

Das Nichtlineare CG-Verfahren

Bachelor Seminar: Numerische Methoden der nichtlinearen Optimierung

Donata Buožytė

30. Juli 2019

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Der allgemeine CG-Algorithmus	1
3	Das Fletcher–Reeves-Verfahren	2
4	Das Polak–Ribière-Verfahren	2
4.1	Motivation	2
4.2	Konvergenz	3
4.3	Modifiziertes Polak–Ribière-Verfahren	5
4.4	Vergleich der Verfahren	9
5	Das Hestenes–Stiefel-Verfahren	9
6	Implementierung	10
	Literatur	12

1 Einleitung

Das nichtlineare CG-Verfahren ist eine Erweiterung des linearen CG-Verfahrens auf stetig differenzierbare Funktionen. Als Basis für dieses Abstiegsverfahren dient der konjugierte Gradient einer Funktion $f \in \mathcal{C}^1(\mathbb{R}^n, \mathbb{R})$, woher auch der Name CG-Verfahren ("conjugate gradient") stammt. In dieser Ausarbeitung soll es, basierend auf dem allgemeinen CG-Verfahren, um die Fletcher–Reeves-, Hestenes–Stiefel- und primär die Polak–Ribière-Variante gehen. Diese Varianten werden auch oft selbst als eigene Verfahren bezeichnet.

Die folgenden Abschnitte basieren auf den entsprechenden Werken von C. Geiger und C. Kanzow [1] und R. Pytlak [2].

2 Der allgemeine CG-Algorithmus

Auf dem folgenden Algorithmus basieren die drei Verfahren, die in den nächsten Kapiteln behandelt werden sollen.

Data: $x^0 \in \mathbb{R}^n$ (Startpunkt)
Setze $d^0 = -\nabla f(x^0)$;
while $\|\nabla f(x^k)\| > 0$ (bzw. $> \epsilon$)
 Bestimme die Schrittweite $t_k > 0$ mit $t_k = \min\{t > 0 : \nabla f(x^k + td^k)^T d^k = 0\}$;
 $x^{k+1} = x^k + t_k d^k$;
 Bestimme β_k ;
 $d^{k+1} = -\nabla f(x^{k+1}) + \beta_k d^k$;
end

Algorithmus 1: Allgemeiner CG-Algorithmus [2, Algorithmus 13.5.]

Dabei definiert ϵ eine gewisse Toleranz, weil es meist ausreicht, sich in einer sehr nahen Umgebung der Null zu befinden.

Die hier verwendete Schrittweitenregel zur Berechnung von t_k wird Curry-Regel genannt. Diese Schrittweitenregel hat den großen Vorteil, dass sie nach Definition sicherstellt, dass der Gradient der nächsten Iterierten $k + 1$ senkrecht auf der vorherigen Suchrichtung d^k steht. Da diese Regel jedoch nicht implementierbar ist, wird sie oft mit der (strengen) Wolfe–Powell-Schrittweitenregel approximiert.

Es fällt sehr schnell auf, dass die einzige Möglichkeit, das Verfahren zu variieren, in der Wahl von β_k liegt. Folglich hängt die Konvergenztheorie, das numerische Verhalten etc. von dieser Wahl ab.

3 Das Fletcher–Reeves-Verfahren

Wie bereits im vorherigen Kapitel erwähnt, erfolgt die Variation des allgemeinen CG-Verfahrens durch die Wahl des Parameters β_k . Im Fall des Fletcher–Reeves-Verfahrens wird dieser Skalar definiert durch

$$\beta_k = \beta_k^{FR} = \frac{\|\nabla f(x^{k+1})\|^2}{\|\nabla f(x^k)\|^2}.$$

Basierend auf dieser Variante kann man nun auch einen Konvergenzsatz herleiten.

Satz 3.1 (Konvergenz [1, Satz 13.7.]). *Sei $f \in \mathcal{C}^1(\mathbb{R}^n, \mathbb{R})$ nach unten beschränkt. Falls zudem der Gradient ∇f Lipschitz-stetig auf der Niveaumenge $\mathcal{L}(x^0) := \{x \in \mathbb{R}^n : f(x) \leq f(x^0)\}$, d.h. $\exists L > 0 : \|\nabla f(x) - \nabla f(y)\| \leq L\|x - y\| \forall x, y \in \mathcal{L}(x^0)$, ist, so gilt:*

$$\liminf_{k \rightarrow \infty} \|\nabla f(x^k)\| = 0$$

für alle durch den Algorithmus erzeugten Folgen $(x^k)_{k \in \mathbb{N}}$.

Der Beweis dieses Satzes 3.1 soll hier nicht geführt werden, da er analog zum Beweis des Satzes 4.1 erfolgt.

4 Das Polak–Ribière-Verfahren

Beim Polak–Ribière-Verfahren fällt die Wahl des Parameters β_k auf folgenden Skalar:

$$\beta_k = \beta_k^{PR} = \frac{(\nabla f(x^{k+1}) - \nabla f(x^k))^T \nabla f(x^{k+1})}{\|\nabla f(x^k)\|^2}.$$

4.1 Motivation

Nun könnte die Frage aufkommen, wieso man ein weiteres CG-Verfahren braucht, wenn man bereits das Fletcher–Reeves-Verfahren mit einer recht schönen Konvergenztheorie vorliegen hat. Diese Frage lässt sich beantworten, wenn man zum Beispiel das Verhalten des Verfahrens bei bestimmte Winkel zwischen dem negativen Gradienten an der k -ten Iterierten und der k -ten Abstiegsrichtung betrachtet. [2, Seite 84-85]

Sei also θ_k der Winkel zwischen $-\nabla f(x^k)$ und d^k . Dann gelten folgende Beziehungen:

$$\begin{aligned} \cos(\theta_k) &= \frac{\langle d^k, \nabla f(x^k) \rangle}{\|d^k\| \|\nabla f(x^k)\|} = \frac{\langle -\nabla f(x^k) + \beta_{k-1} d^{k-1}, \nabla f(x^k) \rangle}{\|d^k\| \|\nabla f(x^k)\|} = \frac{\|\nabla f(x^k)\|}{\|d^k\|} \\ \Leftrightarrow \|d^k\| &= \sec(\theta_k) \|\nabla f(x^k)\|, \end{aligned} \tag{1}$$

$$\tan(\theta_{k+1}) \stackrel{\text{Abb. 4.1}}{=} \frac{\|\beta_k d^k\|}{\|\nabla f(x^{k+1})\|} \Leftrightarrow \beta_k \|d^k\| = \tan(\theta_{k+1}) \|\nabla f(x^{k+1})\|. \tag{2}$$

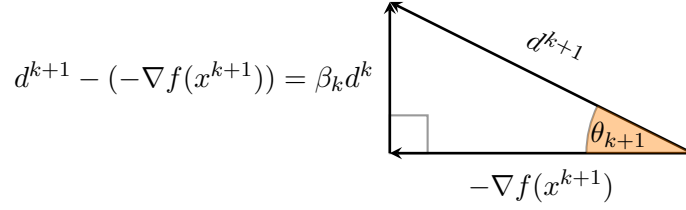


Abbildung 4.1: Winkelbeziehung

Man kann zudem für sowohl das Fletcher–Reeves-, als auch das Polak–Ribière-Verfahren jeweils eine weitere Beziehung herleiten.

Im Fall von Fletcher–Reeves gilt somit für alle $\theta_i \in [0, \frac{\pi}{2})$ mit $i \in \{k, k+1\}$

$$\tan(\theta_{k+1}) = \sec(\theta_k) \frac{\beta_k \|\nabla f(x^k)\|}{\|\nabla f(x^{k+1})\|} > \tan(\theta_k) \frac{\|\nabla f(x^{k+1})\|}{\|\nabla f(x^k)\|}. \quad (3)$$

Hierbei wurden zuerst die Gleichungen (1) und (2) verwendet und bei der Ungleichung die Definition von β_k und die Eigenschaft, dass $\sec(\theta_k) > \tan(\theta_k)$ für alle $\theta_k \in [0, \frac{\pi}{2})$ ist. Für Polak–Ribière hingegen gilt

$$\tan(\theta_{k+1}) = \sec(\theta_k) \frac{\beta_k \|\nabla f(x^k)\|}{\|\nabla f(x^{k+1})\|} \leq \sec(\theta_k) \frac{\|\nabla f(x^{k+1}) - \nabla f(x^k)\|}{\|\nabla f(x^{k+1})\|}. \quad (4)$$

Die erste Gleichung wurde dabei analog zum Fletcher–Reeves-Fall mit Hilfe von (1) und (2) hergeleitet, während bei der Ungleichung die Cauchy–Schwarz-Ungleichung für Skalarprodukte verwendet wurde.

Nun soll der ungünstige Fall $\theta_k \approx \frac{\pi}{2}$ betrachtet werden. Bei diesem steht die nächste Abstiegsrichtung d^k beinahe senkrecht auf dem negativen Gradienten $-\nabla f(x^k)$ und ist somit auch nahezu parallel zu der vorherigen Abstiegsrichtung d^{k-1} , die nach Definition der Curry-Schrittweitenregel senkrecht auf diesem Gradienten steht. Damit ist d^k eine schlechte Wahl und es werden nur kleine Schritte durchgeführt, wodurch $x^k \approx x^{k+1}$ und auch $\nabla f(x^k) \approx \nabla f(x^{k+1})$. Für Fletcher–Reeves folgt mit Hilfe von (3), dass $\theta_{k+1} \approx \frac{\pi}{2}$, womit man also wieder in dem gleichen Fall landet. Bei Polak–Ribière hingegen folgt mit (4), dass $\theta_{k+1} \approx 0$. Das bedeutet, dass ein so genannter Restart ausgelöst wird, sprich die nächste Abstiegsrichtung entspricht einer Abstiegsrichtung im Gradientenverfahren bzw. dem negativen Gradienten. Folglich ist das Polak–Ribière-Verfahren dem Fletcher–Reeves-Verfahren numerisch gesehen überlegen, was unter anderem die Motivation zur Entwicklung neuer Verfahren ist.

4.2 Konvergenz

Auch für das Polak–Ribière-Verfahren gibt es natürlich einen Konvergenzsatz. Jedoch wird auffallen, dass die Wahl von β_k die Konvergenztheorie stark beeinflusst, da dieser Parameter hier negativ werden kann.

Satz 4.1 (Konvergenz [1, Satz 13.10.], [2, Theorem 2.7.]). *Sei $f \in \mathcal{C}^1(\mathbb{R}^n, \mathbb{R})$ und nach unten beschränkt. Falls zudem der Gradient ∇f Lipschitz-stetig auf der kompakten Niveaumenge $\mathcal{L}(x^0) := \{x \in \mathbb{R}^n : f(x) \leq f(x^0)\}$ ist, so gilt: $\liminf_{k \rightarrow \infty} \|\nabla f(x^k)\| = 0$ für alle durch den Algorithmus erzeugten Folgen $(x^k)_{k \in \mathbb{N}}$ mit $\lim_{k \rightarrow \infty} \|x^{k+1} - x^k\| = 0$.*

Beweis. Zunächst muss geprüft werden, ob die Abstiegsrichtungen und Schrittweiten wohldefiniert sind. Für d^k betrachtet man also

$$\nabla f(x^k)^T d^k = \nabla f(x^k)^T (-\nabla f(x^k) + \beta_{k-1} d^{k-1}) = -\|\nabla f(x^k)\|^2 < 0. \quad (5)$$

Damit ist die Abstiegsrichtung wohldefiniert. Für die Curry-Schrittweitenregel folgt mit Hilfe der Voraussetzungen, dass diese wohldefiniert und auch effizient ist.

Nun ist nur noch die Konvergenz zu zeigen. Hierfür soll zunächst ein neuer Faktor definiert werden. Aus der Effizienz der Curry-Regel folgt nämlich:

$$\exists \theta > 0 : f(x^k) - f(x^{k+1}) \geq \theta \left(\frac{\nabla f(x^k)^T d^k}{\|d^k\|} \right)^2 = \theta \frac{\|\nabla f(x^k)\|^4}{\|d^k\|^2} = \theta \frac{1}{\gamma_k}. \quad (6)$$

Damit wird γ_k als $\frac{\|d^k\|^2}{\|\nabla f(x^k)\|^4}$ definiert.

Nun soll angenommen werden, dass die Folgerung im Satz 4.1 nicht stimmt, womit $\liminf_{k \rightarrow \infty} \|\nabla f(x^k)\| \geq 0$ und auch ein $\epsilon > 0$ existiert, sodass $\|\nabla f(x^k)\| \geq \epsilon \forall k \in \mathbb{N}$. Das Ziel wird also sein, einen Widerspruch herzuleiten. In diesem Fall soll das mit Hilfe einer Abschätzung für γ_k und der Ungleichung (6) erfolgen. Zuerst wird also diese Abschätzung benötigt.

$$\begin{aligned} \gamma_k &= \frac{\|d^k\|^2}{\|\nabla f(x^k)\|^4} = \frac{(-\nabla f(x^k) + \beta_{k-1} d^{k-1})^T (-\nabla f(x^k) + \beta_{k-1} d^{k-1})}{\|\nabla f(x^k)\|^4} \\ &= \frac{1}{\|\nabla f(x^k)\|^2} - 2\beta_{k-1} \frac{\nabla f(x^k)^T d^{k-1}}{\|\nabla f(x^k)\|^4} + \beta_{k-1}^2 \frac{\|d^{k-1}\|^2}{\|\nabla f(x^k)\|^4}. \end{aligned}$$

Aufgrund der Curry-Regel wird der mittlere Term 0 und es muss nur noch der dritte Term abgeschätzt werden. Dies erfolgt durch Anwendung der Cauchy-Schwarz-Ungleichung auf das Skalarprodukt in β_{k-1} .

$$\begin{aligned} \beta_{k-1}^2 \frac{\|d^{k-1}\|^2}{\|\nabla f(x^k)\|^4} &= \frac{\|d^{k-1}\|^2}{\|\nabla f(x^{k-1})\|^4} \frac{((\nabla f(x^k) - \nabla f(x^{k-1}))^T \nabla f(x^k))^2}{\|\nabla f(x^k)\|^4} \\ &\leq \gamma_{k-1} \frac{\|\nabla f(x^k)\|^2}{\|\nabla f(x^k)\|^4} \|\nabla f(x^k) - \nabla f(x^{k-1})\|^2 \\ &= \gamma_{k-1} \frac{1}{\|\nabla f(x^k)\|^2} \|\nabla f(x^k) - \nabla f(x^{k-1})\|^2. \end{aligned} \quad (7)$$

Nun kann einerseits die Annahme verwendet werden, dass $\|\nabla f(x^k)\| \geq \epsilon$ ist, wodurch $\frac{1}{\|\nabla f(x^k)\|} \leq \frac{1}{\epsilon}$ gilt, und andererseits die Lipschitz-Stetigkeit des Gradienten, mit der nach Definition $\|\nabla f(x^k) - \nabla f(x^{k-1})\|^2 \leq L^2 \|x^k - x^{k-1}\|^2$ gilt. Nun kann die Eigenschaft

verwendet werden, dass $L\|x^k - x^{k-1}\| \rightarrow 0$ und damit auch $0 \leq L\|x^k - x^{k-1}\| < \epsilon$ für alle hinreichend große $k \in \mathbb{N}$ ist. Insgesamt gilt also $0 \leq \|\nabla f(x^k) - \nabla f(x^{k-1})\|^2 \leq \epsilon^2$. Somit ergibt sich

$$\frac{\|\nabla f(x^k) - \nabla f(x^{k-1})\|^2}{\|\nabla f(x^{k-1})\|^2} \leq \frac{\epsilon^2}{\epsilon^2} = 1.$$

Wenn man dies nun in (7) verwendet, ergibt sich die rekursive Abschätzung

$$\gamma_k \leq \frac{1}{\|\nabla f(x^k)\|^2} + \gamma_{k-1}$$

für alle hinreichend große $k \in \mathbb{N}$. Nun kann o. B. d. A. auch angenommen werden, dass diese Abschätzung für alle $k \in \mathbb{N}$ erfüllt ist, womit folgt:

$$\gamma_k \leq \frac{1}{\|\nabla f(x^k)\|^2} + \gamma_{k-1} \leq \gamma_0 + \sum_{i=1}^k \frac{1}{\|\nabla f(x^i)\|^2} = \sum_{i=0}^k \frac{1}{\|\nabla f(x^i)\|^2} \leq \frac{k+1}{\epsilon^2}. \quad (8)$$

Dabei wurde zusätzlich die Annahme und die Definitionen von γ_k und d^0 verwendet, womit $\gamma_0 = \frac{1}{\|\nabla f(x^0)\|^2}$. Mit Hilfe von (6) und (8) kann man nun den Term $f(x^0) - f(x^{k+1})$ abschätzen.

$$f(x^0) - f(x^{k+1}) = \sum_{i=0}^k f(x^i) - f(x^{i+1}) \geq \theta \epsilon^2 \sum_{i=0}^k \frac{1}{i+1}$$

Wenn man nun den Grenzfall $k \rightarrow \infty$ betrachtet, fällt auf, dass die Summe gegen die Kehrwertreihe geht, die bekanntlich divergiert. Da der vordere Term somit ebenfalls divergieren muss und $f(x^0)$ konstant ist, muss $f(x^{k+1})$ gegen $-\infty$ gehen, was ein Widerspruch zur Beschränktheit von f ist. Damit war die Annahme falsch und $\liminf_{k \rightarrow \infty} \|\nabla f(x^k)\| = 0$. \square

4.3 Modifiziertes Polak–Ribière-Verfahren

Aufgrund der Curry-Schrittweitenregel, die wieder ein Optimierungsproblem darstellt, kann das Polak–Ribière-Verfahren in dieser Form nicht implementiert werden. Daher muss man also andere Schrittweitenregeln finden. Wenn man möglichst nahe an der Curry-Regel liegen möchte, wird die Wahl auf die Wolfe–Powell-Schrittweitenregel fallen. Jedoch gibt es speziell für dieses Verfahren auch eine andere Schrittweitenregel, die auch zu einer schöneren Konvergenztheorie des Verfahrens führt. Demnach soll die Schrittweite t_k folgendermaßen gewählt werden:

Wähle $t_k = \max\{\rho_k \beta^l : l = 0, 1, 2, \dots\}$, sodass gilt:

$$f(x^{k+1}) \leq f(x^k) - \sigma t_k^2 \|d^k\|^2 \quad (a)$$

$$-\delta_2 \|\nabla f(x^{k+1})\|^2 \leq \nabla f(x^{k+1})^T d^{k+1} \leq -\delta_1 \|\nabla f(x^{k+1})\|^2 \quad (b)$$

Dabei sind die verwendeten Parameter wie folgt definiert: $\rho_k = \frac{|\nabla f(x^k)^T d^k|}{\|d^k\|^2}$, $\beta \in (0, 1)$, $\sigma \in (0, 1)$, $0 < \delta_1 < 1 < \delta_2$, $x^{k+1} = x^k + t_k d^k$, $d^{k+1} = -\nabla f(x^{k+1}) + \beta_k^P d^k$.

Diese Schrittweitenregel soll nun also im allgemeinen CG-Algorithmus die Curry-Regel ersetzen. Somit ergibt sich ein neues Verfahren, das so genannte modifizierte Polak–Ribière-Verfahren.

Durch diese Abänderung muss natürlich die Wohldefiniertheit wieder diskutiert werden.

Satz 4.2 (Wohldefiniertheit [1, Satz 13.13.]). *Sei $f \in C^1(\mathbb{R}^n, \mathbb{R})$ und breche das Verfahren nicht nach endlich vielen Schritten ab. Dann ist dieses wohldefiniert.*

Vor dem Beweis des Satzes ist zu erwähnen, dass das Verfahren bereits wohldefiniert ist, falls es nach endlich vielen Schritten abbricht. In diesem Fall wurde dann ein Index k gefunden, sodass der Punkt x^k die gegebene Funktion minimiert.

Beweis. Zunächst muss man zeigen, dass alle Parameter wohldefiniert sind und existieren. Da nur ρ_k divergieren könnte und alle anderen Faktoren endlich sind, muss nur geklärt werden, ob $\|d^k\| = 0$ werden kann. Nach Annahme gilt aber, dass $\|\nabla f(x^k)\|$ nicht Null ist, womit auch $\|d^k\|$ nicht Null sein kann. Es sind also alle Parameter wohldefiniert. Im Folgenden soll gezeigt werden, dass immer eine Schrittweite gefunden werden kann, die beide Bedingungen erfüllt.

Sei also $k \in \mathbb{N}$ mit $\nabla f(x^k)^T d^k < 0$. Es soll angenommen werden, dass die Bedingung (a) nicht für alle hinreichend großen $l \in \mathbb{N}$ erfüllt ist, sprich es gibt eine Indexmenge $L \subseteq \mathbb{N}$, sodass

$$\frac{f(x^k + \rho_k \beta^l d^k) - f(x^k)}{\rho_k \beta^l} > -\sigma \rho_k \beta^l \|d^k\|^2 \quad \forall l \in L.$$

Dies entspricht dem Gegenteil von der Bedingung (a) mit eingesetztem x^{k+1} und einer Multiplikation mit $\frac{1}{\rho_k \beta^l}$ auf beiden Seiten. Wenn nun den Grenzfall $l \rightarrow \infty$ betrachtet wird, fällt auf, dass $\rho_k \beta^l$ aufgrund der Definition gegen Null geht, womit man auf der linken Seite eine Richtungsableitung bekommt. Es gilt also: $\nabla f(x^k)^T d^k \geq 0$, was jedoch ein Widerspruch zur Annahme $\nabla f(x^k)^T d^k < 0$ ist.

Nun soll angenommen werden, dass die Bedingung (b) nicht für alle hinreichend großen $l \in \mathbb{N}$ erfüllt ist und die Indexmenge L soll o. B. d. A. wie oben sein. Es gilt also eine oder beide der folgenden Ungleichungen für alle $l \in L$:

$$\begin{aligned} -\delta_1 \|\nabla f(x^{k+1})\|^2 &< \nabla f(x^{k+1})^T (-\nabla f(x^{k+1}) + \frac{(\nabla f(x^{k+1}) - \nabla f(x^k))^T \nabla f(x^{k+1})}{\|\nabla f(x^k)\|^2} d^k), \\ -\delta_2 \|\nabla f(x^{k+1})\|^2 &> \nabla f(x^{k+1})^T (-\nabla f(x^{k+1}) + \frac{(\nabla f(x^{k+1}) - \nabla f(x^k))^T \nabla f(x^{k+1})}{\|\nabla f(x^k)\|^2} d^k). \end{aligned}$$

Dabei ist x^{k+1} als $x^k + \rho_k \beta^l d^k$ definiert.

Im Grenzfall $l \rightarrow \infty$ wird nun wieder verwendet, dass $\rho_k \beta^l$ gegen Null geht. Daher gilt,

dass x^{k+1} gegen x^k geht, wodurch auch $\nabla f(x^{k+1})$ gegen $\nabla f(x^k)$ geht. Somit folgt für die beiden Ungleichungen

$$\begin{aligned} -\delta_1 \|\nabla f(x^k)\|^2 &\leq -\|\nabla f(x^k)\|^2 \quad (l \rightarrow \infty), \\ -\delta_2 \|\nabla f(x^k)\|^2 &\geq -\|\nabla f(x^k)\|^2 \quad (l \rightarrow \infty). \end{aligned}$$

Aufgrund der Definition von δ_1 und δ_2 folgt sofort, dass $\|\nabla f(x^k)\|$ gegen Null gehen muss, was der Annahme, dass das Verfahren nicht nach endlich vielen Schritten abbricht, widerspricht. Damit sind die Bedingungen (a) und (b) für alle hinreichend großen $l \in \mathbb{N}$ erfüllt.

Zuletzt bleibt zu zeigen, dass auch die Annahme $\nabla f(x^k)^T d^k < 0$ für alle $k \in \mathbb{N}$ erfüllt ist, was bedeutet, dass d^k eine wohldefinierte Abstiegsrichtung ist. Dies folgt jedoch direkt aus der Bedingung (b), da sowohl δ_1 , als auch $\|\nabla f(x^k)\|$ nach Annahme strikt größer als Null sind. Damit ist der Algorithmus also wohldefiniert. \square

Es soll nun eine Menge von Voraussetzungen eingeführt werden.

Voraussetzungen V ([1, Voraussetzungen 13.14]). *f sei stetig differenzierbar, $\mathcal{L}(x^0)$ sei kompakt, d.h. insbesondere, dass es eine abgeschlossene Kugel $U_r(x^0)$ gibt, sodass $\mathcal{L}(x^0) \subseteq U_r(x^0)$ gilt. Zudem soll ∇f auf einer abgeschlossenen Kugel mit dem Radius $r' > r$ Lipschitz-stetig mit der Lipschitz-Konstanten L sein.*

Ein $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, das die Voraussetzungen V erfüllt, besitzt nun auch folgende Eigenschaften

$$(x^k)_{k \in \mathbb{N}} \subseteq \mathcal{L}(x^0), \quad (\text{i})$$

$$(f(x^k))_{k \in \mathbb{N}} \text{ ist konvergent}, \quad (\text{ii})$$

$$\lim_{k \rightarrow \infty} t_k \|d^k\| = 0, \quad (\text{iii})$$

$$t_k \|d^k\|^2 \leq \delta_2 c^2 \quad \forall k \in \mathbb{N}, \quad (\text{iv})$$

$$\exists \theta > 0 : t_k \geq \theta \frac{|\nabla f(x^k)^T d^k|}{\|d^k\|^2} \quad \forall k \in \mathbb{N}. \quad (\text{v})$$

Dabei ist c eine Konstante größer als 0 mit der Eigenschaft, dass $\|\nabla f(x^k)\| \leq c$ für alle $k \in \mathbb{N}$ ist. Da eine Lipschitz-stetige Funktion auf einem Kompaktum ihr Maximum und Minimum annimmt, ist dieses c wohldefiniert und kann beispielsweise als das besagte Maximum gewählt werden. [1, Lemma 13.15.]

Der Beweis der Eigenschaften erfolgt durch Anwendung der Definitionen und den Voraussetzungen.

Mit Hilfe dieser Eigenschaften und der Wohldefiniiertheit des Verfahrens kann man nun auch die Konvergenz beweisen.

Satz 4.3 (Konvergenz [1, Satz 13.16.]). *Erfülle $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ die Voraussetzungen V, so gilt:*

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

für alle durch den Algorithmus erzeugten Folgen $(x^k)_{k \in \mathbb{N}}$.

Beweis. Angenommen die Norm des Gradienten von f ausgewertet in der Folge x^k konvergiert nicht gegen Null, sprich $\|\nabla f(x^k)\| \not\rightarrow 0$. Damit muss es ein $\epsilon > 0$ und ein Indexmenge $K \subset \mathbb{N}$ geben, sodass für alle Indizes $k \in K$ gilt $\|\nabla f(x^{k-1})\| \geq \epsilon$.

Um dies zu einem Widerspruch zu führen, soll zunächst gezeigt werden, dass $\lim_{k \in K} \|\nabla f(x^k)\| = 0$ gilt, wobei es jedoch nicht reicht, nur diese Aussage zu zeigen, da die Behauptung für $\nabla f(x^{k-1})$ aufgestellt wurde. Zunächst werden aber einige weitere Abschätzungen benötigt.

Für die Norm der Abstiegsrichtung für alle $k \in K$

$$\|d^k\| \leq \|\nabla f(x^k)\| + \frac{\|d^{k-1}\|}{\|\nabla f(x^{k-1})\|^2} \|\nabla f(x^k)\| \|\nabla f(x^k) - \nabla f(x^{k-1})\|. \quad (9)$$

Hierbei wurde die Definition der Abstiegsrichtung und zwei Mal die Cauchy–Schwarz–Ungleichung verwendet. Um diesen Term weiter abzuschätzen, soll ein weiterer betrachtet werden.

$$\|x^k - x^{k-1}\| = \|x^{k-1} + t_{k-1}d^{k-1} - x^{k-1}\| = \|t_{k-1}d^{k-1}\| = t_{k-1}\|d^{k-1}\| \quad (10)$$

Dies kann man nun zum Abschätzen von (9) verwenden, denn aufgrund der Annahme ist der Gradient von f Lipschitz-stetig auf der Niveaumenge, womit gilt

$$\|\nabla f(x^k) - \nabla f(x^{k-1})\| \leq L\|x^k - x^{k-1}\| = L t_{k-1}\|d^{k-1}\|.$$

Wenn man dies nun zusammen mit der Eigenschaft (iv), den Voraussetzungen und der Annahme, dass $\|\nabla f(x^{k-1})\| \geq \epsilon$, in (9) verwendet, folgt für alle $k \in K$, dass

$$\|d^k\| \leq \|\nabla f(x^k)\| + L \frac{\|\nabla f(x^k)\|}{\|\nabla f(x^{k-1})\|^2} t_{k-1}\|d^{k-1}\|^2 \leq c + \delta_2 \frac{Lc^3}{\epsilon^2}$$

Damit existiert eine konstante endliche obere Schranke für d^k . Es kann aufgrund der Eigenschaft (c) gefolgert werden, dass $\lim_{k \in K} t_k \|d^k\|^2 = 0$ ist. Mit der Eigenschaft (v) gilt zusätzlich, dass

$$\exists \theta > 0 : t_k \geq \theta \frac{|\nabla f(x^k)^T d^k|}{\|d^k\|^2} \iff t_k \|d^k\|^2 \geq \theta |\nabla f(x^k)^T d^k| \quad \forall k \in K.$$

Wenn man nun hinreichend große $k \in K$ betrachtet, folgt mit dem bereits Gezeigten, dass der linke Term gegen Null geht. Da ein Betrag immer nicht negativ und θ eine positive Konstante ist, muss folglich $|\nabla f(x^k)^T d^k|$ ebenfalls gegen Null gehen. Durch Anwenden dieses Wissens auf die Bedingung (b) der Schrittweitenregel im Fall von hinreichend großen $k \in K$ und der Definition von δ_1, δ_2 wird ersichtlich, dass $\lim_{k \in K} \|\nabla f(x^k)\| = 0$. Somit wurde die oben genannte Aussage bewiesen und es kann der Term $\|\nabla f(x^{k-1})\|$ weiter betrachtet werden.

$$\begin{aligned} \|\nabla f(x^{k-1})\| &= \|\nabla f(x^{k-1}) - \nabla f(x^k) + \nabla f(x^k)\| \leq \|\nabla f(x^k)\| + \|\nabla f(x^k) - \nabla f(x^{k-1})\| \\ &\leq L\|x^k - x^{k-1}\| + \|\nabla f(x^k)\| \quad \forall k \in K \end{aligned}$$

Hierbei wurde die Dreiecks-Ungleichung, die Homogenität der Norm, wodurch $\|\nabla f(x^{k-1}) - \nabla f(x^k)\| = \|\nabla f(x^k) - \nabla f(x^{k-1})\|$ gilt, und die Lipschitz-Stetigkeit des Gradienten auf der Niveaumenge verwendet. Wenn man auch hier hinreichend große $k \in K$ betrachtet, folgt mit (10), der Eigenschaft (iv) und der Konvergenz von $\|\nabla f(x^k)\|$ gegen Null: $\lim_{k \in K} \|\nabla f(x^{k-1})\| = 0$, was jedoch ein Widerspruch zur Annahme ist. Damit muss also der Grenzwert von $\|\nabla f(x^k)\|$ für $k \rightarrow \infty$ Null sein. \square

4.4 Vergleich der Verfahren

Wie bereits in der Motivation erwähnt, hat das Polak–Ribière-Verfahren einen großen numerischen Vorteil gegenüber Fletcher–Reeves. Dasselbe gilt auch für das modifizierte Polak–Ribière-Verfahren, welches jedoch trotzdem nicht das numerischen Verhalten des Polak–Ribière-Verfahrens erreichen kann. Andererseits kann man anhand der Konvergenzsätze sehen, dass sowohl das Fletcher–Reeves-, als auch das modifizierte Polak–Ribière-Verfahren in der Konvergenztheorie dem Polak–Ribière-Verfahren deutlich überlegen sind. Dies liegt primär daran, dass β_k^{PR} negativ werden kann und die Schrittweitenregel nicht an dieses Verhalten angepasst wird. Ein graphischer Vergleich des numerischen Verhaltens anhand der Rosenbrock-Funktion ist am Ende dieser Ausarbeitung zu finden.

Da man meistens aber Verfahren haben möchte, die numerisch und theoretisch gut sind, gibt es verschiedene weitere Abwandlungen der bisher vorgestellten Verfahren. [1, Seite 241-243]

Eine Variante ist eine Kombination aus Polak–Ribière und Fletcher–Reeves. Dabei wird je nach Verhältnis zwischen β_k^{PR} und β_k^{FR} ein passendes β_k gewählt. Dabei wird sowohl der theoretische Vorteil, als auch der numerische beibehalten.

Eine simple Methode ist, das β_k als β_k^{PR} zu wählen, falls β_k^{PR} positiv ist. Ansonsten setzt man den Parameter gleich Null.

Die letzte in dieser Ausarbeitung interessante Variante ist das kontrollierte Auslösen von Restarts alle n Schritte, sprich jedes n -te β_k wird gleich Null gesetzt.

5 Das Hestenes–Stiefel-Verfahren

Beim Hestenes–Stiefel-Verfahren fällt die Wahl des Parameters β_k auf folgenden Skalar

$$\beta_k = \beta_k^{HS} = \frac{(\nabla f(x^{k+1}) - \nabla f(x^k))^T \nabla f(x^{k+1})}{(\nabla f(x^{k+1}) - \nabla f(x^k))^T d^k}.$$

Das Interessante an diesem Verfahren ist die Ähnlichkeit des numerischen Verhaltens zu anderen Verfahren wie dem Limited Memory BFGS- oder dem Perry–Shanno Quasinewton-Verfahren. Da auch hier das β_k negativ werden kann, kann man bereits vermuten, dass die Numerik und Theorie der von Polak–Ribière sehr ähneln wird.

Der folgende Konvergenzsatz wurde auf Basis des allgemeinen Algorithmus mit der Wolfe–Powell-Schrittweitenregel hergeleitet.

Satz 5.1 (Konvergenz [2, Theorem 2.14.]). Sei $f \in \mathcal{C}^1(\mathbb{R}^n, \mathbb{R})$, der Gradient ∇f Lipschitz-stetig und die Niveaumenge $\mathcal{L}(x^0)$ beschränkt. So gilt:

$$\liminf_{k \rightarrow \infty} \|\nabla f(x^k)\| = 0$$

für alle durch den Algorithmus erzeugten Folgen $(x^k)_{k \in \mathbb{N}}$ mit $\lim_{k \rightarrow \infty} \|x^{k+1} - x^k\| = 0$.

Der Beweis erfolgt wieder analog zum Beweis vom Satz 4.1.

Bei diesem Verfahren kann die Konvergenztheorie noch ein wenig verbessert werden. Wählt man nämlich eine Funktion, die strikt konvex und Lipschitz-stetig auf der Niveaumenge $\mathcal{L}(x^0)$ ist, so wird aus dem Limes inferior ein Limes. [2]

6 Implementierung

Die gesamte Implementierung ist in einem git Repository ¹ zu finden.

Beim Ausführen der Datei `test_script.m` werden zuerst das modifizierte Polak–Ribière-Verfahren und das Standard Polak–Ribière-Verfahren mit der Wolfe–Powell-Schrittweitenregel, danach das Fletcher–Reeves- und Hestenes–Stiefel-Verfahren mit der Wolfe–Powell-Schrittweitenregel ausgeführt. Dabei kann der Benutzer zwischen der Rosenbrock- im Zweidimensionalen und der Box-Funktion im Dreidimensionalen wählen.

Wenn man sich für die Box-Funktion entscheidet, so wird in der Ausführung des modifizierten Polak–Ribière-Verfahrens eine Fehlermeldung mit dem folgenden Inhalt ausgegeben: “A minimum couldn’t be found in 2000 steps.”. Anhand dieser Funktion kann man sehr gut erkennen, dass dieses Verfahren in der Theorie ganz gut ist, jedoch bereits bei einigen dreidimensionalen Beispielen kein Minimum finden kann.

Entscheidet man sich hingegen für die Rosenbrock-Funktion, so konvergieren alle vier Verfahren für den Standardstartwert $\begin{pmatrix} -1, 2 \\ 1 \end{pmatrix}$. Dabei braucht das Polak–Ribière-Verfahren die wenigsten Schritte und damit auch deutlich weniger als das Fletcher–Reeves-Verfahren, was die meisten Schritte benötigt (vergleiche Tabelle 6.1).

Startwert	Fletcher–Reeves	Polak–Ribière	mod. Polak–Ribière	Hestenes–Stiefel
$(-1.2, 1)^T$	61	18	50	19
$(2, -2)^T$	82	15	60	16
$(5, 4)^T$	69	24	58	23

Tabelle 6.1: Anzahl der Schritte abhängig von der Wahl des Verfahrens

Neben dieser Information bekommt der Benutzer auch eine Abbildung der Höhenlinien (vergleiche Abbildung 6.2) mit dem Verlauf der berechneten Schritte zum Startwert

¹<https://github.com/buozyte/nonlinear-cg-algorithm>

$\begin{pmatrix} -1, 2 \\ 1 \end{pmatrix}$, wobei der Auswertungsbereich der Funktion speziell an den genannten Startwert angepasst wurde und unter Umständen abgeändert werden muss, falls dieser anders gewählt wird. Anhand von dieser Abbildung kann man gut sehen, dass bei der Fletcher–Reeves-Variante der Verlauf nahe an einer Höhenlinie ist, was eine schöne theoretische Eigenschaft ist. Bei allen anderen Verfahren sind große Sprünge zu finden, die zwar zu einer geringeren Anzahl an Schritten führen, aber auch einen negativen Effekt haben können, falls diese zum Beispiel zu groß sind.

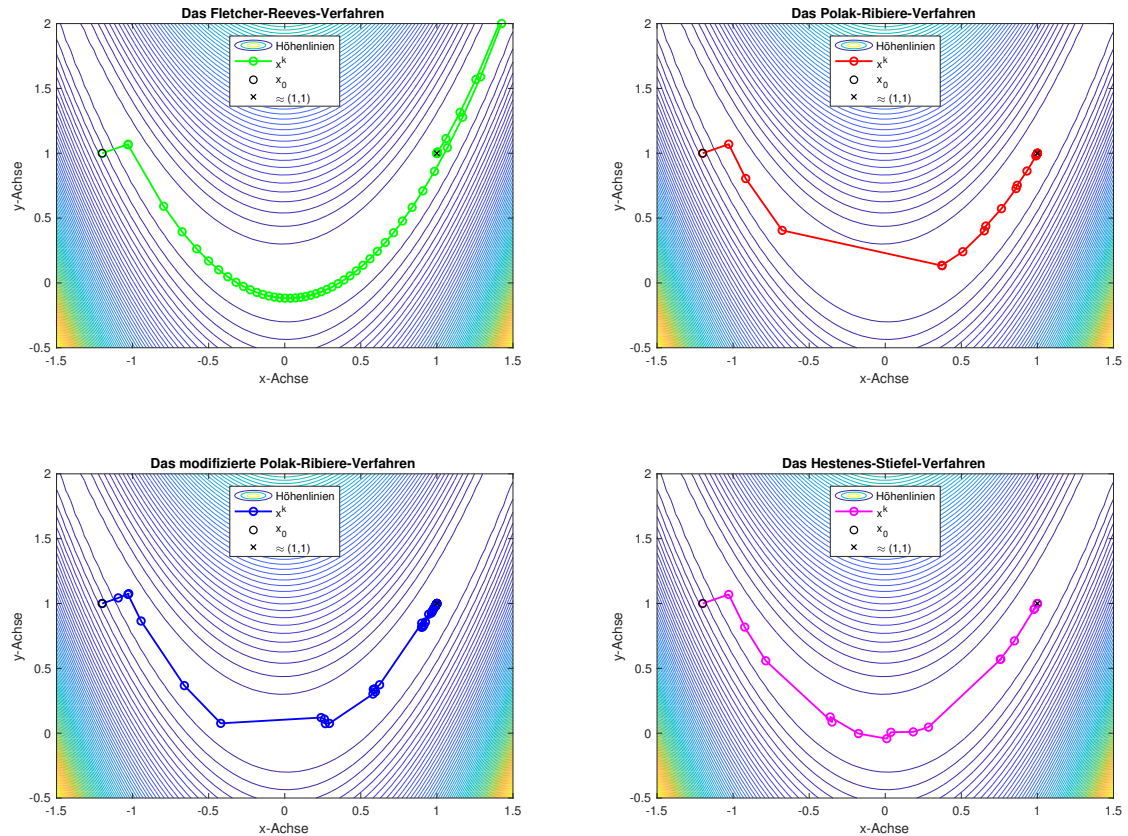


Abbildung 6.2: Plot der Schritte am Beispiel der Rosenbrock-Funktion

Zusammenfassend lässt sich behaupten, dass CG-Verfahren eine gute Möglichkeit sind, Minima von Funktionen zu berechnen. Jedoch weisen die hier behandelten Verfahren teilweise Schwächen auf, die man beim Verwenden immer beachten muss. Vor allem aber das Polak–Ribière- und Hestenes–Stiefel-Verfahren sind für viele Funktionen eine gute Wahl und benötigen im Vergleich zu einigen anderen Verfahren weniger Schritte.

Literatur

- [1] Carl Geiger and Christian Kanzow. *Numerische Verfahren zur Lösung unrestringierter Optimierungsaufgaben*. Springer Verlag, 1999.
- [2] Radoslaw Pytlak. *Conjugate Gradient Algorithms in Nonconvex Optimization*. Springer Verlag, 2009.