Numer. Math. 31, 321–334 (1978)

Numerische Mathematik

Über die globale Konvergenz von Variable-Metrik-Verfahren mit nicht-exakter Schrittweitenbestimmung

Jochen Werner

Lehrstühle für Numerische und Angewandte Mathematik der Universität, Lotzestr. 16–18, D-3400 Göttingen, Germany (Fed. Rep.)

On the Global Convergence of Variable Metric Algorithms without Exact Line Searches

Summary. We consider unconstrained minimization problems and the application of the Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno variable metric algorithm without exact line searches. For a certain class of step functions the global convergence of this method is proven, generalizing a result given by Powell. Furthermore some remarks are made concerning the superlinear convergence of this particular variable metric algorithm.

Subject Classifications. AMS(MOS): 65K05; CR: 5.15.

1. Einleitung

Gegeben sei die unrestringierte Optimierungsaufgabe

(P) Minimiere $f\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$.

Fast jedes Verfahren zur Lösung von (P) erzeugt eine Näherungsfolge $\{x^k\}$ mit $x^{k+1}=x^k-t_k p^k$, wobei p^k aus einer gewissen Richtungsstrategie und $t_k>0$ aus einer geeigneten Schrittweitenstrategie gewonnen sind. Bei einem Variable-Metrik (VM)-Verfahren ist $p^k=H_k \nabla f(x^k)$ mit einer symmetrischen, positiv definiten $n\times n$-Matrix H_k. Durch Angabe einer Schrittweitenstrategie und einer sogenannten „up date"-Formel zur Bestimmung von H_{k+1} aus H_k, x^k und x^{k+1} ist dann ein VM-Verfahren vollständig beschrieben. Das erste VM-Verfahren stammt von Davidon, Fletcher und Powell (s. Fletcher u. Powell [7]). Seine globale Konvergenz bei gleichmäßig konvexer Zielfunktion und exakter Schrittweitenbestimmung (d.h. $t_k>0$ wird so bestimmt, daß $f(x^k-t_k p^k)=\min\{f(x^k-t p^k)\colon t\geqq 0\}$) wurde von Powell [11] bewiesen. Das Davidon-Fletcher-Powell(DFP)-Verfahren gehört zur sogenannten Broyden-Klasse (s. Broyden [1]), von der Dixon [6] zeigte, daß sämtliche Verfahren dieser Klasse bei gleichen

0029-599X/78/0031/0321/$02.80

Startwerten x^0, H_0 und exakter Schrittweitenbestimmung die gleiche Näherungsfolge $\{x^k\}$ erzeugen. Aus dem Konvergenzsatz von Powell und dem Ergebnis von Dixon erhält man also die Konvergenz der Verfahren der Broyden-Klasse für gleichmäßig konvexe Zielfunktionen und exakte Schrittweitenbestimmung. Lokale Konvergenzaussagen für Verfahren der Broyden-Klasse stammen von Stoer [14] (Curry-Altmann-Schrittweite) und Broyden et al. [2] sowie Dennis u. Moré [4] ($t_k = 1$). Durch eine Modifikation des Powellschen Konvergenzbeweises kommt Lenard [8] für das DFP-Verfahren zu globalen Konvergenzaussagen bei einer nichtexakten Schrittweitenbestimmung, wobei diese allerdings nicht ganz einfach ist.

Für ein weiteres spezielles Verfahren der Broyden-Klasse, das sogenannte Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS)-Verfahren bewies Powell [12] die globale Konvergenz bei gleichmäßig konvexer Zielfunktion und einer gewissen, nicht notwendig exakten Schrittweitenstrategie. Ziel dieser Arbeit ist es zu zeigen, daß das BFGS-Verfahren für sehr viele der in der Praxis gebräuchlichen Schrittweitenstrategien bei gleichmäßig konvexer Zielfunktion global konvergiert und daß mit Hilfe von Ergebnissen von Dennis u. Moré [4] leicht auf die superlineare Konvergenz des BFGS-Verfahrens geschlossen werden kann. Hierzu benutzen wir den Begriff der effizienten Schrittweitenfunktion wie er von Warth u. Werner [15] eingeführt wurde. Im zweiten Abschnitt stellen wir die benötigten Hilfsmittel über effiziente Schrittweitenfunktionen zusammen und zeigen, daß die von Powell [12] angegebene Schrittweitenfunktion effizient ist und daß die sogenannte Zoutendijk-Bedingung bei gleichmäßig konvexer Zielfunktion hinreichend für globale Konvergenz ist. Im letzten Abschnitt zeigen wir die globale Konvergenz des BFGS-Verfahrens bei beliebiger effizienter Schrittweitenstrategie und gehen auch noch auf die superlineare Konvergenz ein.

2. Effiziente Schrittweitenfunktionen

Über die Zielfunktion f der unrestringierten Optimierungsaufgabe

(P) Minimiere $f\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$

setzen wir voraus:

(V) i) $f\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ ist stetig differenzierbar.

ii) Es existiert ein $x^0 \in \mathbb{R}^n$ derart, daß die Niveaumenge $W_0 := \{x \in \mathbb{R}^n\colon f(x) \leqq f(x^0)\}$ kompakt ist.

iii) Es existiert ein $\gamma > 0$ derart, daß

$$\|\nabla f(x) - \nabla f(y)\| \leqq \gamma \|x - y\| \qquad \text{für alle } x, y \in W_0.$$

(Hier und im folgenden ist $\| \ \|$ stets die euklidische Vektornorm, ∇f der Gradient von f).

2.1. Definition. Sei $A := \{(x, p) \in W_0 \times \mathbb{R}^n\colon \nabla f(x)^T p > 0\}$. Eine Abbildung T: $A \to p(\mathbb{R}^+)$ (= Menge aller Teilmengen der positiven reellen Zahlen) heißt eine effiziente Schrittweitenfunktion, falls eine Konstante $\theta > 0$ existiert derart, daß

$$f(x) - f(x - t\,p) \geqq \theta \left\{ \frac{\nabla f(x)^T p}{\|p\|} \right\}^2 \quad \text{für alle } t \in T(x, p) \text{ und alle } (x, p) \in A.$$

In Anlehnung an Daniel [3] und Ortega u. Rheinboldt [9] wurden effiziente Schrittweitenfunktionen in [15] definiert und untersucht. Dort wurde z.B. bewiesen, daß die folgenden Schrittweitenfunktionen effizient sind:

i) Minimumschrittweite (oder exakte Schrittweite) T_M:

$$T_M(x, p) := \{t_M(x, p)\} \quad \text{mit}$$
$$t_M(x, p) := \min\{\hat{t} > 0 \colon f(x - \hat{t}\,p) = \min_{t \geqq 0} f(x - t\,p)\}.$$

ii) Curry-Schrittweite T_C:

$$T_C(x, p) := \{t_c(x, p)\} \quad \text{mit}$$
$$t_c(x, p) := \min\{\hat{t} > 0 \colon \nabla f(x - \hat{t}\,p)^T p = 0\}.$$

iii) Curry-Altmann-Schrittweite T_{CA}:
Sei $\alpha \in [0, 1)$ gegeben, $t_c = t_c(x, p)$ die Curry-Schrittweite und

$$T_{CA}(x, p) := \{t \in (0, t_c] \colon \nabla f(x - t\,p)^T p \leqq \alpha \nabla f(x)^T p\}.$$

iv) Goldstein-Schrittweite T_G:
Sei $\beta \in (0, \frac{1}{2})$ gegeben,

$$T_G(x, p) := \{t > 0 \colon t\,\beta\,\nabla f(x)^T p \leqq f(x) - f(x - t\,p) \leqq t(1 - \beta)\,\nabla f(x)^T p\}.$$

v) Danilin-Pshenichnyi-Schrittweite T_{DP}:
Seien $\alpha \in (0, 1)$, $\beta \in (0, 1)$ und $\sigma > 0$ gegeben,
$t^*(x, p) := \sigma \dfrac{\nabla f(x)^T p}{\|p\|^2} \cdot q(x, p)$ sei die kleinste nichtnegative ganze Zahl mit
$f(x) - f(x - \alpha^{q(x,p)}\,t^*(x, p)\,p) \geqq \beta\,\alpha^{q(x,p)}\,t^*(x, p)\,\nabla f(x)^T p$.
Dann ist $T_{DP}(x, p) := \{\alpha^{q(x,p)}\,t^*(x, p)\}$.

Hier wollen wir nun noch eine weitere Schrittweitenfunktion untersuchen, die von Powell [12] angegeben wurde.

2.2. Definition. Seien α, β mit $0 < \beta \leqq \alpha < 1$ gegeben.

$$T_P(x, p) := \{t > 0 \colon \beta\,t\,\nabla f(x)^T p \leqq f(x) - f(x - t\,p),$$
$$\nabla f(x - t\,p)^T p \leqq \alpha\,\nabla f(x)^T p\}$$

heißt Powell-Schrittweitenfunktion.

2.3. Lemma. Die Powell-Schrittweitenfunktion existiert (d.h. $T_P(x, p) \neq \emptyset$ für alle $(x, p) \in A$) und ist effizient.

Beweis. Sei $(x, p) \in A$ fest.

a) Existenz: Sei $\Phi(t) := f(x) - f(x - t\,p) - \beta\,t\,\nabla f(x)^T p$. Dann ist $\Phi(0) = 0$, $\Phi'(t) = \nabla f(x - t\,p)^T p - \beta\,\nabla f(x)^T p$, also $\Phi'(0) = (1 - \beta)\,\nabla f(x)^T p > 0$ und $\Phi'(t_c) =$

$-\beta\,\nabla f(x)^T p<0$, wobei t_c die Curry-Schrittweite ist. Also existiert ein $t^*\in(0,t_c)$ mit $\Phi'(t^*)=0$, $\Phi(t^*)>0$. Dann ist $\nabla f(x-t^*p)^T p=\beta\,\nabla f(x)^T p\leqq\alpha\,\nabla f(x)^T p$, so daß $t^*\in T_P(x,p)$.

b) Effizienz: Sei $t\in T_P(x,p)$. Dann ist

$$\nabla f(x-t\,p)^T p\leqq\alpha\,\nabla f(x)^T p=\nabla f(x)^T p-(1-\alpha)\,\nabla f(x)^T p, \quad \text{also}$$

$$(1-\alpha)\,\nabla f(x)^T p\leqq(\nabla f(x)-\nabla f(x-t\,p))^T p\leqq\gamma\,t\,\|p\|^2$$

wegen x, $x-t\,p\in W_0$ und (V) iii). Damit ist

$$t\geqq\frac{1-\alpha}{\gamma}\cdot\frac{\nabla f(x)^T p}{\|p\|^2} \quad \text{und}$$

$$f(x)-f(x-t\,p)\geqq\beta\,t\,\nabla f(x)^T p\geqq\frac{\beta(1-\alpha)}{\gamma}\left\{\frac{\nabla f(x)^T p}{\|p\|}\right\}^2,$$

womit die Effizienz von T_P bewiesen ist.

Für das weitere müssen wir die folgende Voraussetzung machen:

(V) iv) W_0 ist konvex und f gleichmäßig konvex auf W_0, d.h. (s. Ortega u. Rheinboldt [9]):
Es existiert eine Konstante $c>0$ derart, daß

$$c\,\|y-x\|^2+\nabla f(x)^T(y-x)\leqq f(y)-f(x) \qquad \text{für alle } x,y\in W_0.$$

Man beachte, daß wir hier noch nicht voraussetzen, daß f zweimal differenzierbar ist.

Das folgende Lemma ist lediglich eine Sammlung bekannter einfacher Ergebnisse über gleichmäßig konvexe Funktionen (s. z.B. Ortega u. Rheinboldt [9]):

2.4. Lemma. Gegeben sei das Problem (P), die Voraussetzung (V) i)–iv) sei erfüllt. x^* sei die eindeutige Lösung von (P). Dann gilt:

i) $c\,\|y-x\|^2+\nabla f(x)^T(y-x)\leqq f(y)-f(x)\leqq\frac{\gamma}{2}\,\|y-x\|^2+\nabla f(x)^T(y-x)$ für alle $x,y\in W_0$.

ii) $2c\,\|y-x\|^2\leqq(\nabla f(y)-\nabla f(x))^T(y-x)$ für alle $x,y\in W_0$.

iii) $c\,\|x-x^*\|^2\leqq f(x)-f(x^*)$ für alle $x\in W_0$.

iv) $\|x-x^*\|\leqq\frac{1}{2c}\,\|\nabla f(x)\|$ für alle $x\in W_0$.

v) $f(x)-f(x^*)\leqq\frac{\gamma}{8c^2}\,\|\nabla f(x)\|^2$ für alle $x\in W_0$.

Dann gilt (s. auch Warth u. Werner [15]):

2.5. Satz. Gegeben sei das Problem (P), die Voraussetzung (V) i)–iv) sei erfüllt. T sei eine effiziente Schrittweitenfunktion. Man betrachte den folgenden Algorithmus:

Schritt 0: x^0 genüge (V), setze $k:=0$.

Schritt 1: Ist $\nabla f(x^k)=\Theta$, so ist x^k Lösung von (P). Andernfalls gehe zu
Schritt 2: Bestimme p^k mit $\nabla f(x^k)^T p^k>0$. Wähle $t_k\in T(x^k, p^k)$ und setze $x^{k+1}:= x^k-t_k p^k$, $k:=k+1$ und gehe zu Schritt 1.

Dann gilt: Bricht der Algorithmus nicht schon nach endlich vielen Schritten mit der Lösung ab und ist die Zoutendijk-Bedingung $\sum_{k=0}^{\infty}\alpha_k^2=\infty$ mit $\alpha_k:=\frac{\nabla f(x^k)^T p^k}{\|\nabla f(x^k)\|\,\|p^k\|}$ erfüllt, so konvergiert $\{x^k\}$ gegen die Lösung x^* von (P). Genauer gilt mit $\xi:=\frac{8\theta c^2}{\gamma}$ (wobei $\theta>0$ der „Effizienzfaktor" der Schrittweitenfunktion T ist):

$$\|x^{k+1}-x^*\|^2\leqq\frac{1}{c}\exp\left(-\xi\sum_{i=0}^{k}\alpha_i^2\right)(f(x^0)-f(x^*)).$$

Beweis. Wegen der Effizienz der Schrittweitenfunktion T ist

$$\begin{aligned} f(x^k)-f(x^{k+1})&\geqq\theta\left\{\frac{\nabla f(x^k)^T p^k}{\|p^k\|}\right\}^2=\theta\,\alpha_k^2\,\|\nabla f(x^k)\|^2\\ &\geqq\xi\,\alpha_k^2(f(x^k)-f(x^*))\qquad\text{(Lemma 2.4 v))}\end{aligned}$$

und daher

$$f(x^{k+1})-f(x^*)\leqq(1-\xi\,\alpha_k^2)(f(x^k)-f(x^*)),$$

also

$$\begin{aligned} f(x^{k+1})-f(x^*)&\leqq\prod_{i=0}^{k}(1-\xi\,\alpha_i^2)(f(x^0)-f(x^*))\\ &\leqq\exp\left(-\xi\sum_{i=0}^{k}\alpha_i^2\right)(f(x^0)-f(x^*)).\end{aligned}$$

Aus Lemma 2.4 iii) folgt die Behauptung.

3. Die globale Konvergenz des BFGS-Verfahrens

Daß sich der Konvergenzbeweis für Verfahren der konjugierten Gradienten mit Hilfe der Zoutendijk-Bedingung führen läßt, ist schon länger bekannt (s. z.B. Polak [10], Warth u. Werner [15]). Daß das entsprechende auch für Variable-Metrik-Verfahren der Fall ist, scheint noch nicht bemerkt worden zu sein. Bisher können wir allerdings den folgenden Konvergenzsatz nur für das Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS)-Verfahren zeigen. Ob entsprechende Aussagen auch für andere Verfahren der Broyden-Klasse gültig sind, wie etwa das Davidon-Fletcher-Powell (DFP)-Verfahren, ist nicht bekannt.

Der folgende Satz ist das Hauptergebnis dieses Abschnittes. Sein Beweis orientiert sich an dem entsprechenden Beweis von Powell [12], wird aber durch die Verwendung von Satz 2.5 einfacher.

3.1. Satz. Gegeben sei das Problem (P), die Voraussetzung (V) i)–iv) sei erfüllt. Man betrachte das folgende Verfahren:

Schritt 0: x^0 genüge (V), H_0 sei eine symmetrische, positiv definite $n \times n$-Matrix. T sei eine gegebene effiziente Schrittweitenfunktion. Setze $k := 0$.
Schritt 1: Ist $\nabla f(x^0) = \Theta$, so ist x^0 die Lösung von (P). Andernfalls gehe zu
Schritt 2: Setze $p^k := H_k \nabla f(x^k)$, wähle bzw. berechne $t_k \in T(x^k, p^k)$ und setze $x^{k+1} := x^k - t_k p^k$.
Schritt 3: Ist $\nabla f(x^{k+1}) = \Theta$, so ist x^{k+1} die Lösung von (P). Andernfalls gehe zu
Schritt 4: Setze $\Delta x^k := x^{k+1} - x^k$, $\Delta g^k := \nabla f(x^{k+1}) - \nabla f(x^k)$ und berechne

$$H_{k+1} := \left(I - \frac{\Delta x^k (\Delta g^k)^T}{(\Delta x^k)^T \Delta g^k}\right) H_k \left(I - \frac{\Delta g^k (\Delta x^k)^T}{(\Delta x^k)^T \Delta g^k}\right) + \frac{\Delta x^k (\Delta x^k)^T}{(\Delta x^k)^T \Delta g^k}.$$

Setze $k := k+1$ und gehe zu Schritt 2.

Dann gilt: Das oben definierte BFGS-Verfahren bricht entweder nach endlich vielen Schritten mit der Lösung x^* von (P) ab oder liefert eine Folge $\{x^k\}$, die gegen x^* konvergiert.

Beweis. Wir nehmen im folgenden an, daß das Verfahren nicht schon nach endlich vielen Schritten abbricht. Daß dann $\{H_k\}$ eine Folge symmetrischer positiv definiter Matrizen und daher $\nabla f(x^k)^T p^k > 0$ für alle k ist, ist eine bekannte Eigenschaft der Verfahren der Broyden-Klasse.

Es ist

$$H_{k+1}^{-1} = H_k^{-1} + \frac{\Delta g^k (\Delta g^k)^T}{(\Delta x^k)^T \Delta g^k} - \frac{H_k^{-1} \Delta x^k (H_k^{-1} \Delta x^k)^T}{(\Delta x^k)^T H_k^{-1} \Delta x^k}$$

und

$$0 \leqq \mathrm{Spur}(H_{k+1}^{-1}) = \mathrm{Spur}(H_0^{-1}) + \sum_{j=0}^{k} \frac{\|\Delta g^j\|^2}{(\Delta x^j)^T \Delta g^j} - \sum_{j=0}^{k} \frac{\|H_j^{-1} \Delta x^j\|^2}{(\Delta x^j)^T H_j^{-1} \Delta x^j}.$$

Aus (V) iii) und Lemma 2.4 ii) erhält man

$$\frac{\|\Delta g^j\|^2}{(\Delta x^j)^T \Delta g^j} \leqq \frac{\gamma^2}{2c}.$$

Mit einer Konstanten $c_1 > 0$ $\left(\text{etwa } c_1 = \max\left(\mathrm{Spur}(H_0^{-1}), \frac{\gamma^2}{2c}\right)\right)$ ist also

$$\begin{aligned} 0 \leqq \mathrm{Spur}(H_{k+1}^{-1}) &= \sum \text{Eigenwerte}\,(H_{k+1}^{-1}) \\ &\leqq c_1(k+1) - \sum_{j=0}^{k} \frac{\|H_j^{-1} \Delta x_j\|}{(\Delta x^j)^T H_j^{-1} \Delta x^j}, \end{aligned}$$

und daher

$$\sum_{j=0}^{k} \frac{\|H_j^{-1} \Delta x^j\|^2}{(\Delta x^j)^T H_j^{-1} \Delta x^j} \leqq c_1(k+1).$$

Nun wird die Ungleichung vom geometrisch-arithmetischen Mittel zweimal angewandt:

α $$\det(H_{k+1}^{-1}) = \prod_{j=0}^{k} \frac{(\Delta x^j)^T \Delta g^j}{(\Delta x^j)^T H_j^{-1} \Delta x^j} \cdot \det(H_0^{-1}) \qquad \text{(s. Dennis u. Moré [5])}$$
$$= \prod \text{Eigenwerte}(H_{k+1}^{-1})$$
$$\leqq \left\{ \frac{1}{n} \sum \text{Eigenwerte}(H_{k+1}^{-1}) \right\}^n$$
$$= \left\{ \frac{1}{n} \operatorname{Spur}(H_{k+1}^{-1}) \right\}^n \leqq \left\{ \frac{c_1(k+1)}{n} \right\}^n .$$

β $$\prod_{j=0}^{k} \frac{\|H_j^{-1} \Delta x^j\|^2}{(\Delta x^j)^T H_j^{-1} \Delta x^j} \leqq c_1^{k+1}.$$

Damit wird für $k = 0, 1, \ldots$

$$\prod_{j=0}^{k} \frac{\|H_j^{-1} \Delta x^j\|^2 (\Delta x^j)^T \Delta g^j}{((\Delta x^j)^T H_j^{-1} \Delta x^j)^2} \leqq \left\{ \frac{c_1(k+1)}{n} \right\}^n \frac{c_1^{k+1}}{\det(H_0^{-1})}$$
$$\leqq c_2^{k+1}$$

mit einer hinreichend großen Konstanten $c_2 > 0$.

Nun ist aber

$$\prod_{j=0}^{k} \frac{\|H_j^{-1} \Delta x^j\|^2 (\Delta x^j)^T \Delta g^j}{((\Delta x^j)^T H_j^{-1} \Delta x^j)^2} = \prod_{j=0}^{k} \frac{\|\nabla f(x^j)\|^2 (\Delta x^j)^T \Delta g^j}{t_j^2 (\nabla f(x^j)^T p^j)^2}$$
$$\geqq (2c)^{k+1} \prod_{j=0}^{k} \frac{1}{\alpha_j^2}$$

mit

$$\alpha_j := \frac{\nabla f(x^j)^T p^j}{\|\nabla f(x^j)\| \, \|p^j\|} \qquad \text{(wegen Lemma 2.4 ii)).}$$

Mit

$$c_3 := \frac{c_2}{2c} \quad \text{gilt also} \quad \prod_{j=0}^{k} \frac{1}{\alpha_j^2} \leqq c_3^{k+1}.$$

Durch eine erneute Anwendung der Ungleichung vom geometrisch-arithmetischen Mittel erhält man

$$(k+1) \frac{1}{c_3} \leqq \sum_{j=0}^{k} \alpha_j^2 .$$

Daher ist $\sum_{j=0}^{\infty} \alpha_j^2 = \infty$, die Zoutendijk-Bedingung ist erfüllt und aus Satz 2.5 folgt die Behauptung.

Damit ist die Konvergenz des BFGS-Verfahrens mit vielen, nicht notwendig exakten Schrittweitenfunktionen gezeigt, was als ein Indiz für die auch in der Praxis beobachtete numerische Stabilität des BFGS-Verfahrens gewertet werden kann.

Als Korollar zu Satz 3.1 erhält man eine Aussage, die für Dennis u. Moré [4] Ausgangspunkt für die superlineare Konvergenz von Variable-Metrik-Verfahren ist.

3.2. Korollar. Gegeben sei das Problem (P), die Voraussetzung (V) i)–iv) sei erfüllt. Man betrachte das in Satz 3.1 definierte BFGS-Verfahren. Dann gilt:

Bricht das Verfahren nicht nach endlich vielen Schritten mit der Lösung x^* ab, so liefert es eine Folge $\{x^k\}$ mit

$$\sum_{k=0}^{\infty} \|x^k - x^*\| < \infty.$$

Beweis. Beim Beweis zu Satz 3.1 wurde gezeigt, daß eine Konstante $c_3 > 0$ existiert derart, daß

$$(k+1)\frac{1}{c_3} \leqq \sum_{j=0}^{k} \alpha_j^2 \qquad \text{für alle } k$$

mit

$$\alpha_j := \frac{\nabla f(x^j)^T p^j}{\|\nabla f(x^j)\| \, \|p^j\|}.$$

Aus Satz 2.5 erhält man

$$\|x^k - x^*\| \leqq \exp\left(-\frac{\xi}{2c_3}\right)^k \left(\frac{f(x^0) - f(x^*)}{c}\right)^{\frac{1}{2}}$$

mit $\xi := \dfrac{8\theta c^2}{\gamma}$. Hieraus folgt die Behauptung.

Die Beziehung $\sum_{k=0}^{\infty} \|x^k - x^*\| < \infty$ wurde von Powell [12] für das BFGS-Verfahren mit Schrittweitenfunktion T_P nachgewiesen, ferner von Dennis u. Moré [4] für das DFP- und das BFGS-Verfahren, falls (x^0, H_0) hinreichend nahe bei $(x^*, \nabla^2 f(x^*)^{-1})$ ist und die Schrittweite $t_k = 1$ gewählt wird.

Wir wollen nicht den Eindruck erwecken, daß jede in der Praxis gebräuchliche oder in der Literatur vorkommende Schrittweitenfunktion effizient ist. Hierzu geben wir zwei Beispiele an (s. z.B. Ritter [13], Polak [10]):

3.3. Definition. Sei $(x, p) \in A := \{(x, p) \in W_0 \times \mathbb{R}^n \colon \nabla f(x)^T p > 0\}$.

i) Sei $\beta \in (0, \frac{1}{2})$ und $\Phi(t) := \dfrac{f(x) - f(x - t p)}{t \, \nabla f(x)^T p}$.

Dann heißt

$$T_{MG}(x, p) := \begin{cases} \{1\} & \text{falls } \Phi(1) \geqq \beta \\ \{t > 0\colon \beta \leqq \Phi(t) \leqq 1 - \beta\} & \text{falls } \Phi(1) < \beta \end{cases}$$

die modifizierte Goldstein-Schrittweitenfunktion.

ii) Seien $\alpha \in (0, 1)$, $\beta \in (0, \frac{1}{2})$, $q(x, p)$ sei die kleinste nichtnegative ganze Zahl mit

$$f(x) - f(x - \alpha^{q(x,p)} p) \geqq \beta \, \alpha^{q(x,p)} \, \nabla f(x)^T p.$$

Dann heißt $T_{GA}(x,p) := \{\alpha^{q(x,p)}\}$ die Goldstein-Armijo-Schrittweitenfunktion.

Die Effizienz dieser beiden Schrittweitenfunktionen konnte nicht bewiesen werden. Es existiert lediglich eine Konstante $\theta > 0$ derart, daß

$$f(x) - f(x - t\,p) \geqq \theta \min\left(\nabla f(x)^T p, \left\{\frac{\nabla f(x)^T p}{\|p\|}\right\}^2\right)$$

für alle $t \in T_M(x,p)$ (bzw. $T_{GA}(x,p)$) und alle $(x,p) \in A$. Uns ist nicht bekannt, ob das BFGS-Verfahren kombiniert mit einer dieser Schrittweitenfunktionen zu einem konvergenten Verfahren führt oder sogar die Aussage von Korollar 3.2 gilt. Dies wäre insofern interessant, als man dann unter geeigneten Voraussetzungen an die Zielfunktion f zeigen könnte, daß nach endlich vielen Schritten $t_k = 1$ als Schrittweite gewählt werden kann.

Um etwas über die superlineare Konvergenz des BFGS-Verfahrens mit geeigneter effizienter Schrittweitenfunktion aussagen zu können wird über die Voraussetzungen (V) i)–iv) hinaus angenommen, daß

(V) v) f ist zweimal stetig differenzierbar. Es existiert eine Konstante $L > 0$ mit

$$\|\nabla^2 f(x) - \nabla^2 f(x^*)\| \leqq L\|x - x^*\| \qquad \text{für alle } x \in W_0.$$

(Hierbei ist x^* die Lösung von (P) und $\nabla^2 f(x)$ die Hessesche von f an der Stelle x).

erfüllt ist.

Entscheidend ist nun die Aussage von Korollar 3.2, daß nämlich

$$\sum_{k=0}^{\infty} \|x^k - x^*\| < \infty.$$

Hieraus kann wie bei Powell [11] die Beschränktheit von $\{H_k^{-1}\}$ gesichert werden, außerdem wird von Dennis u. Moré [4] gezeigt, daß dann

$$\lim_{k \to \infty} \frac{\|(H_k - \nabla^2 f(x^*)^{-1})\,\Delta g^k\|}{\|\Delta g^k\|} = 0.$$

Es gilt also

3.4. Lemma. Gegeben sei das Problem (P), die Voraussetzung (V) i)–v) sei erfüllt. Man betrachte das in Satz 3.1 definierte BFGS-Verfahren mit beliebiger effizienter Schrittweitenfunktion. Das Verfahren breche nicht schon nach endlich vielen Schritten mit der Lösung x^* von (P) ab.

Dann gilt:

i) $\{\|H_k^{-1}\|\}$ ist beschränkt (Powell [11]).

ii) $\lim\limits_{k \to \infty} \dfrac{\|(H_k - \nabla^2 f(x^*)^{-1})\,\Delta g^k\|}{\|\Delta g^k\|} = 0$ (Dennis u. Moré [4]).

Hieraus erhält man nun leicht:

3.5. Satz. Gegeben sei das Problem (P), die Voraussetzung (V) i)–v) sei erfüllt. Man betrachte das in Satz 3.1 definierte BFGS-Verfahren mit einer effizienten

Schrittweitenfunktion. Das Verfahren breche nicht schon nach endlich vielen Schritten mit der Lösung x^* von (P) ab. Es sei $\lim_{k\to\infty} t_k = 1$. Dann konvergiert $\{x^k\}$ superlinear gegen x^*, d.h. $\lim_{k\to\infty} \frac{\|x^{k+1}-x^*\|}{\|x^k-x^*\|}=0$.

Beweis. Aus Lemma 3.4 ii) und $\lim_{k\to\infty} t_k=1$ folgt

$$\lim_{k\to\infty} \frac{\|(t_k H_k - \nabla^2 f(x^*)^{-1})\,\Delta g^k\|}{\|\Delta g^k\|}=0.$$

Nun ist

$$\nabla f(x^{k+1})=t_k^{-1} H_k^{-1}\{(t_k H_k - \nabla^2 f(x^*)^{-1})\,\Delta g^k + \nabla^2 f(x^*)^{-1}(\Delta g^k - \nabla^2 f(x^*)\,\Delta x^k)\}.$$

Wegen Lemma 3.4 i) und $\lim_{k\to\infty} \frac{\|\Delta g^k - \nabla^2 f(x^*)\,\Delta x^k\|}{\|\Delta g^k\|}=0$ ist $\lim_{k\to\infty} \frac{\|\nabla f(x^{k+1})\|}{\|\Delta g^k\|}=0$.

Wegen

$$\|\Delta g^k\| \leqq \gamma\, \|\Delta x^k\| \leqq \gamma(\|x^k - x^*\| + \|x^{k+1}-x^*\|)$$

und Lemma 2.4 iv) erhält man

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

woraus sich die Behauptung ergibt.

Interessant sind jetzt natürlich Aussagen darüber, für welche effizienten Schrittweitenfunktionen auf $\lim_{k\to\infty} t_k=1$ geschlossen werden kann. Diese Aussage ist richtig (s. Dennis u. Moré [5]) für

1) Die Curry-Schrittweitenfunktion T_C.
2) Die Powell-Schrittweitenfunktion T_P, falls $\beta\in(0,\frac{1}{2})$. Es ist sogar $1\in T_P(x^k,p^k)$ für alle hinreichend großen k.
3) Die Curry-Altmann-Schrittweitenfunktion T_{CA}, falls $\alpha\to 0$. Genauer sei $\{\alpha_k\}\subset(0,\bar{\alpha}]$ mit $\bar{\alpha}\in(0,1)$ und $\lim_{k\to\infty}\alpha_k=0$. $t_k\in(0,t_c(x^k,p^k)]$ genüge

$$\nabla f(x^k - t_k p^k)^T p^k \leqq \alpha_k \nabla f(x^k)^T p^k.$$

Damit ist die superlineare Konvergenz des BFGS-Verfahrens mit diesen Schrittweitenfunktionen gezeigt. Leider ist es bisher noch nicht gelungen, eine entsprechende Aussage für die praktisch sehr bequem anwendbaren Danilin-Pshenichnyi- und Goldstein-Armijo-Schrittweitenfunktionen zu beweisen. Für die erste liegt zwar nach Satz 3.1 Konvergenz vor, aber die Konvergenz der Schrittweiten gegen 1 ist nicht bewiesen, während die zweite nicht im Sinne von Definition 2.1 effizient ist.

Dagegen kann aber die superlineare Konvergenz des BFGS-Verfahrens mit einer modifizierten Danilin-Pshenichnyi-Schrittweitenfunktion bewiesen werden. Die Anregung zu den folgenden Bemerkungen verdanke ich dem Referenten der ersten Fassung dieser Arbeit.

3.6. Definition. Seien $\alpha \in (0, 1)$, $\beta \in (0, 1)$ und $\sigma > 0$ gegeben. Sei $(x, p) \in A$ (s. Definition 2.1). Dann ist die modifizierte Danilin-Pshenichnyi-Schrittweitenfunktion T_{MDP} folgendermaßen definiert:

① Bestimme die kleinste nichtnegative ganze Zahl $r = r(x, p)$ mit $\alpha^{-r} \geqq \sigma \dfrac{\nabla f(x)^T p}{\|p\|^2}$, setze $t^* = t^*(x, p) = \alpha^{-r}$.

② Bestimme die kleinste nichtnegative ganze Zahl $q = q(x, p)$ mit

$$f(x) - f(x - \alpha^q t^* p) \geqq \beta \alpha^q t^* \nabla f(x)^T p.$$

③ Setze $T_{MDP}(x, p) = \{\alpha^q t^*\}$.

Dann gilt:

3.7. Lemma. f genüge den Voraussetzungen v) i)–iii). Dann ist T_{MDP} eine effiziente Schrittweitenfunktion.

Beweis. Sei $(x, p) \in A$ fest, zur Abkürzung setze man $t_{MDP} = \alpha^{q(x,p)} t^*(x, p)$. $t_c = t_c(x, p)$ sei die Curry-Schrittweite.

① $q = q(x, p) = 0$. Dann ist

$$f(x) - f(x - t_{MDP}\, p) \geqq \beta t^* \nabla f(x)^T p \geqq \beta \sigma \left\{\frac{\nabla f(x)^T p}{\|p\|}\right\}^2.$$

② $q = q(x, p) > 0$. Dann ist

$$f(x) - f(x - t_{MDP}\, p) \geqq \beta t_{MDP} \nabla f(x)^T p \quad \text{und}$$
$$f(x) - f(x - \alpha^{-1} t_{MDP}\, p) < \beta \alpha^{-1} t_{MDP} \nabla f(x)^T p.$$

Wir unterscheiden nun zwei Fälle:

ⓐ $\alpha^{-1} t_{MDP} \leqq t_c$.

Dann ist

$$\begin{aligned} \beta \alpha^{-1} t_{MDP} \nabla f(x)^T p &> f(x) - f(x - \alpha^{-1} t_{MDP}\, p) \\ &\geqq \alpha^{-1} t_{MDP} \nabla f(x)^T p - \frac{(\alpha^{-1} t_{MDP})^2 \gamma \|p\|^2}{2}, \end{aligned}$$

also ist

$$\tilde{t} := \frac{2(1-\beta)\alpha}{\gamma} \frac{\nabla f(x)^T p}{\|p\|^2} \leqq t_{MDP} \leqq \alpha^{-1} t_{MDP} \leqq t_c$$

und daher

$$\begin{aligned} f(x) - f(x - t_{MDP}\, p) &\geqq f(x) - f(x - \tilde{t} p) \\ &\geqq \tilde{t} \nabla f(x)^T p - \frac{\tilde{t}^2 \gamma \|p\|^2}{2} \\ &= \frac{2(1-\beta)\alpha}{\gamma} (1 - \alpha + \alpha\beta \cdot \left\{\frac{\nabla f(x)^T p}{\|p\|}\right\}^2. \end{aligned}$$

ⓑ $\alpha^{-1} t_{MDP} > t_c$.

Wegen

$$t_c \geqq \frac{\nabla f(x)^T p}{\gamma \|p\|^2} \quad \text{ist} \quad \frac{\alpha}{\gamma} \frac{\nabla f(x)^T p}{\|p\|^2} \leqq t_{MDP}$$

und daher

$$f(x) - f(x - t_{MDP}\, p) \geqq \frac{\alpha\, \beta}{\gamma} \left\{ \frac{\nabla f(x)^T p}{\|p\|} \right\}^2.$$

Damit ist die Effizienz von T_{MDP} gezeigt.

Nun betrachte man das in Satz 3.1 beschriebene BFGS-Verfahren mit der Schrittweitenfunktion T_{MDP} unter der Voraussetzung V i)–iv). Nach Satz 3.1 gilt: Bricht das Verfahren nicht nach endlich vielen Schritten mit der Lösung x^* von (P) ab, so liefert es eine Folge $\{x^k\}$, die gegen x^* konvergiert, nach Korollar 3.2 gilt sogar $\sum_{k=0}^{\infty} \|x^k - x^*\| < \infty$. Unser Ziel ist der Beweis der globalen superlinearen Konvergenz des BFGS-Verfahrens mit der Schrittweitenfunktion T_{MDP}.

3.8. Satz. Gegeben sei das Problem (P), die Voraussetzung (V) i)–v) sei erfüllt. Man betrachte das in Satz 3.1 definierte BFGS-Verfahren mit der Schrittweitenfunktion T_{MDP}. Für die bei der Definition von T_{MDP} auftretenden Parameter α, β gelte: $\beta \in (0, \frac{1}{2})$ und $\alpha < \dfrac{1}{2(1-\beta)}$. Das Verfahren breche nicht schon nach endlich vielen Schritten mit der Lösung x^* von (P) ab und liefere eine Folge $\{x^k\}$. Dann konvergiert $\{x^k\}$ superlinear gegen x^*.

Beweis. Wir wollen Satz 3.5 anwenden und zeigen hierzu, daß für alle hinreichend großen k gilt: $t_k = t_{MDP}(x^k, p^k) = 1$. Hierzu beachten wir zunächst, daß

a) $\lim_{k\to\infty} x^k = x^*$ (Satz 3.1)

b) $\lim_{k\to\infty} \dfrac{\|\nabla f(x^k) - \nabla^2 f(x^*)\, p^k\|}{\|p^k\|} = 0$

(Dennis u. Moré [4, 5] unter Berücksichtigung von $\sum_{k=0}^{\infty} \|x^k - x^*\| < \infty$ bzw. Korollar 3.2).

Im folgenden seien $q_k := q(x^k, p^k)$ und $r_k := r(x^k, p^k)$ die bei der Definition von $t_k = t_{MDP}(x^k, p^k)$ auftretenden nichtnegativen ganzen Zahlen.

① Es existieren positive Konstanten c_0, c_1 derart, daß

$$c_0 \leqq \frac{\nabla f(x^k)^T p^k}{\|p^k\|^2} \leqq c_1 \qquad \text{für alle } k.$$

Denn:

$$\frac{\nabla f(x^k)^T p^k}{\|p^k\|^2} = \frac{(\nabla f(x^k) - \nabla^2 f(x^*)\, p^k)^T p^k}{\|p^k\|^2} + \frac{p^{kT}\, \nabla^2 f(x^*)\, p^k}{\|p^k\|^2}.$$

Mit

$$\varepsilon_k := \frac{(\nabla f(x^k) - \nabla^2 f(x^k)\, p^k)^T p^k}{\|p^k\|^2} \quad \text{gilt} \quad \lim_{k\to\infty} \varepsilon_k = 0$$

wegen b). Wegen $2c \leqq \frac{p^{kT}\, \nabla^2 f(x^*)\, p^k}{\|p^k\|^2}$ (wobei $c>0$ die in Voraussetzung (V) iv) vorkommende Konstante ist) folgt die Aussage ①.
Aus ① folgt, daß die Folge $\{r_k\}$ beschränkt ist.

② Es ist $\lim_{k\to\infty} p^k = \Theta$.

Denn:

$$c_0\, \|p^k\|^2 \leqq \nabla f(x^k)^T p^k \leqq \|\nabla f(x^k)\| \cdot \|p^k\| \qquad \text{nach ①},$$
$$c_0\, \|p^k\| \leqq \|\nabla f(x^k)\|, \quad \text{wegen} \quad \lim_{k\to\infty} \nabla f(x^k) = \Theta$$

($\{x^k\}$ konvergiert gegen x^* mit $\nabla f(x^*) = \Theta$) folgt ②.

③ Es ist

$$\lim_{k\to\infty} \frac{f(x^k) - f(x^k - p^k)}{\nabla f(x^k)^T p^k} = \frac{1}{2}$$

und daher wegen $\beta \in (0, \frac{1}{2})$: $f(x^k) - f(x^k - p^k) \geqq \beta\, \nabla f(x^k)^T p^k$ für alle hinreichend großen k. Denn:

$$\frac{f(x^k) - f(x^k - p^k)}{\nabla f(x^k)^T p^k} = 1 - \frac{1}{2}\, \frac{p^{kT}\, \nabla^2 f(x^k - \Theta_k\, p^k)\, p^k}{\nabla f(x^k)^T p^k} \qquad \text{mit } \theta_k \in (0,1)$$
$$= \tfrac{1}{2} - \tfrac{1}{2}\,\delta_k \quad \text{mit}$$
$$\delta_k := \frac{(\nabla^2 f(x^k - \theta_k\, p^k)\, p^k - \nabla f(x^k))^T p^k}{\nabla F(x^k)^T p^k}.$$

Nun ist wegen ① und der Dreiecksungleichung

$$|\delta_k| \leqq \frac{1}{c_0}\, \|\nabla^2 f(x^k - \theta_k\, p^k) - \nabla^2 f(x^*)\| + \frac{1}{c_0}\, \frac{\|\nabla^2 f(x^*)\, p^k - \nabla f(x^k)\|}{\|p^k\|}.$$

Der erste Summand geht wegen $\lim_{k\to\infty} (x^k - \theta_k\, p^k) = x^*$ ((a) und ②) sowie Voraussetzung (V) v) gegen Null, der zweite wegen b). Damit ist ③ bewiesen. Insbesondere folgt, daß $q_k \leqq r_k$ für alle hinreichend großen k.

④ Es ist $q_k = r_k$ und damit $t_k = 1$ für alle hinreichend großen k. Denn: Da $\{r_k\}$ nach ① beschränkt ist, folgt aus der Annahme, daß $q_k < r_k$ für unendlich viele k ist, die Existenz von $j \geqq 1$ mit

$$f(x^k) - f(x^k - \alpha^{-j}\, p^k) \geqq \beta\, \alpha^{-j}\, \nabla f(x^k)^T p^k \qquad \text{für unendlich viele } k.$$

Analog zu ③ erhält man nun

$$\lim_{k\to\infty} \frac{f(x^k)-f(x^k-\alpha^{-j}p^k)}{\alpha^{-j}\nabla f(x^k)^T p^k} = 1-\frac{1}{2}\alpha^{-j}.$$

Nun ist aber $1-\frac{1}{2}\alpha^{-j} \leqq 1-\frac{1}{2}\alpha^{-1} < \beta$ wegen $\alpha < \frac{1}{2(1-\beta)}$. Damit haben wir einen Widerspruch zur Annahme erhalten und der Satz ist bewiesen.

Literatur

1. Broyden, C.G.: Quasi-Newton methods and their application to function minimization. Math. Comput. **21**, 368–381 (1967)
2. Broyden, C.G., Dennis, J.E., Moré, J.J.: On the local and superlinear convergence of quasi-Newton methods. J. Inst. Math. Appl. **12**, 223–246 (1973)
3. Daniel, J.W.: The approximate minimization of functionals. Englewood Cliffs, N.J.: Prentice-Hall 1971
4. Dennis, J.E., Moré, J.J.: A characterization of superlinear convergence and its application to quasi-Newton methods. Math. Comput. **28**, 549–560 (1974)
5. Dennis, J.E., Moré, J.J.: Quasi-Newton methods, motivation and theory. SIAM Rev. **19**, 46–89 (1977)
6. Dixon, L.C.W.: Variable metric algorithms: Necessary and sufficient conditions for identical behavior on nonquadratic functions. J. Optimization Theory Appl. **10**, 34–40 (1972)
7. Fletcher, R., Powell, M.J.D.: A rapidly convergent descent method for minimization. Comput. J. **6**, 163–168 (1963)
8. Lenard, M.L.: Practical convergence conditions for the Davidon-Fletcher-Powell method. Math. Programming **9**, 69–86 (1975)
9. Ortega, J.M., Rheinboldt, W.C.: Iterative solution of nonlinear equations in several variables. New York: Academic Press 1970
10. Polak, E.: Computational methods in optimization. A unified approach. New York: Academic Press 1971
11. Powell, M.J.D.: On the convergence of the variable metric algorithm. J. Inst. Math. Appl. **7**, 21–36 (1971)
12. Powell, M.J.D.: Some global convergence properties of a variable metric algorithm for minimization without exact line searches. In: Nonlinear Programming, SIAM-AMS Proceedings, Vol. 9. Providence, R.I.: American Mathematical Society 1976
13. Ritter, K.: A superlinearly convergent method for unconstrained minimization. In: Nonlinear programming (J.B. Rosen, O.L. Mangasarian, K. Ritter, eds.). New York: Academic Press 1970
14. Stoer, J.: On the convergence-rate of imperfect minimization algorithms in Broyden's β class. Math. Programming **9**, 313–335 (1975)
15. Warth, W., Werner, J.: Effiziente Schrittweitenfunktionen bei unrestringierten Optimierungsaufgaben. Computing **19**, 59–72 (1977)

Eingegangen am 29. Juli 1977