof. Dr. Oliver Stein

Sommersemester 2017

Karlsruher Institut für Technologie

Kapitel 1

Einführungen

1.1 Grundbegriffe

Zwei grundlegende Begriffe in der Optimierung sind der **optimale Punkt** und der **optimale Wert**. Als Beispiel kann man fragen, wer in einer Gruppe von Personen die meisten Münzen bei sich trägt. Der optimale Wert ist die gefundene größtmögliche Anzahl von Münzen. Er ist eindeutig bestimmt. Im Gegensatz dazu können durchaus mehrere Personen diese Anzahl von Münzen bei sich tragen. Demnach ist der Punkt (hier: die Person), an dem der optimale Wert angenommen wird, nicht notwendigerweise eindeutig. Dies gilt analog bei jedem Optimierungsproblem.

Definition (Minimalpunkte und Minimalwerte).

Gegeben sei eine Menge von zulässigen Punkte $M \subseteq \mathbb{R}$ und eine Zielfunktion $f: M \to \mathbb{R}$.

a) $\overline{x} \in M$ heißt **lokaler Minimalpunkt** von f auf M, falls eine Umgebung U von \overline{x} existiert mit

$$\forall x \in U \cap M : f(x) \ge f(\overline{x}).$$

- b) $\overline{x} \in M$ heißt **globaler Minimalpunkt** von f auf M, falls man in a) $U = \mathbb{R}^n$ wählen kann.
- c) Ein lokaler oder globaler Minimalpunkt heißt **strikt**, falls in a) bzw. b) für $x \neq \overline{x}$ sogar die strikte Ungleichung ">" gilt.
- d) Zu jedem globalen Minimalpunkt \overline{x} heißt $f(\overline{x})$ (= $v = \min_{x \in M} f(x)$) globaler, und zu jedem lokalen Minimalpunkt \overline{x} heißt $f(\overline{x})$ lokaler Minimalwert.

Strikte globale Minimalpunkte sind eindeutig, und strikte lokale Minimalpunkte sind lokal eindeutig.

Definition (Epigraph). Für $M \subseteq \mathbb{R}^n$ und $f : M \to \mathbb{R}$ heißt die Menge

$$\operatorname{epi}(f, M) = \{(x, \alpha) \in M \times \mathbb{R} \mid f(x) \le \alpha \}$$

Epigraph von f auf M. Der Epigraph besteht aus dem Graphen von f auf M sowie allen darüber liegenden Punkten.

Die Suche nach einem Minimalpunkt von f auf m ist äquivalent zur Suche nach einem (x, α) mit minimaler α -Komponente auf dem Epigraphen von f (vgl. Übung 1.3.7).

Definition (Epigraph-Umformulierung). Das Problem

$$P: \min_{x} f(x) \ s.t. \ x \in M$$

ist in diesem Sinne also äquivalent zu

$$P_{epi}: \min_{(x,\alpha)} \alpha \text{ s.t. } f(x) \leq \alpha, \ x \in M.$$

1.2 Lösbarkeit

Definition (Infimum). Wir bezeichnen mit $\alpha \in \mathbb{R}$ die untere Schranke für f auf M, falls

$$\forall x \in M: \quad \alpha \leq f(x)$$

gilt. Das **Infimum** von f auf M ist die größte untere Schranke von f auf M, es gilt also $v = \inf_{x \in M} f(x)$ falls

- $\forall x \in M : v \leq f(x)$ (d.h. v ist selbst untere Schranke) und
- für alle unteren Schranken α von f auf M als kleinste obere Schranke definiert.

Analog wird das **Supremum** $\sup_{x \in M} f(x)$ von f auf M als kleinste obere Schranke definiert.

Falls f auf M nicht nach unten beschränkt ist, setzt man formal

$$\inf_{x \in M} f(x) = -\infty,$$

und für das Infimum über die leere Menge definiert man formal

$$\inf_{x \in \emptyset} f(x) = +\infty.$$

Definition (1.2.3, Lösbarkeit). Das Minimierungsproblem P heißt **lösbar**, falls ein $\overline{x} \in M$ mit $\inf_{x \in M} f(x) = f(\overline{x})$ existiert.

Um anzudeuten, dass das Infimum angenommen wird, schreiben wir $\min_{x \in M} f(x)$ anstelle von $\inf_{x \in M} f(x)$.

Satz (1.2.5). Das Minimierungsproblem P ist genau dann lösbar, wenn es einen globalen Minimalpunkt besitzt.

1.3 Arten von Unlösbarkeit

Definition (1.2.6). Wir bezeichnen mit pr(z, M) die Menge der **orthogonalen Projektionen** eines Punktes $z \in \mathbb{R}^n$ auf $M \subseteq \mathbb{R}^n$ und mit

$$\operatorname{pr}(Z, M) = \left\{ \operatorname{pr}(z, M) \mid z \in M \right\}$$

die orthogonale Projektion einer Menge $Z \subseteq \mathbb{R}^n$ auf M.

Definition (1.2.7, Parallelprojektion). Für $Z \subseteq \mathbb{R}^n = \mathbb{R}^k \times \mathbb{R}^\ell$ heißt

$$\operatorname{pr}_a(Z) = \left\{ a \in \mathbb{R}^k \mid \exists b \in \mathbb{R}^\ell \colon (a, b) \in Z \right\}.$$

Parallelprojektion von Z in die Menge \mathbb{R}^k .

Folgerung (Parallelprojektion der Epigraphen). Die Parallelprojektion von $\operatorname{epi}(f, M)$ auf den " α -Raum" $\mathbb R$ lautet also

$$\operatorname{pr}_{\alpha} \operatorname{epi}(f, M) = \left\{ \alpha \in \mathbb{R} \mid \exists x \in M : f(x) \leq \alpha \right\}$$

Satz (1.2.8). Für jedes Optimierungsproblem P hat die Menge $\operatorname{pr}_{\alpha}\operatorname{epi}(f,M)$ genau eine der vier Gestalten

- $a) \operatorname{pr}_{\alpha} \operatorname{epi}(f, M) = \emptyset$
- b) $\operatorname{pr}_{\alpha} \operatorname{epi}(f, M) = \mathbb{R}$
- c) $\operatorname{pr}_{\alpha} \operatorname{epi}(f, M) = (v, +\infty) \ mit \ v \in \mathbb{R}$
- d) $\operatorname{pr}_{\alpha} \operatorname{epi}(f, M) = [v, +\infty) \ mit \ v \in \mathbb{R}$

Ferner ist der Fall a) zu $M = \emptyset$

1.4 Der Satz von Weierstraß

Eine Minimalvoraussetzung für die Lösbarkeit ist offensichtlich die Konsistenz von M, also $M \neq \emptyset$.

Satz (1.2.10, Satz von Weierstraß). Die Menge $M \subseteq \mathbb{R}^n$ sei nicht-leer und kompakt, und die Funktion $f: M \to \mathbb{R}$ sei stetig. Dann besitzt f auf M einen globalen Minimalpunkt und einen globalen Maximalpunkt.

Beachte: außer der Konsistenz von M keine dieser Bedingungen auch notwendig für Lösbarkeit ist. Dass die Bedingungen stärker als nötig sind, sieht man alleine schon daran, auch die Existenz eines globalen Maximalpunkts garantiert wird.

Definition (Untere Niveaumenge). Für $M \subseteq \mathbb{R}^n$, $f: M \to \mathbb{R}$ und $\alpha \in \overline{\mathbb{R}}$ heißt

$$\operatorname{lev}_{\leq}^{\alpha}(f, \mathbb{R}^n) = \left\{ x \in M \mid f(x) \leq \alpha \right\}$$

untere Niveaumenge von f auf M zum Niveau α . Im Falle $M = \mathbb{R}^n$ schreiben wir auch kurz

$$f_{\leq}^{\alpha} := \text{lev}_{\leq}^{\alpha}(f, \mathbb{R}^n) = \left\{ x \in \mathbb{R}^n \mid f(x) \leq \alpha \right\}$$

Für jede reellwertige Funktion f gilt $\operatorname{lev}_{\leq}^{+\infty}(f, M) = M$ und $\operatorname{lev}_{\leq}^{-\infty}(f, M) = \emptyset$. In der Analysis wird gezeigt, dass für stetiges f die Mengen f_{\leq}^{α} für alle $\alpha \in \mathbb{R}$ abgeschlossen sind.

Beachte: $\operatorname{lev}_{\leq}^{\alpha}(f, \mathbb{R}^n) \neq \operatorname{epi}(f, M), \ bzw.$

$$\left\{ x \in M \mid f(x) \le \alpha \right\} \ne \left\{ (x, \alpha) \in M \times \mathbb{R} \mid f(x) \le \alpha \right\}$$

Definition (Menge der Minimalpunkte). Wir führen die Menge der globalen Minimalpunkte

$$S = \left\{ \overline{x} \in M \mid \forall x \in M : f(x) \ge f(\overline{x}) \right\}$$

von P ein. Die Lösbarkeit von P ist dann zu $S \neq \emptyset$ äquivalent.

Lemma (1.2.13). Es sei $v = \inf_{x \in M} f(x)$. Dann gilt $S = \text{lev}_{\leq}^{v}(f, M)$.

Lemma (1.2.15). Für ein $\alpha \in \mathbb{R}$ sei $\operatorname{lev}^{\alpha}_{<}(f, M) \neq \emptyset$. Dann gilt $S \subseteq \operatorname{lev}^{\alpha}_{<}(f, M)$.

Satz (1.2.16, Verschärfter Satz von Weierstraß). Für eine Menge $M \subseteq \mathbb{R}^n$ sei $f: M \to \mathbb{R}$ stetig, und mit einem $\alpha \in \mathbb{R}$ sei $\text{lev}^{\alpha}_{\leq}(f, M)$ nicht-leer und kompakt. Dann ist auch S nicht-leer und kompakt.

Korollar (1.2.19, Verschärfter Satz von Weierstraß für unrestringierte Probleme). Sei $f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ stetig und mit einem $\alpha \in \mathbb{R}$ sei f_{\leq}^{α} nicht-leer und kompakt. Dann ist auch S nicht-leer und kompakt.

Definition (1.2.23, Koerzivität bei ∞). Gegeben sei eine Funktion $f: M \to \mathbb{R}$ mit $M \subseteq \mathbb{R}^n$. Falls für alle Folgen $(x^{\nu}) \subseteq M$ mit $\lim_{\nu} ||x^{\nu}|| \to +\infty$ auch

$$\lim_{\nu} f(x^{\nu}) = +\infty$$

gilt, dann heißt f koerziv bei ∞ auf M. Falls M abgeschlossen ist, heißt f kurz koerziv auf M.

Lemma (1.2.29). Die Funktion $f: M \to \mathbb{R}$ sei koerziv bei ∞ auf der Menge $M \subseteq \mathbb{R}^n$. Dann sind die Mengen lev $_<^{\alpha}(f, M)$ für jedes Niveau $\alpha \in \mathbb{R}$ beschränkt.

Korollar (1.2.30). Es sei M nicht-leer und abgeschlossen und $f: M \to \mathbb{R}$ sei stetig und koerziv auf M. Dann ist S nicht-leer und kompakt.

Bemerkung (1.2.35). Auf der abgeschlossenen Menge $X \subseteq \mathbb{R}^n$ seien die Funktionen $f, g_i, i \in I$, stetig, die Menge

$$\left\{ x \in X \mid g_i(x) \le 0, i \in I \right\}$$

sei nicht-leer, und mindestens eine der Funktionen $f, g_i, i \in I$, sei koerziv auf X. Zeigen Sie, dass die Menge S der Optimalpunkte von f auf M dann nicht-leer und kompakt ist.

Definition (1.2.37, Koerzivität). Gegeben seien eine (nicht notwendigerweise abgeschlossene) Menge $M \subseteq \mathbb{R}^n$ und eine Funktion $f: M \to \mathbb{R}$. Falls für alle Folgen $(x^{\nu}) \subseteq M$ mit $\lim_{\nu} \|x^{\nu}\| \to \infty$ und alle konvergenten Folgen $(x^{\nu}) \subseteq M$ mit $\lim_{\nu} x^{\nu} \notin M$ die Bedingung

$$\lim_{\nu} f(x^{\nu}) = +\infty$$

qilt, dann hei β t f **koerziv** auf M.

Lemma (1.2.39). Die Funktion $f: M \to \mathbb{R}$ sei stetig und koerziv auf der Menge $M \subseteq \mathbb{R}^n$. Dann sind die Mengen lev $^{\alpha}_{<}(f, M)$ für jedes Niveau $\alpha \in \mathbb{R}$ kompakt.

Korollar (1.2.40). Es sei M nicht-leer, und $f: M \to \mathbb{R}$ seis tetig und koerziv auf M. Dann ist S nicht-leer und kompakt.

Bemerkung (Rechenregeln).

- Skalare und Vielfache (1.3.1) $\alpha \ge 0$: $\min_{x \in M} (\alpha f(x) + \beta) = \alpha (\min_{x \in M} f(x)) + \beta$, $\alpha < 0 : \min_{x \in M} (\alpha f(x) + \beta) = \alpha \left(\max_{x \in M} f(x) \right) + \beta, \quad \min_{x \in M} (f(x) + g(x)) \ge \min_{x \in M} f(x) + \min_{x \in M} g(x)$
- $\min_{x \in X} \max_{y \in Y} f(x, y) \ge \max_{y \in Y} \min_{x \in X} f(x, y)$
- Monotone Transformation (1.35) $M \subseteq \mathbb{R}^n$, $f: M \to Y$ und $\psi: Y \to \mathbb{R}$ eine streng monotone wachsende Funktion. Dann gilt

$$\min_{x \in M} \psi(f(x)) = \psi(\min_{x \in M} f(x))$$

• Projektionsumformulierung (1.3.6): folgende Probleme sind äquivalent

$$P: \min_{(x,y)\in\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^m} f(x) \text{ s.t. } (x,y)\in M$$

und

$$P_{proj}: \min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \text{ s.t. } x \in \operatorname{pr}_x M$$

• Monotones Funktional (1.3.8): wir nennen $F: \mathbb{R}^k \to \mathbb{R}$ monoton, falls $x \leq y \Rightarrow F(x) \leq F(y)$.

Bemerkung (1.3.7, Epigraph Umformulierung). Gegeben seien $M \subseteq \mathbb{R}^n$ und eine Funktion $f: M \to \mathbb{R}$. Dann sind die folgenden Probleme äquivalent:

$$P: \min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \text{ s.t. } x \in M$$

und

$$P_{epi}: \min_{(x,\alpha)\in\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}} \alpha \ s.t. \ f(x) \leq \alpha, x \in M$$

Bemerkung (1.3.9, Verallgemeinerte Epigraph Umformulierung). Gegeben seien $X \subseteq \mathbb{R}^n$, Funktionen $f: X \to \mathbb{R}^k$ und $g: X \to R^\ell$ sowie monotone Funktionen $F: \mathbb{R}^k \to \mathbb{R}$ und $G: \mathbb{R}^\ell \to \mathbb{R}$. Dann sind die folgenden Probleme äquivalent:

$$P: \min_{x \in \mathbb{R}^n} F(f(x)) \text{ s.t. } G(g(x)) \leq 0, x \in M$$

und

$$P_{epi}: \min_{(x,\alpha,\beta)\in\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^k\times\mathbb{R}^\ell} F(\alpha) \quad s.t. \quad G(\beta) \leq 0, f(x) \leq \alpha, \ g(x) \leq \beta, \ x \in M$$

Kapitel 2

Konvexe Optimierungsprobleme

2.1 Konvexität

Definition (2.1.1, Konvexe Mengen und Funktionen).

- a) Eine Menge $M \subseteq \mathbb{R}^n$ heißt konvex, falls $\forall x, y \in M, \lambda \in (0,1)$: $(1-\lambda)x + \lambda y \in M$ gilt. Konvexe Mengen brauchen weder beschränkt noch abgeschlossen zu sein.
- b) Für eine konvexe Menge $M \subseteq \mathbb{R}^n$ heißt eine Funktion $f: M \to \mathbb{R}$ konvex, falls

$$\forall x, y \in M, \lambda \in (0, 1): \quad f((1 - \lambda)x + \lambda y) \le (1 - \lambda)f(x) + \lambda f(y)$$

d.h. der Funktionsgraph von f verläuft unter jeder seiner Sekanten.

- c) Für eine konvexe Menge $M \subseteq \mathbb{R}^n$ heißt eine Funktion $f: M \to \mathbb{R}$ strikt konvex, falls in b) für $x \neq y$ sogar die strikte Ungleichung gilt.
- d) Für eine konvexe Menge $M \subseteq \mathbb{R}^n$ heißt eine Funktion $f: M \to \mathbb{R}$ gleichmäßig konvex (auf M), falls mit einer Konstanten c > 0 die Funktion $f(x) \frac{c}{2} ||x||_2^2$ konvex auf M ist.
- e) Für eine konvexe Menge $M \subseteq \mathbb{R}^n$ heißt eine Funktion $f: M \to \mathbb{R}$ konkav, strikt konkav oder gleichmäßig konkav (auf M) falls -f konvex, strikt konvex bzw. gleichmäßig konvex auf M ist.

Übung (2.1.2). Auf einer konvexen Menge $M \subseteq \mathbb{R}^n$ ist die Funktion $f: M \to \mathbb{R}$ genau dann konvex, wenn die Mengen $\operatorname{epi}(f, M)$ konvex ist.

Definition (2.1.3, Konvexes Optimierungsproblem). Das Optimierungsproblem

$$P: \min f(x) \text{ s.t. } x \in M$$

heißt konvex, falls M und $f: M \to \mathbb{R}$ konvex sind.

Da $M = \mathbb{R}^n$ eine konvexe Menge ist, sind unrestringierte Probleme genau dann konvex, wenn f konvex auf \mathbb{R}^n ist.

Satz (2.1.4). P sei konvex. Dann ist jeder lokale Minimalpunkt von P auch globaler Minimalpunkt von P.

Der Grund für diesen Effekt liegt darin, dass Konvexität eine globale Voraussetzung an P ist.

Übung (2.1.5). Die Menge $M \subseteq \mathbb{R}^n$ und die Funktion $f: M \to \mathbb{R}$ seien konvex. Dann ist $\operatorname{lev}_{\leq}^{\alpha}(f, M)$ für jedes $\alpha \in \overline{\mathbb{R}}$ konvex. Die Umkehrung dieser Aussage ist falsch.

Übung (2.1.6). Der Schnitt beliebig vieler konvexer Mengen ist konvex.

Korollar (2.1.8). Mit beliebigen Indexmengen I, J seien die Funktionen $g_i : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, $i \in I$, konvex, und die Funktionen $h_j : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, $j \in J$, linear. Dann ist die Menge

$$M = \{ x \in \mathbb{R}^n \mid g_i(x) \le 0, i \in I, h_j(x) = 0, j \in J \}$$

konvex.

2.2 C^1 -Charakterisierung

Bemerkung (Kettenregel). $D(f \circ g)(\overline{x}) = Df(g(\overline{x})) \cdot Dg(\overline{x})$

Satz (2.2.1, Linearisierung per Satz von Taylor im \mathbb{R}^n). Für eine nicht-leere, offene und konvexe Menge $U \subseteq \mathbb{R}^n$ sei die Funktion $f: \to \mathbb{R}$ differenzierbar an $x \in U$. Dann gilt für alle $y \in U$

$$f(y) = f(x) + \langle \nabla f(x), y - x \rangle + o(||y - x||),$$

wobei o (||y - x||) einen Ausdruck der Form w(y)||y - x|| mit einer an x stetigen Funktion w mit w(x) = 0 bezeichnet.

Satz (2.2.2., C^1 -Charakterisierung von Konvexität). Auf einer konvexen Mengen $M \subseteq \mathbb{R}^n$ ist eine Funktion $f \in C^1(M, \mathbb{R})$ genau dann konvex, wenn folgendes gilt

$$\forall x, y \in M: \quad f(y) \ge f(x) + \langle \nabla f(x), y - x \rangle$$

Die C^1 -Charakterisierung besagt, dass eine C^1 -Funktion genau dann konvex auf M ist, wenn ihr Graph über jeder seiner Tangentialebenen verläuft.

2.3 Lösbarkeit

Für die Lösbarkeit von P ist Konvexität alleine kein wesentlicher Vorteil: sowohl $f_1(x) = (x-5)^2$ als auch $f_2(x) = e^x$ sind sogar strikt konvex, aber nur f_1 besitzt einen globalen Minimalpunkt auf \mathbb{R} . Im Folgenden werden wir sehen, dass der entscheidende Vorteil von f_1 gegenüber f_2 die gleichmäßige Konvexität ist.

Übung (2.3.1). Für eine konvexe Menge $M \subseteq \mathbb{R}^n$ le sei $f: M \to \mathbb{R}$ gleichmäßig konvex. Dann ist f auch strikt konvex auf M.

Lemma (2.3.2). Für eine abgeschlossene und konvexe Menge $M \subseteq \mathbb{R}^n$ sei $f: M \to \mathbb{R}$ gleichmäßig konvex. Dann ist f auch

- a) koerziv auf M und
- b) stetig auf dem Inneren von M.

Satz (2.3.3). P sei konvex. Dann gelten die folgenden Aussage:

- a) Die Menge der Minimalpunkte ist konvex.
- b) Falls f strikt konvex auf M ist, dann besitzt S höchstens ein Element.
- c) Es sei M nicht-leer und abgeschlossen, und f sei glechmäßig konvex und stetig auf M. DAnn besitzt S genau ein Element (d.h. P ist eindeutig lösbar).

Angemerkt sei, dass die Stetigkeitsforderung an f in Satz 2.3.3c) nach Lemma 2.3.2b) unnötig ist, falls die Menge M mit ihrem Inneren übereinstimmt (z.B. für $M = \mathbb{R}^n$).

2.4 Optimalitätsbedingungen für unrestringierte Probleme

Wir betrachten im Folgenden das unrestringierte Problem

$$P: \min f(x)$$
.

Allgemeiner bezeichnet man auch Probleme mit offener zulässiger Menge M als unrestringiert. In der Tat lassen sich die im Folgenden besprochenen Optimalitätsbedingungen ohne weiteres auf diesen Fall übertragen, was wir aus Gründen der Übersichtlichkeit aber nicht explizit angeben werden.

Definition (2.4.1, Kritischer Punkt). Ein Punkt $\overline{x} \in \mathbb{R}^n$ heißt kritisch für $f \in C^1(\mathbb{R}^n, \mathbb{R})$, falls $\nabla f(\overline{x}) = 0$ gilt.

Satz (2.4.2, Fermat'sche Regel, notwendige Optimalitätsbedingung). Der Punkt $\overline{x} \in \mathbb{R}^n$ sei lokal minimal für $f \in C^1(\mathbb{R}^n, \mathbb{R})$. Dann ist \overline{x} kritischer Punkt von f. Achtung dies ist lediglich notwendig und nicht hinreichend.

Satz (2.4.5, Hinreichende Optimalitätsbedingung). $f \in C^1(\mathbb{R}^n, \mathbb{R})$ sei konvex. Dann ist jeder kritische Punkt von f globaler Minimalpunkt von f.

Korollar (2.4.6, Charakterisierung globaler Minimalpunkte). $f \in C^1(\mathbb{R}^n, \mathbb{R})$ sei konvex Dann sind die globalen Minimalpunkte genau die kritischen Punkte von f.

Zur Bestimmung globaler Minimalpunkte unrestringierter konvexer C^1 -Probleme genügt es also nicht nur, lokale Minimalpunkte zu suchen (wie schon in Satz 2.1.4 gesehen), sondern sogar nur kritische Punkte. Das globale Minimierungsproblem ist damit auf das Lösen der Gleichung $\nabla f(x) = 0$ zurückgeführt.

Insbesondere erhält man auch diese Aussage: falls f keinen kritischen Punkt besitzt, dann auch keinen globalen Minimalpunkt. Dazu muss allerdings bewiesen werden, dass f keinen kritischen Punkt besitzen kann (ein einfaches Beispiel hierfür ist $f(x) = e^x$).

2.5 C²-Charakterisierung von Konvexität

Satz (2.5.1, Quadratische Approximation per Satz von Taylor im \mathbb{R}^n). Für eine nichtleere, offene und konvexe Menge $U \subseteq \mathbb{R}^n$ sei die Funktion $f: U \to \mathbb{R}$ zweimal differenzierbar an $x \in U$. Dann gilt für alle $y \in U$

$$f(y) = f(x) + \langle \nabla f(x), y - x \rangle + \frac{1}{2} (y - x)^{T} D^{2} f(x) (y - x) + o(\|y - x\|^{2})$$

Der Fehlerterm lässt sich dabei auch mit Hilfe des Lagrange-Restgliedes angeben:

$$o(y-x||^2) = \frac{1}{2}(y-x)^T D^2 f(\xi)(y-x) - \frac{1}{2}(y-x)^T D^2 f(x)(y-x),$$

wobei ξ ein nicht näher bekannter Punkt auf der Verbindungsstrecke zwischen x und y ist.

Definition. Eine symmetrische (n,n)-Matrix A heißt **positiv semidefinit** (kurz: $A \succeq 0$), wenn

$$\forall x \in \mathbb{R}^n : x^T A x > 0$$

gilt, und **positiv definit** (kurz: $A \succ 0$), wenn die Ungleichung für alle $x \neq 0$ sogar strikt ist.

In der Linearen Algebra wird allerdings gezeigt, dass $A \succeq 0 \ (\succ 0)$ genau dann gilt, wenn $\lambda \geq 0 \ (> 0)$ für alle Eigenwerte λ von A gilt.

Satz (2.5.2, Notwendige Optimalitätsbedingung zweiter Ordnung). Der Punkt \overline{x} sei lokaler Minimalpunkt von $f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, und f sei an \overline{x} zweimal differenzierbar. Dann gilt $\nabla f(\overline{x}) = 0$ und $D^2 f(\overline{x}) \succeq 0$.

C^2 -Charakterisierung von Konvexität

Satz (2.5.3, C^2 -Charakterisierung von Konvexität). Auf einer konvexen Menge $M \subseteq \mathbb{R}^n$ sei die Funktion $f \in C^2(M, \mathbb{R})$ gegeben.

- a) Falls $\forall x \in M : D^2 f(x) \succeq 0$ gilt, dann ist f auf M konvex.
- b) Falls M außerdem offen ist, dann gilt auch die Umkehrung der Aussage in Teil a).

Dass die Voraussetzung der Offenheit von M in b) nicht nur beweistechnischer Natur ist, sieht man an der C^2 -Funktion $f(x) = x_1^2 - x_2^2$, die nirgends eine positiv semidefinite Hessematrix besitzt, aber trotzdem auf der Menge $M = \mathbb{R} \times \{0\}$ konvex ist. M ist in diesem Beispiel natürlich nicht offen.

Die Voraussetzung der Offenheit von M in Satz 2.5.3b) lässt sich zur Volldimensionalität von M abschwächen, also im Wesentlichen zur Forderung, dass M innere Punkte besitzt. Eine weitergehende Abschwächung ist nicht möglich.

Übung (2.5.8, Fortsetzung von Beispiel 1.1.6). Die Zielfunktion

$$f(z^1, \dots, z^k) = \sum_{i=1}^m \min_{\ell=1,\dots,k} \|z^\ell - x^i\| = \left\| \left(\|z^{\ell(1)} - x^1\|, \dots, \|z^\ell(m) - x^m\| \right)^T \right\|_1$$

mit $k \geq 2$ aus dem Problem P_1 der Clusteranalyse (Bsp. 1.1.6) ist nicht konvex auf \mathbb{R}^{nk} (wenn die Indizes $\ell(i)$, i = 1, ..., m, allerdings a priori bekannt sind, dann lässt mit einem anderen Argument als der Benutzung von Satz 2.5.3 zeigen, dass f doch konvex ist).

Übung (2.5.9, Hinreichende Bedingung für strikte Konvexität). Auf einer konvexen Menge $M \subseteq \mathbb{R}^n$ sei die Funktion $f \in C^2(M, \mathbb{R})$ gegeben, und es gelte

$$\forall x \in M: \quad D^2 f(x) \succ 0$$

Dann ist f auf M strikt konvex.

Satz (2.5.10, C^2 -Charakterisierung von gleichmäßiger Konvexität). Auf einer konvexen Menge $M \subseteq \mathbb{R}^n$ sei die Funktion $f \in C^2(M, \mathbb{R})$ gegeben.

a) Falls mit einer Konstanten c > 0

$$\forall x \in M: \quad \lambda_{min} \left(D^2 f(x) \right) \ge c$$

gilt, dann ist f auf M gleichmäßig konvex.

b) Falls M außerdem offen ist, dann gilt auch die Umkehrung der Aussage in Teil a)

Konvexität und Monotonie der ersten Ableitung

Für n=1, ein offenes Intervall $M\subseteq\mathbb{R}$ und eine Funktion $g\in C^1(M,\mathbb{R})$ ist aus der Analysis bekannt, dass g genau dann monoton wachsend auf M ist, wenn $g'(x)\geq 0$ für alle $x\in M$ gilt. Nach Satz 2.5.3 gilt für n=1, ein offenes Intervall $M\subseteq\mathbb{R}$ und $f\in C^2(M,\mathbb{R})$ also, dass f genau dann konvex auf M ist, wenn f' auf M monoton wächst. In n=1 ist die Monotonie von g äquivalent zur Gültigkeit der Ungleichung $(g(y)-g(x))(y-x)\geq 0$. Die motiviert für das Mehrdimensionale die folgende Definition.

Definition (2.5.15, Monotoner Operator). Für eine nicht-leere konvexe Menge $M \subseteq \mathbb{R}^n$ heißt $g: M \to \mathbb{R}^n$ monoton auf M, falls folgendes gilt:

$$\forall x, y \in M: \quad \langle g(y) - g(x), y - x \rangle \ge 0$$

Satz (2.5.16, Monotonie-Charakterisierung von Konvexität). Auf einer konvexen Menge $M \subseteq \mathbb{R}^n$ ist eine Funktion $f \in C^1(M,\mathbb{R})$ genau dann konvex, wenn ∇f auf M monoton ist.

2.6 Dualität

Wir betrachten das restringierte Optimierungsproblem

$$P: \min f(x) \text{ s.t. } g_i(x) \le 0, i \in I, \ h_i(x) = 0, j \in J$$

mit $f, g_i, h_j : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, $I = \{1, \dots, p\}$, $J = \{1, \dots, q\}$, $p, q \in \mathbb{N}_0$ und q < n (wobei z.B. p = 0 dem Fall $I = \emptyset$ entspricht, also der Abwesenheit von Ungleichungsrestriktionen). Zunächst setzen wir weder Konvexität noch Differenzierbarkeit der beteiligten Funktionen voraus.

Definition (2.6.1, Lagrang-Funktion). *Die Funktion*

$$L(x, \lambda, \mu) = f(x) + \sum_{i \in I} \lambda_i g_i(x) + \sum_{j \in J} \mu_j h_j(x)$$

mit $\mu = (\mu_1, \dots, \mu_p)^T$ und $\mu = (\mu_1, \dots, \mu_p)^T$ heißt **Lagrangefunktion** von P.

Es sei zunächst p=0. Dann gilt $L(x,\mu)=f(x)+\sum_{j\in J}\mu_jh_j(x)$ und

$$\varphi(x) \coloneqq \sup_{\mu \in \mathbb{R}^q} L(x, \mu) = \begin{cases} f(x), & \forall j \in J : h_j(x) \text{ (d.h. falls } x \in M) \\ \infty, & x \notin M \end{cases}$$

Nun sei q = 0. Dann gilt $L(x, \mu) = f(x) + \sum_{i \in I} \lambda_i g_i(x)$,

$$\varphi(x) := \sup_{\lambda \ge 0} L(x, \lambda) = \begin{cases} f(x), & x \in M, \\ \infty, & x \notin M \end{cases}$$

und

$$v = \inf_{x \in M} f(x) = \inf_{x \in \mathbb{R}^n} \varphi(x) = \inf_{x \in \mathbb{R}^n} \sup_{\lambda \ge 0} L(x, \lambda)$$

Die zentrale Frage der Dualitätstheorie lautet, ob man in obiger Formel "inf" und "sup" vertauschen darf, ob also auch die folgende Formel gilt

$$v = \inf_{x \in M} f(x) = \sup_{\lambda > 0, \mu \in \mathbb{R}^q} \inf_{x \in \mathbb{R}^n} L(x, \lambda, \mu).$$

Das folgende Beispiel zeigt, dass diese Vertauschung nicht immer möglich ist.

Die Dualitätstheorie gibt Bedingungen an, unter denen solche Beispiele ausgeschlossen, sind, unter denen also Gleichheit gilt. Dazu fassen wir den Ausdruck

$$\sup_{\lambda \geq 0, \mu \in \mathbb{R}^q} \inf_{x \in \mathbb{R}^n} L(x, \lambda, \mu)$$

als Maximalwert eines Optimierungsproblem aus:

$$D: \quad \max_{\lambda,\mu} \psi(\lambda,\mu) \text{ s.t. } \lambda \geq 0$$

mit
$$\psi(\lambda, \mu) := \inf_{x \in \mathbb{R}^n} L(x, \lambda, \mu)$$
.

Definition (2.6.3, Lagrange-Dual). Das Problem D heißt **Lagrange-Dual** von P. Seinen Maximalwert bezeichnen wir mit

$$v_D \coloneqq \sup_{\lambda \ge 0, \mu \in \mathbb{R}^q} \psi(\lambda, \mu)$$

und seine zulässige Menge mit

$$M_D := \{(\lambda, \mu) \in \mathbb{R}^p \times \mathbb{R}^q \mid \lambda \ge 0\}$$

Analog bezeichnen wir P als primales Problem mit Minimalwert $v_P := v$ und zulässiger Menge $M_P := M$.

Die zentrale Frage der Dualitätstheorie lautet in dieser Notation, wann die Gleichheit

$$v_D = v_P$$

erfüllt ist.

Satz (2.6.4, Schwacher Dualitätssatz). Es gilt $v_D \leq v_P$.

Der Wert $v_P - v_D$ heißt Dualitätslücke. In Beispiel 2.6.2 beträgt die Dualitätslücke $v_P - v_D = 1$. In dieser Terminologie lautet die zentrale Frage der Dualitätstheorie, wann die Dualitätslücke verschwindet.

Die übliche Umformulierung dieser unendlich vielen Ungleichungen per Supremums- bzw. Infimumsbildung führt zu

$$\underbrace{\sup_{\overline{\lambda} \geq 0, \overline{\mu} \in \mathbb{R}^q} \inf_{x \in \mathbb{R}^n} L(x, \overline{\lambda}, \overline{\mu})}_{v_D} \leq \underbrace{\inf_{\overline{x} \in \mathbb{R}^n} \sup_{\lambda \geq 0, \mu \in \mathbb{R}^q} L(\overline{x}, \lambda, \mu)}_{v_D}$$

Im Folgenden sei P ein konvexes Optimierungsproblem mit $f, g_i \in C^1(\mathbb{R}^n, \mathbb{R}), i \in I$, und $h_j, j \in J$, linear. Kurz gesagt sei P ab jetzt konvex und C^1 . Dann ist die Lagrangefunktion

$$L(x, \lambda, \mu) = f(x) + \sum_{i \in I} \lambda_i g_i(x) + \sum_{j \in J} \mu_j h_j(x)$$

für beliebige fest vorgegebene $\lambda \geq 0$ und $\mu \in \mathbb{R}^q$ konvex und C^1 in der Variable x!Folglich ist für alle $\lambda \geq 0$, $\mu \in \mathbb{R}^n$ der Wert $\psi(\lambda, \mu) = \inf_{x \in \mathbb{R}^n} L(x, \lambda, \mu)$ der Minimalwert eines unrestringierten konvexen C^1 -Problems. Falls dieses Infimum für alle $\lambda \geq 0$, $\mu \in \mathbb{R}^n$ als Minimalwert angenommen wird, lässt es sich mit Korollar 2.4.6 berechnen als

$$\psi(\lambda,\mu) = L(x^*,\lambda,\mu),$$

wobei x^* einen globalen Minimalpunkt von $L(\cdot, \lambda, \mu)$ auf \mathbb{R}^n bezeichnet, also eine Lösung x^* von

$$\nabla_x L(x, \lambda, \mu) = 0.$$

Das Dualproblem lässt sich dadurch folgendermaßen umformulieren:

$$D: \max_{x,\lambda,\mu} L(x,\lambda,\mu) \text{ s.t. } \nabla_x L(x,\lambda,\mu) = 0, \ \lambda \ge 0$$

(das sogenannte Wolfe-Dual von P), was im Gegensatz zum Lagrange-Dual ein numerisch gut handhabbares Problem ist. Seine zulässige Menge wird nun zu

$$M_D = \{(x, \lambda, \mu) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^p \times \mathbb{R}^q \mid \nabla_x L(x, \lambda, \mu) = 0, \lambda \ge 0\}.$$

Einen Punkt $x \in M_P = M$ nennen wir im Folgenden **primal zulässig**, und $(x, \lambda, \mu) \in M_D$ dual zulässig. Schwache Dualität bedeutet jetzt

$$\sup_{(x,\lambda,\mu)\in M_D} L(x,\lambda,\mu) \le \inf_{x\in M_P} f(x)$$

Aufgrund der formalen Definitionen für Suprema und Infima über leere Mengen ist diese Ungleichung bemerkenswerterweise sogar für $M_D = \emptyset$ und/oder $M_P = \emptyset$ sinnvoll.

Satz (2.6.5).

a) \overline{x} sei primal zulässig. Dann ist $f(\overline{x})$ eine Oberschranke für den globalen Minimalwert von P:

$$v_P \le f(\overline{x})$$

b) $(\overline{x}, \overline{\lambda}, \overline{\mu})$ sei dual zulässig. Dann ist $L(\overline{x}, \overline{\lambda}, \overline{\mu})$ eine Unterschrank für v_P :

$$v_P \ge L(\overline{x}, \overline{\lambda}, \overline{\mu})$$

Lemma (2.6.7). P sei konvex und C^1 , und es seien $\overline{x} \in \mathbb{R}^n$, $\overline{\lambda} \in \mathbb{R}^p$, $\overline{\mu} \in \mathbb{R}^q$ gegeben mit

- a) \overline{x} primal zulässig
- b) $(\overline{x}, \overline{\lambda}, \overline{\mu})$ dual zulässig,
- c) $f(\overline{x}) = L(\overline{x}, \overline{\lambda}, \overline{\mu}).$

Dann ist \overline{x} globaler Minimalpunkt von P.

Korollar (2.6.9). P sei konvex und C^1 , es gelte $I = \emptyset$, und es seien $\overline{x} \in \mathbb{R}^n$, $\overline{\mu} \in \mathbb{R}^q$ gegeben mit

- a) \overline{x} primal zulässig,
- b) $(\overline{x}, \overline{\mu})$ dual zulässig

Dann ist \overline{x} globaler Minimalpunkt von P.

Definition (2.6.10, Karush-Kuhn-Tucker-Punkt). Für ein C^1 -Punkt P heißt ein Punkt $\overline{x} \in \mathbb{R}^n$ Karush-Kuhn-Tucker-Punkt (KKT-Punkt) mit Multiplikatoren $\overline{\lambda}$ und $\overline{\mu}$, falls das folgende System von Gleichungen und Ungleichungen erfüllt ist:

$$\nabla_x L(\overline{x}, \overline{\lambda}, \overline{\mu}) = 0 \tag{2.6.1}$$

$$\overline{\lambda}_i g_i(\overline{x}) = 0, \ i \in I \tag{2.6.2}$$

$$\overline{\lambda}_i \ge 0, \ i \in I, \tag{2.6.3}$$

$$g_i(\overline{x}) \le 0, \ i \in I \tag{2.6.4}$$

$$h_j(\overline{x}) = 0, \ j \in J \tag{2.6.5}$$

Lemma (2.6.11). Die Voraussetzungen von Lemma 2.6.7, d.h. P sei konvex und C^1 ,

- a) \overline{x} primal zulässig
- b) $(\overline{x}, \overline{\lambda}, \overline{\mu})$ dual zulässig,

c)
$$f(\overline{x}) = L(\overline{x}, \overline{\lambda}, \overline{\mu}),$$

sind für $(\overline{x}, \overline{\lambda}, \overline{\mu})$ genau dann erfüllt, wenn \overline{x} KKT-Punkt von P mit Multiplikatoren $\overline{\lambda}$, $\overline{\mu}$ ist, d.h. \overline{x} ist globaler Minimalpunkt von P.

Satz (2.6.12, Hinreichende Optimalitätsbedingung für P konvex, C^1). P sei konvex und C^1 , und \overline{x} sei KKT-Punkt (mit Multiplikatoren $\overline{\lambda}, \overline{\mu}$). Dann ist \overline{x} globaler Minimalpunkt von P.

Angemerkt sei, dass in Satz 2.6.12 die Forderung, \overline{x} sei ein KKT-Punkt, per Lemma 2.6.11 und Lemma 2.6.7c) insbesondere die Forderung nach einer verschwindenden Dualitätslücke impliziert.

Das Analogon zu Korollar 2.4.6, nämlich "jeder globale Minimalpunkt von P ist KKT-Punkt" gilt für restringierte Probleme nicht. In negativer Formulierung bedeutet dies auch: es ist möglich, dass ein restringiertes Problem zwar keinen KKT-Punkt besitzt, aber trotzdem lösbar ist. Anders ausgedrückt: selbst wenn man beweisen kann, dass ein Problem keine KKT-Punkte besitzt, bedeutet dies noch nicht, dass das Problem auch unlösbar ist.

Übung (2.6.15). Zeigen Sie, dass in Beispiel 2.6.14 starke Dualität im Sinne der Identität $v_P = v_D$ gilt. Warum lässt sich die Bedingung $f(\overline{x}) = L(\overline{x}, \overline{\lambda})$ aus Lemma 2.6.7c) hier trotzdem nicht erfüllen?

Im Folgenden untersuchen wir, welche zusätzlichen Bedingungen garantieren, dass ein globaler Minimalpunkt KKT-Punkt ist.

Komplementarität

Wie im Beweis zu Lemma 2.6.11 gesehen, ist unter den Bedingungen a) und b) aus Lemma 2.6.7 (primale und duale Zulässigkeit) die Bedingung c) (Gleichheit von primalem und dualen Zielfunktionswert) gleichbedeutend mit

$$\overline{\lambda}_i \ge 0, \ g_i(\overline{x}) \le 0, \ 0 = \overline{\lambda}_i g_i(\overline{x}), \ i \in I$$

Für jedes $i \in I$ heißt die Bedingung

$$\overline{\lambda}_i \geq 0, \ g_i(\overline{x}) \leq 0, \ \overline{\lambda}_i g_i(\overline{x}) = 0$$

Komplementaritätsbedingung.

Je nachdem, ob die Restriktion $g_i(x) \leq 0$ an \overline{x} mit Gleichheit oder mit strikter Ungleichheit erfüllt ist, hat die Komplementaritätsbedingung unterschiedliche Konsequenzen:

- **1. Fall** für $g_i(\overline{x}) = 0$ ist $\overline{\lambda}_i g_i(\overline{x}) = 0$ für beliebige $\overline{\lambda}_i \geq 0$ erfüllt, d.h. die Komplementaritätsbedingung gilt automatisch.
- **2. Fall** für $g_i(\overline{x} < 0 \text{ impliziert die Bedingung } \overline{\lambda}_i g_i(\overline{x}) = 0, \text{ dass } \overline{\lambda}_i = 0 \text{ gilt.}$

Der Begriff Komplementarität bezieht sich darauf, dass mindestens eine der Zahlen $\overline{\lambda}_i$ und $g_i(\overline{x})$ verschwindet. Die offensichtlich wichtige Unterscheidung, ob eine Ungleichung mit Gleichheit oder strikter Ungleichheit erfüllt ist, motiviert die folgende Definition.

Definition (2.6.16, Aktive-Index-Menge). $Zu \overline{x} \in M$ heißt

$$I_0(\overline{x}) = \left\{ i \in I \mid g_i(\overline{x}) = 0 \right\}$$

Menge der aktiven Indizes oder auch Aktive-Index-Menge von \overline{x} .

Geometrische Interpretation der KKT-Bedingung

Da die Komplementaritätsbedingungen für alle $i \notin I_0(\overline{x})$ erzwingen, dass $\overline{\lambda}_i$ verschwindet, ist \overline{x} KKT-Punkt mit Multiplikatoren $\overline{\lambda}$, $\overline{\mu}$ genau dann, wenn folgendes System erfüllt ist:

$$\nabla f(\overline{x}) + \sum_{i \in I_0(\overline{x})} \overline{\lambda}_i \nabla g_i(\overline{x}) + \sum_{j \in J} \overline{\mu}_j \nabla h_j(\overline{x}) = 0$$

$$g_i(\overline{x}) = 0, \ i \in I_0(\overline{x})$$

$$g_i(\overline{x}) < 0, \ i \notin I_0(\overline{x})$$

$$h_j(\overline{x}) = 0, \ j \in J$$

$$\overline{\lambda}_i \ge 0, \ i \notin I_0(\overline{x})$$

$$\overline{\lambda}_i = 0, \ i \notin I_0(\overline{x})$$

Um die geometrische Bedeutung dieser Bedingungen zu verstehen, setzen wir die Kenntnis der Tatsache voraus, dass Gradienten senkrecht auf Höhenlinien stehen und in die Richtung des steilsten Anstiegs zeigen.

Wir betrachten zunächst den Fall ohne Ungleichungen, d.h. $I=\emptyset$. Dann reduziert sich das KKT-System zu

$$\nabla f(\overline{x}) + \sum_{j=1}^{q} \overline{\mu}_{j} \nabla h_{j}(\overline{x}) = 0$$

$$h_{j}(\overline{x}) = 0, \ j \in J$$

Da die KKT-Bedingungen (neben der Zulässigkeit von \overline{x}) besagen, das ∇f und ∇h an einem KKT-Punkt \overline{x} linear abhängig sind, ist x^1 kein KKT-Punkt, während x^2 KKT-Punkt ist.

Bemerkenswert ist, dass zwar die Geometrie der zulässigen Menge M sich nicht ändert, wenn man h durch -h ersetzt, aber $\nabla(-h) = -\nabla h$ in die zu ∇h entgegengesetzte Richtung zeigt. Obwohl sich also durch die Vorzeichenänderung von h nichts daran ändert, ob \overline{x} zum Beispiel ein lokaler Minimalpunkt ist, ändern sich die KKT-Bedingungen. Dies wird allerdings dadurch kompensiert, dass die Multiplikatoren μ_j , $j \in J$ nicht vorzeichenbeschränkt sind. Die Ersetzung von h_j durch $-h_j$ kann man in den KKT-Bedingungen also einfach dadurch kompensieren, dass man $\overline{\mu}_j$ durch $-\overline{\mu}_j$ ersetzt.

Wir wenden uns nun dem Fall ohne Gleichungen zu, d.h. $J=\emptyset$. Dann lautet das KKT-System

$$\nabla f(\overline{x}) + \sum_{i \in I_0(\overline{x})} \overline{\lambda}_i \nabla g_i(\overline{x}) = 0$$

$$g_i(\overline{x}) = 0, \ i \in I_0(\overline{x})$$

$$g_i(\overline{x}) < 0, \ i \notin I_0(\overline{x})$$

$$\overline{\lambda}_i > 0, \ i \in I_0(\overline{x})$$

Dies bedeutet insbesondere, dass der Vektor $-\nabla f(\overline{x})$ in der Menge

cone
$$\left\{ \nabla g_i(\overline{x}), \ i \in I_0(\overline{x}) \right\} := \left\{ \sum_{i \in I_0(\overline{x})} \lambda_i \nabla g_i(\overline{x}) \mid \lambda \ge 0 \right\}$$

liegt, dem von den Vektoren $\nabla g_i(\overline{x}), i \in I_0(\overline{x}),$ aufgespannten konvexen Kegel.

2.6.1 Constraint Qualifications

Definition (2.6.17).

a) An $\overline{x} \in M$ gilt die Lineare-Unabhängigkeits-Bedingung (LUB), falls die Vektoren $\nabla g_i(\overline{x})$, $i \in I_0(\overline{x})$, $j \in J$, linear unabhängig sind (d.h. die Gleichung

$$\sum_{i \in I_0(\overline{x})} \lambda_i \nabla g_i(\overline{x}) + \sum_{j \in J} \mu_j \nabla h_j(\overline{x}) = 0$$

hat nur die Lösung $(\lambda, \mu)^T = (0, 9)^T$.

b) An $\overline{x} \in M$ gilt die Mangasarian-Fromowitz-Bedingung (MFB), falls die Vektoren $\nabla h_j(\overline{x}), j \in J$, linear unabhängig und das System

$$\langle \nabla g_i(\overline{x}), d \rangle < 0, \ i \in I_0(\overline{x}), \quad \langle \nabla h_j(\overline{x}), d \rangle = 0, \ j \in J$$

eine Lösung d besitzt (was dazu äquivalent ist, dass das System

$$\sum_{i \in I_0(\overline{x})} \lambda_i \nabla g_i(\overline{x}) + \sum_{j \in J} \mu_j \nabla h_j(\overline{x}) = 0,$$

$$\lambda > 0$$

nur die Lösung $(\lambda, \mu)^T = (0, 0)^T$ besitzt).

c) M erfüllt die Slaterbedingung (SB), falls die Vektoren $\nabla h_j(x)$, $j \in J$ für alle $x \in M$ linear unabhängig sind, und falls ein x^* existerit mit $g_i(x^*) < 0$, $i \in I$, $h_j(x^*) = 0$, $j \in J$.

Bemerkung.

- LUB und MFB sind lokale Bedingungen an einem $\overline{x} \in M$, SB ist eine globale Bedingung für ganz M.
- Für Constraint Qualifications spielt die Zielfunktion f keine Rolle

Übung (2.6.18). LUB an $\overline{x} \in M$ impliziert MFB an $\overline{x} \in M$, aber die Umkehrung der Aussage gilt nicht.

Lemma (2.6.19). Die h_j , $j \in J$, seien linear, d.h. $h_j(x) = a_j^T x + b_j$, $j \in J$, und es seien $A = (a_1^T, \ldots, a_q^T)^T$, $b = (b_1, \ldots, b_q)^T$, also $h(x) = (h_1(x), \ldots, h_q(x))^T = Ax + b$. Dann erfüllt M genau dann SB, wenn rang A = q gilt und wenn ein x^* existiert mit $g_i(x^*) < 0$, $i \in I$, $h_j(x^*) = 0$, $j \in J$.

Satz (2.6.20). Die g_i , $i \in I$, seien konvex und C^1 , die h_j , $j \in J$, seien linear, und es gelte $M \neq 0$. Dann sind die folgende Aussagen äquivalent:

- a) MFB gilt irgendwo in M
- b) MFB gilt überall in M.
- c) M erfüllt SB

Satz (2.6.21). P sei C^1 , und $\overline{x} \in M$ sei ein lokaler Minimalpunkt von P, an dem MFB gilt. Dann ist \overline{x} KKT-Punkt von P.

Wegen Übung 2.6.18 kann man in Satz 2.6.21 statt MFB auch die leichter überprüfbare, aber stärkere LUB voraussetzen.

Satz (2.6.22, Satz von KKT für konvexe Probleme). P sei konvex und C^1 , M erfülle SB, und $\overline{x} \in M$ sei ein Minimalpunkt von P. Dann ist \overline{x} KTT-Punkt von O.

Dies impliziert insbesondere, dass unter SB in M im Falle der Lösbarkeit von P die Dualitätslücke verschwindet.

Zusammengefasst haben wir für konvexe Optimierungsprobleme P folgende Zusammenhänge gezeigt für $f \in C^1(\mathbb{R}^n, \mathbb{R})$

1. Fall *P* unrestringiert.

$$\overline{x}$$
 kritischer Punkt $\xrightarrow{2.4.5}_{\overline{f}\ konvex} \overline{x}$ ist globaler Minimalpunkt \overline{x} kritischer Punkt $\xleftarrow{2.4.2}_{Fermat'sche} \overline{x}$ ist globaler Minimalpunkt

2. Fall P restringiert

$$\overline{x}$$
 KKT-Punkt $\stackrel{2.6.12}{\Longrightarrow} \overline{x}$ ist globaler Minimalpunkt \overline{x} KKT-Punkt $\stackrel{2.6.22}{\longleftrightarrow} \overline{x}$ ist globaler Minimalpunkt

Während man im unrestringierten Fall also die Charakterisierung globaler Minimalpunkte als kritische Punkte erhält (Kor. 2.4.6), benötigt man im restringierten Fall für einen Teil der Charakterisierung die Slaterbedingung.

Korollar (2.6.23, Charakterisierung globaler Minimalpunkte unter SB). P sei konvex und C^1 , und M erfülle die SB. Dann sind die globalen Minimalpunkte von P genau die KKT-Punkte von P.

Da die SB in Optimierungsproblemen sehr häufig erfüllt ist, ist sie keine besonders einschränkende Voraussetzung für die Charakterisierungsaussage in Korollar 2.6.23.

Die Situation vereinfacht sich, wenn sowohl die Gleichungs-, als auch die Ungleichungsrestriktionen sämtlich linear sind. In diesem Fall ist im Satz von Karush-Kuhn-Tucker keine Constraint Qualification nötig.

Satz (2.6.24, Satz von KKT für lineare Nebenbedingungen). f sei C^1 , die g_i , $i \in I$, h_j , $j \in J$, seien linear, und $\overline{x} \in M$ sei ein lokaler Minimalpunkt von P. Dann ist \overline{x} KKT-Punkt von P.

Korollar (2.6.25, Charakterisierung globaler Minimalpunkte bei lin. NB'n). f sei konvex und C^1 , und die g_i , $i \in I$, h_j , $j \in J$, seien linear. Dann sind die globalen Minimalpunkte von P genau die KKT-Punkte von P.

Korollar (2.6.25, Charakterisierung globaler Minimalpunkte bei LP's). P sei ein lineares Optimierungsproblem. Dann sind die globalen Minimalpunkte von P genau die KKT-Punkte von P.

2.7 Numerische Verfahren

Grundsätzlich lässt sich jedes Verfahren der nichtlinearen Optimierung auf konvexe Probleme anwenden, sofern die konvexen Probleme hinreichend glatt sind. Dabei gilt

- a) nach Satz 2.4.5 für jedes unrestringierte konvexe C^1 -Problem P, dass jedes numerische Verfahren, das einen kritischen Punkt x^* erzeugt (d.h. $\nabla f(x^*) = 0$), mit x^* auch einen globalen Minimalpunkt identifiziert (z.B. Gradientenverfahren, (Quasi-)Newtonverfahren, CG-Verfahren, Trust-Region-Verfahren), und
- b) nach Satz 2.6.12 für jedes restringierte konvexe C^1 -Problem P, dass jedes numerische Verfahren, das einen KKT-Punkt x^* erzeugt, mit x^* auch einen globalen Minimalpunkt identifiziert (z.B. Strafterm-, Barriere-, SQP-Verfahren).

Konvexität verbessert dabei oft die Eigenschaften der Verfahren gegenüber dem nichtkonvexen Fall, etwa beim Newtonverfahren (s.u.) (nicht allerdings den Zigzagging-Effekt des Gradientenverfahrens).

Grundidee des Gradientenverfahrens

Wähle irgendeinen Startpunkt $x^0 \in \mathbb{R}^n$ sowie eine Toleranz $\epsilon > 0$. Falls $\|\nabla f(x^0)\| \le \epsilon$, stopp (x^0 ist Approximation eines kritischen Punktes).

Andernfalls nutzt man, dass $\nabla f(x^0)$ senkrecht auf der Niveaufläche $\{x \in \mathbb{R}^n \mid f(x) = f(x^0)\}$ steht und in Richtung des steilsten Anstiegs von f zeigt. Richtungen $d \in \mathbb{R}^n$ mit $\langle \nabla f(x^0), d \rangle > 0$ (spitzer Winkel) sind Anstiegsrichtungen (erster Ordnung) von f in x^0 , Richtungen $d \in \mathbb{R}^n$ mit $\langle \nabla f(x^0), d \rangle < 0$ (stumpfer Winkel) sind Abstiegsrichtungen (erster Ordnung). Zum Minimieren von f von x^0 aus kann man einen Schritt in die Richtung des steilsten Abstiegs, $d^0 = -\nabla f(x^0)$ unternehmen. Die Schrittweite $t^0 > 0$ wird zum Beispiel mit der Armijoregel bestimmt. Man setzt dann $x^1 = x^0 + t^0 d^0$ und prüft $\|\nabla f(x^1)\| \le \epsilon$ usw.

Unter schwachen Voraussetzungen bricht das Gradientenverfahren nach endlich vielen Schritten ab. Dies kann wegen des Zigzagging-Effekts allerdings lange dauern, woran sich auch bei konvexen Funktionen nichts ändert.

Grundidee des Newtonverfahrens

Das Newtonverfahren ist zunächst ein Verfahren zur Nullstellensuche: zu lösen sei g(x) = 0 mit einer C^1 -Funktion $g: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$. Dazu wähle einen Startpunk $x^0 \in \mathbb{R}^n$ und eine Toleranz $\epsilon > 0$. Falls $||g(x^0)|| \le \epsilon$, stoppt (x^0) ist Approximation einer Nullstelle).

Ansonsten wird g um x^0 linearisiert und das linearisierte Problem gelöst. Linearisieren von g bedeutet, dass die Tangente an g in x^0 berechnet wird, d.h. g wird durch die Funktion $g(x^0) + g'(x^0)(x - x^0)$ approximiert. Lösen der Linearisierung bedeutet, dass eine Nullstelle der Tangente ermittelt wird: aus

$$0 = g(x^0) + g'(x^0)(x - x^0)$$

erhält man als neue Iterierte den Punkt

$$x^{1} = x^{0} - \frac{g(x^{0})}{g'(x^{0})}$$

Dazu muss natürlich $g'(x^0) \neq 0$ gelten. Für allgemeines n bedeutet die Nullstellensuche für die Linearisierung

$$0 = g(x^0) + Dg(x^0)(x - x^0)$$

woraus

$$x^{1} = x^{0} - \left(Dg(x^{0})\right)^{-1}g(x^{0})$$

folgt. Dazu muss $Dg(x^0)$ invertierbar sein. Falls $||g(x^1)|| \le \epsilon$, stopp usw.

Optimierungsprobleme löst man per Newtonverfahren, indem man einen kritischen Punkt sucht, d.h. das Nullstellenproblem $g(x) := \nabla f(x) = 0$ mit dem Newtonverfahren löst. In Iteration ν gilt dann

$$x^{\nu+1} = x^{\nu} - \left(D^2 f(x^{\nu})\right)^{-1} \nabla f(x^{\nu})$$

Zur Suchrichtung $d^{\nu} = -(D^2 f(x^{\nu}))^{-1} \nabla f(x^{\nu})$ kann man zusätzlich eine Schrittweite $t^{\nu} > 0$ bestimmen (z.B. per Armijoregel) und dann $x^{\nu+1} = x^{\nu} + t^{\nu} d^{\nu}$ setzen (man spricht dann vom gedämpften Newtonverfahren). Die Konvergenz dieses Verfahrens ist sehr schnell, falls x^0 nahe an einer Lösung liegt.

Nachteile des Newtonverfahrens sind im allgemeinen Fall:

- \bullet man weiß üblicherweise nicht, ob x^0 nahe genug an einem kritischen Punkt liegt.
- $D^2 f(x^{\nu})$ ist nicht notwendigerweise invertierbar, (d.h. $D^2 f(x^{\nu}) d^{\nu} = -\nabla f(x^{\nu})$ ist nicht notwendigerweise lösbar),
- d^{ν} ist nicht unbedingt eine Abstiegsrichtung, approximiert werden also beliebige kritische Punkte.
- Der letzte Nachteil tritt bei konvexen Problemen nicht auf: für konvexes f gilt $D^2 f(x^{\nu}) \succeq 0$. Falls $D^2 f(x^{\nu})$ invertierbar ist, muss demnach $D^2 f(x^{\nu}) \succ 0$ gelten. In der Linearen Algebra wird gezeigt, dass dann auch $((D^2 f(x^{\nu}))^{-1} \succ 0$ erfüllt ist. Für $\nabla f(x^{\nu}) \neq 0$ folgt

$$\langle \nabla f(x^{\nu}), d^{\nu} \rangle = -\nabla f(x^{\nu})^T \left(D^2 f(x^{\nu}) \right)^{-1} \nabla f(x^{\nu}) < 0,$$

so dass d^{ν} Abstiegsrichtung erster Ordnung in x^{ν} ist. Damit kann man von der Konvergenz des Verfahrens gegen einen Minimalpunkt ausgehen. Ein alternatives Argument dafür ist, dass im konvexen Fall ohnehin alle kritischen Punkte globale Minimalpunkte sind, so dass die Konvergenz des Newtonverfahrens gegen einen kritischen Punkt die Konvergenz gegen einen globalen Minimalpunkt nach sich zieht.

Neben der Anwendung allgemeiner Verfahren der Nichtlinearen Optimierung auf konvexe Probleme existieren einige speziell auf Konvexität zugeschnittene Verfahren, die bis auf eine Ausnahme den allgemeinen Verfahren für kontinuierliche Optimierungsprobleme aber nicht überlegen sind. Für nicht-glatte konvexe Probleme gibt es eine Reihe von Verfahren (z.B. Subgradienten- und Bündelungsverfahren), auf die wir im Rahmen dieser Vorlesung nicht eingehen können.

Schnittebenenverfahren

Wir betrachten die Grundidee von Schnittebenenverfahren zunächst für unrestringierte Probleme.

Historisch lag der Grund zur Einführung von Schnittebenenverfahren darin, dass lineare Optimierungsprobleme seit Einführung des Simplex-Algorithmus gut lösbar waren, man also versuchen konnte, konvexe Probleme durch LPs zu approximieren.

Die Grundidee dazu besteht darin, dass der Graph einer konvexen C^1 -Funktion f laut Satz 2.2.2 über jeder seiner Tangenten liegt (bzw. über jeder seiner Tangentialebenen, falls n > 1).

Zu zwei gegebenen Punkten $x^1, x^2 \in \mathbb{R}^n$ liegt der Graph von f sowohl über dem Graphen der Tangente $T_1(x) = f(x^1) + \langle \nabla f(x^1), x - x^1 \rangle$ als auch über dem von $T_2(x) = f(x^2) + \langle \nabla f(x^2), x - x^2 \rangle$. Für alle $x \in \mathbb{R}^n$ gilt also

$$f(x) \ge \max \{T_1(x), T_2(x)\}.$$

Analog kann man so für k Punkte x^1, \ldots, x^k vorgehen, so dass f von unten stückweise linear approximiert wird. Statt f zu minimieren, löse jetzt das approximierende Hilfsproblem

$$\min_{x} \max_{i=1,\dots,k} T_i(x).$$

Falls die Lösung x^{k+1} ein Abbruchkriterium (z.B. $\|\nabla f(x^{k+1})\| \leq \epsilon$) erfüllt, stopp, ansonsten füge die Tangente

$$T_{k+1}(x) = f(x^{k+1}) + \langle \nabla f(x^{k+1}), x - x^{k+1} \rangle$$

zur Maximumsbildung hinzu und löse erneut.

Die Lösung des eigentlich nicht-glatten Hilfsproblems gelingt per Epigraph-Umformulierung (vgl. Übung 1.3.7):

$$\min_{x} \max_{i=1,\dots,k} T_i(x) \iff \min_{x,\alpha} \alpha \text{ s.t. } \max_{i=1,\dots,k} T_i(x) \leq \alpha$$

$$\iff \min_{x,\alpha} \alpha \text{ s.t. } T_i(x) \leq \alpha, \ i = 1,\dots,k$$

$$\iff \min_{x,\alpha} \alpha \text{ s.t. } \underbrace{f(x^i) + \langle \nabla f(x^i), x - x^i \rangle - \alpha}_{\text{linear in } (x,\alpha)} \leq 0, \ i = 1,\dots,k$$

Damit ist das approximierende Hilfsproblem zu einem äquivalenten LP umformuliert worden, das sich beispielsweise per Simplex-Algorithmus lösen lässt.

Im Hinblick auf den späteren Satz 3.5.2a) für nichtkonvexe Probleme halten wir an dieser Stelle fest, dass ein Optimalpunkt (x^{k+1}, α^{k+1}) des obigen LPs für den gesuchten Optimalwert $v = \min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x)$ eine Einschließung liefert. Es gilt nämlich zum einen trivialerweise $v \leq f(x^{k+1})$, zum anderen aber auch

$$\alpha^{k+1} = \max_{i=1,...,k} T_i(x^{k+1}) \le f(x)$$

für allen $x \in \mathbb{R}^n$, also $\alpha^{k+1} \leq v$. Der Optimalwert v liegt also garantiert im Intervall $[\alpha^{k+1}, f(x^{k+1})]$.