

# **Konvexe Optimierung**

24. Juli 2017



# Inhaltsverzeichnis

<b>1. Einführung in die Optimierung</b>	<b>5</b>
1.1. Grundlagen . . . . .	5
1.2. Beispiele . . . . .	7
1.2.1. Portfolio-Optimierung . . . . .	8
1.2.2. Optimale Steuerung - Raketenauto . . . . .	9
1.2.3. Lineare Regression . . . . .	9
<b>2. Konvexe Optimierungsprobleme</b>	<b>11</b>
2.1. Konvexe Mengen . . . . .	11
2.1.1. Beispiele . . . . .	12
2.1.2. Schnitt, Skalierung und Verschiebung . . . . .	13
2.2. Konvexe Funktionen . . . . .	15
2.2.1. Charakterisierungen konvexer Funktionen . . . . .	16
2.3. Globale Lösungen und Eindeutigkeit . . . . .	18
2.4. Existenz von Lösungen . . . . .	19
2.4.1. Karush-Kuhn-Tucker-Bedingungen (KKT-Bed.) . . . . .	22
<b>3. Optimierungsverfahren: Grundlagen</b>	<b>25</b>
3.1. Allgemeines Abstiegsverfahren mit Schrittweitensteuerung . . . . .	26
<b>4. Das Gradientenverfahren für quadratische Optimierungsprobleme</b>	<b>29</b>
4.1. Problemstellung und Abstiegsrichtung . . . . .	29
4.2. Allgemeines Abstiegsverfahren mit Schrittweitensteuerung . . . . .	29
4.3. Das Gradientenverfahren . . . . .	29
4.3.1. Funktionenklassen . . . . .	30
4.3.2. Konvergenz des Gradientenverfahrens . . . . .	31
4.4. Die Richtung des steilsten Abstiegs . . . . .	36
4.5. Das Schrittweitenverfahren von Armijo . . . . .	37
4.5.1. Konvergenz des Verfahrens . . . . .	38
4.6. Gradientenverfahren für quadratische Probleme . . . . .	38
4.7. Die exakte Schrittweite . . . . .	38
4.8. Gradientenverfahren für quadratische Probleme . . . . .	39
4.8.1. Konvergenz des Verfahrens . . . . .	40
4.8.2. Das Verfahren konjugierter Gradienten . . . . .	42
4.8.3. Q-orthogonale Vektoren . . . . .	42
4.8.4. CG-Verfahren . . . . .	42
4.8.5. Konvergenz des CG-Verfahren . . . . .	42

4.9. Optimierungsverfahren für allgemeine Probleme . . . . .	43
<b>5. Untere Schranken für das Gradientenverfahren</b>	<b>45</b>
5.1. Untere Schranken für $\mathcal{F}_L^{\infty,1}$ . . . . .	45
5.2. Untere Schranken für $\mathcal{S}_{\mu,L}^{\infty,1}$ . . . . .	49
5.3. Optimale Methoden für das Gradientenverfahren (Nesterov 1983) . . . . .	50
5.3.1. Nesterov's Accelerated Gradient Method (NAGM) . . . . .	50
<b>6. NEWTON-Verfahren</b>	<b>53</b>
6.1. Das NEWTON-Verfahren . . . . .	53
6.2. Das gedämpfte NEWTON-Verfahren . . . . .	54
6.2.1. Konvergenz des gedämpften NEWTON-Verfahrens . . . . .	54
6.2.2. Vergleich des gedämpften NEWTON-Verfahrens mit dem Gradientenverfahren . . . . .	56
6.3. Das Quasi-NEWTON-Verfahren . . . . .	57
6.4. Das BFGS-Verfahren . . . . .	57
<b>7. Nichtglatte Optimierung</b>	<b>61</b>
7.1. Einleitung . . . . .	61
7.2. Probleme . . . . .	61
7.3. Operationen mit konvexen Funktionen . . . . .	62
7.4. Das Subdifferential . . . . .	63
7.5. Das Subgradientenverfahren . . . . .	65
7.6. Laufzeitanalyse . . . . .	67
<b>A. Mathematische Grundlagen</b>	<b>69</b>

# 1. Einführung in die Optimierung

## 1.1. Grundlagen

**Definition 1.1.** Ein (mathematisches) **Optimierungsproblem** hat die folgende Form

$$\begin{array}{ll} \min_x & f(x) \\ \text{s.t.} & x \in \mathcal{F} \end{array} \quad (\text{P})$$

- $x = (x_1, \dots, x_n)^\top \in \mathbb{R}^n$  sind die **Variablen**
- $f: D \rightarrow \mathbb{R}, D \subset \mathbb{R}^n$ , ist die **Zielfunktion**
- $\mathcal{F}$  ist die **zulässige Menge**; ihre Elemente heißen **zulässige Punkte** ◇

### Die Nebenbedingungen

- Ist  $\mathcal{F} = D$ , dann spricht man von einem **unrestringierten Problem**.
- Wird  $\mathcal{F}$  durch Nebenbedingungen (Restriktionen) definiert, dann heißt (QU) **restringiertes Optimierungsproblem** oder **Optimierungsproblem mit Nebenbedingungen**;  $\mathcal{F}$  ist hierbei typischerweise durch Gleichungen und Ungleichungen definiert:

$$\mathcal{F} = \{x \in \mathbb{R}^n \mid h(x) = 0, g(x) \leq 0\}$$

### Einfache Beispiele

- Mit  $\mathcal{F} = D = \mathbb{R}$  sei  $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  durch  $f(x) = x^2$  definiert. Dann ist  $x^* = 0$  die eindeutig bestimmte Lösung von (QU).
- Mit  $\mathcal{F} = D = \mathbb{R}$  sei  $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  durch  $f(x) = \sin(x)$  definiert. Dann hat (QU) unendlich viele Lösungen  $x^* = 2k\pi - \frac{\pi}{2}, k \in \mathbb{Z}$ .
- Mit  $\mathcal{F} = D = \mathbb{R}$  sei  $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  durch  $f(x) = x$  definiert. In diesem Fall ist  $f$  auf  $\mathcal{F}$  nicht nach unten beschränkt und (QU) hat keine Lösung.
- Mit  $\mathcal{F} = D = \mathbb{R}$  sei  $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  durch

$$f(x) = (2x - 2)^2(3x + 3)^2 + 10x$$

definiert. Dann ist der Punkt  $x^* = -1$  globale Lösung von (QU). Der Punkt  $\tilde{x} = 1$  ist eine lokale Lösung.

## 1. Einführung in die Optimierung

e) Wir betrachten das Problem

$$\begin{aligned} \min_x \quad & f(x) = x^3 \\ \text{s.t.} \quad & x \geq 1 \end{aligned} \tag{P2}$$

Hier ist  $D = \mathbb{R}$  und  $\mathcal{F} = \{x \in \mathbb{R} \mid x \geq 1\}$ . Der Punkt  $x^* = 1$  ist Lösung. Ohne die Restriktion hätte das Problem (P2) keine Lösung.

**Definition 1.2.** (lokaler Minimalpunkt)

Ein Punkt  $x^* \in \mathcal{F}$  heißt **lokaler Minimalpunkt** von  $f$  auf  $\mathcal{F}$  oder **lokale Lösung** von (QU), falls es ein  $r > 0$  mit

$$f(x) \geq f(x^*) \quad \forall x \in \mathcal{F} \cap B(x^*, r)$$

gibt.

Ein Punkt  $x^* \in \mathcal{F}$  heißt **strikt lokaler Minimalpunkt** von  $f$  auf  $\mathcal{F}$  oder **strikte lokale Lösung** von (QU), falls es ein  $r > 0$  mit

$$f(x) > f(x^*) \quad \forall x \in \mathcal{F} \cap B(x^*, r), \quad x \neq x^*$$

gibt. ◇

**Bemerkung 1.3.** Eine offene Kugel mit Radius  $r$  um  $x$  ist definiert als,

$$B(x, r) = \{y \in \mathbb{R}^n \mid \|y - x\| < r\}.$$

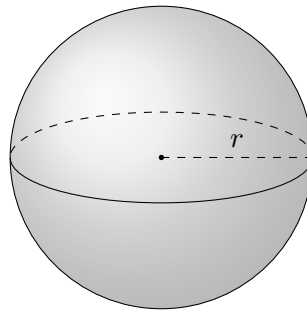


Abbildung 1.1.: Beispiel für  $B(x, r)$  für  $x \in \mathbb{R}^3$  ◇

**Definition 1.4.** (globaler Minimalpunkt)

Ein Punkt  $x^* \in \mathcal{F}$  heißt **globaler Minimalpunkt** von  $f$  auf  $\mathcal{F}$  oder **globale Lösung** von (QU), falls

$$f(x) \geq f(x^*) \quad \forall x \in \mathcal{F}$$

gibt.

Ein Punkt  $x^* \in \mathcal{F}$  heißt **strikt globaler Minimalpunkt** von  $f$  auf  $\mathcal{F}$  oder **strikte globale Lösung** von (QU), falls

$$f(x) > f(x^*) \quad \forall x \in \mathcal{F}, \quad x \neq x^*$$

gibt. ◇

**Einfache Beispiele**

f) Die Funktion  $f(x) = \sin(x)$  hat unendlich viele globale Minima.

g) Die Funktion

$$f(x_1, x_2) = \frac{1}{2}(x_1^2 + x_2^2) - \cos(x_1^2) - \cos(x_2^2)$$

hat ein striktes globales Minimum und noch weitere strikte lokale Minima. Die Funktion besteht aus einem quadratischen Term und noch zwei weiteren Termen, die man als „Rauschen“ interpretieren kann.

**Maximierung**

- Oft soll die Zielfunktion  $f$  maximiert werden, d. h., wir suchen ein  $x^* \in \mathcal{F}$  mit

$$f(x) \leq f(x^*) \quad \forall x \in \mathcal{F}$$

- Diese Aufgabe ist äquivalent dazu, ein  $x^* \in \mathcal{F}$  zu finden mit

$$-f(x) \geq -f(x^*) \quad \forall x \in \mathcal{F}$$

⇒ Äquivalentes Problem:

$$\begin{array}{ll} \min & g(x) = -f(x) \\ \text{s.t.} & x \in \mathcal{F} \end{array} \quad (\text{PMax})$$

- Es genügt daher, nur Minimierungsaufgaben zu betrachten.

**1.2. Beispiele****Portfolio-Optimierung**

- Variablen: Aufteilung des Portfolios
- Nebenbedingungen: Budget, Beschränkungen bei Investitionen
- Zielfunktion: maximale Rendite, minimales Risiko

**Optimale Steuerung eines Raketenautos**

- Variablen: Beschleunigung des Autos
- Nebenbedingungen: Dynamik, maximale Beschleunigung
- Zielfunktion: Zielort erreichen, Verbrauch an Treibstoff minimieren

## 1. Einführung in die Optimierung

### Data Fitting

- Variablen: Modell-Parameter
- Nebenbedingungen: geg. Informationen, Parameterbeschränkungen
- Zielfunktion: Abweichung/Fehler minimieren

#### 1.2.1. Portfolio-Optimierung

- Es werden  $n$  Wertpapiere gehandelt, wobei  $R_j$  die Rendite des  $j$ -ten Wertpapiers in der nächsten Zeitperiode darstellt (**Zufallsvariable**).
- Ein **Portfolio** besteht aus einer Zusammenstellung dieser Wertpapiere, dargestellt durch nichtnegative Zahlen  $x_j \in \mathbb{R}^+, j = 1, \dots, n$ .
- Rendite eines gegebenen Portfolios und die erwartete Rendite:

$$R = \sum_{j=1}^n x_j R_j \quad \mathbb{E}[R] = \sum_{j=1}^n x_j \mathbb{E}[R_j]$$

- Als Maß für das Risiko nutzen wir die durchschnittliche absolute Abweichung vom Erwartungswert

$$\mathbb{E}[R - \mathbb{E}[R]] = \mathbb{E} \left| \sum_{j=1}^n x_j (R_j - \mathbb{E}[R_j]) \right|$$

Es ergibt sich folgendes Optimierungsproblem:

$$\begin{aligned} \max_{x_1, \dots, x_n} \quad & \mu \sum_{j=1}^n x_j \mathbb{E}[R_j] - \mathbb{E} \left| \sum_{j=1}^n x_j (R_j - \mathbb{E}[R_j]) \right| \\ \text{s.t.} \quad & \sum_{j=1}^n x_j = 1 \\ & x_j \geq 0, \quad j = 1, 2, \dots, n \end{aligned}$$

- Die beiden gegensätzlichen Ziele (erwartete Rendite maximieren vs. Risiko minimieren) werden durch den Parameter  $\mu$  gewichtet
- Approximieren wir  $\mathbb{E}[R_j]$  durch den Mittelwert der letzten beobachteten Renditen, lässt sich dieses Problem in ein **lineares Optimierungsproblem** transformieren



### 1.2.2. Optimale Steuerung - Raketenauto

Wir betrachten ein Auto mit Raketenantrieb, dass nur geradeaus fährt. Durch den Schub der Rakete kann das Auto sowohl nach links als auch nach rechts beschleunigen. Vom Startpunkt  $x_0$  aus soll ein Ziel  $x_f$  möglichst genau in gegebener Zeit  $t_f$  erreicht werden.

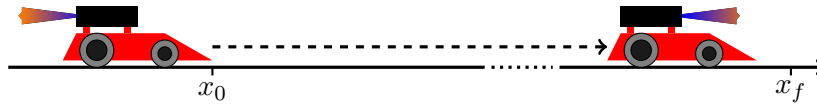


Abbildung 1.2.: Düsenauto

Starten wir am Punkt  $(x_1(0), x_2(0) = (a_1, a_2))$  und wollen den Punkt  $(0, 0)$  so gut wie möglich erreichen und zusätzlich den Energieverbrauch minimal halten, dann ergibt sich folgendes Optimierungsproblem:

$$\begin{aligned} \min_{x_1, x_2, u} \quad & x_1(t_f)^2 + x_2(t_f)^2 + \alpha \int_0^{t_f} u(t)^2 dt \\ \text{s.t.} \quad & \dot{x}_1(t) = x_2(t) \quad \dot{x}_2(t) = u(t), \\ & x_1(0) = a_1, \quad x_2(0) = a_2, \\ & b_l \leq u(t) \leq b_u \quad \text{für fast alle } t \in [0, t_f]. \end{aligned}$$

Der Regularisierungsparameter  $\alpha$  gewichtet hier zum einen die beiden Optimierungsziele, zum anderen glättet er die optimale Steuerung. Gelöst wird dieses Optimierungsproblem numerisch, indem man die Steuerung stückweise konstant approximiert und die gewöhnlichen Differentialgleichungen der Nebenbedingungen mit dem Euler-Verfahren diskretisiert. Man erhält hierbei ein **linear-quadratisches Optimierungsproblem**.

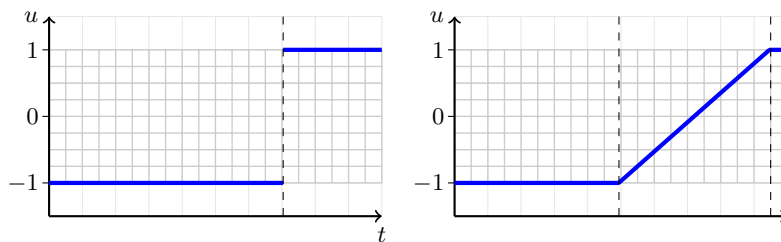


Abbildung 1.3.: Optimale Steuerung für  $\alpha = 0$  (links) und  $\alpha = 1$  (rechts)

### 1.2.3. Lineare Regression

Gegeben seien Messwerte  $(\xi_i, \eta_i)$ ,  $i = 1, \dots, m$ . Der funktionale Zusammenhang zwischen den  $\xi$ - und den  $\eta$ -Werten soll durch eine Gerade

$$\eta(\xi) = g(\xi; x_1, x_2) = x_1 \xi + x_2$$

## 1. Einführung in die Optimierung

beschrieben werden. Aufgrund von Messfehlern liegen nicht alle Messwerte auf der Geraden. Ziel ist es den Parameter  $x = (x_1, x_2)^T \in \mathbb{R}^2$  so zu bestimmen, dass die zugehörige Gerade „optimal“ zu den Messwerten passt.

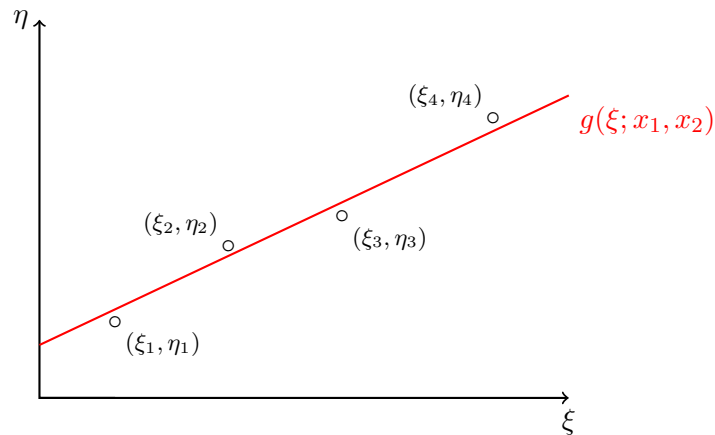


Abbildung 1.4.: Lineare Regression

Das übliche Kriterium für Optimalität ist die Minimierung der Summe der Fehlerquadrate in den Messpunkten. Dazu definieren wir die Zielfunktion  $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$  durch

$$f(x) = \sum_{i=1}^m [g(\xi_i, x) - \eta_i]^2 = \sum_{i=1}^m [x_1 \xi_i + x_2 - \eta_i]^2$$

Das resultierende Optimierungsproblem

$$\min_{x_1, x_2} \sum_{i=1}^m [x_1 \xi_i + x_2 - \eta_i]^2$$

ist **unrestringiert** und die Zielfunktion ist **quadratisch**.

## 2. Konvexe Optimierungsprobleme

- Historisch standen lineare Probleme im Fokus der Optimierung.
- Ursprüngliche Unterscheidung in lineare und nichtlineare Probleme.
- Aber: Bestimmte nichtlineare Probleme können effizient gelöst werden.
- Daher unterscheidet man zwischen **konvexen und nichtkonvexen Problemen**.

Das auf Seite 38 vorgestellte Problem (QU)

$$\begin{array}{ll} \min_x & f(x) \\ \text{s.t.} & x \in \mathcal{F} \end{array} \quad (\text{P})$$

ist genau dann ein **konvexes Optimierungsproblem**, wenn die zulässige Menge  $\mathcal{F}$  konvex ist und die Zielfunktion  $f$  konvex auf  $\mathcal{F}$  ist.

### Probleme mit Gleichungs- und Ungleichungsrestriktionen

Typischerweise ist die zulässige Menge durch Gleichungen und Ungleichungen definiert. Das Problem

$$\begin{array}{ll} \min_x & f(x) \\ \text{s.t.} & h_i(x) = 0, \quad i = 1, \dots, m, \\ & g_j(x) \leq 0, \quad j = 1, \dots, p. \end{array} \quad (\text{QP})$$

ist konvex, wenn  $f$  und  $g_j, j = 1, \dots, p$  konvexe Funktionen sind, und die Funktionen  $h_i, i = 1, \dots, m$  affin-linear sind, d.h.,

$$h_i(x) = a_i^\top x + b_i, \quad i = 1, \dots, m,$$

mit  $a_i \in \mathbb{R}^n$  und  $b_i \in \mathbb{R}$ .

### 2.1. Konvexe Mengen

**Definition 2.1.** (konvexe Menge)

Eine Menge  $C \subseteq \mathbb{R}^n$  heißt konvex, falls für beliebige  $x, y \in C$  gilt

$$\{(1-t)x + ty \mid 0 \leq t \leq 1\} \subseteq C$$

d.h., für die Verbindungsstrecke  $[x, y] = \{(1-t)x + ty \mid 0 \leq t \leq 1\}$  gilt  $[x, y] \subseteq C$ .  $\diamond$

## 2. Konvexe Optimierungsprobleme

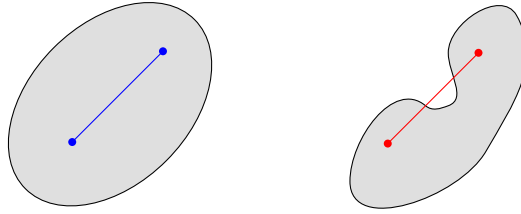


Abbildung 2.1.: links: konvexe Menge, rechts: keine konvexe Menge

### 2.1.1. Beispiele

- a) Die konvexen Teilmengen des  $\mathbb{R}$  sind, neben  $\mathbb{R}$  selbst, die Intervalle. Beispielsweise  $[a, b]$  mit  $a, b \in \mathbb{R}, a \leq b$ , oder  $]a, \infty[$  mit  $a \in \mathbb{R}$ .

*Beweis.*  $C = [a, b]$  mit  $a, b \in \mathbb{R}, a \leq b \Rightarrow C$  ist konvex.

Seien  $x, y$  beliebige Punkte aus  $C$  und  $t \in [0, 1]$ . Dann gilt einerseits die Abschätzung nach unten

$$(1-t)x + ty \stackrel{a \leq x, y}{\geq} (1-t)a + ta = a$$

und andererseits die Abschätzung nach oben durch

$$(1-t)x + ty \stackrel{x, y \leq b}{\leq} (1-t)b + tb = b$$

Das heißt zu zwei beliebigen Punkten  $x, y$  aus dem Intervall  $[a, b]$  liegt das davon erzeugte Teilintervall  $[x, y] \subseteq [a, b]$ .  $\square$

- b) Für  $x \in \mathbb{R}^n$  und  $r > 0$  bezeichnen wir mit

$$B(x, r) = \{y \in \mathbb{R}^n \mid \|y - x\| < r\}$$

die offene Kugel und mit

$$\bar{B}(x, r) = \{y \in \mathbb{R}^n \mid \|y - x\| \leq r\}$$

die abgeschlossene Kugel mit Radius  $r$  um den Punkt  $x$ . Beide Mengen sind konvex.<sup>1</sup>

- c) Hyperebenen

$$\mathcal{H}(a, b) = \{x \in \mathbb{R}^n \mid a^\top x = b\}$$

mit  $a \in \mathbb{R}^n, b \in \mathbb{R}$  und die durch sie definierten Halbräume  $\{x \in \mathbb{R}^n \mid a^\top x \leq b\}$  sind konvexe Mengen.

- d) Polyeder

$$P(A, b) = \{x \in \mathbb{R}^n \mid Ax \leq b\}$$

mit  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$  und  $b \in \mathbb{R}^m$  sind konvex.

---

<sup>1</sup>siehe Übungsblatt 1

*Beweis.* Seien  $x_1, x_2 \in P(A, b)$  und  $t \in [0, 1] \Rightarrow Ax_1 \leq b \wedge Ax_2 \leq b$ .  
Dann gilt

$$\begin{aligned} A[(1-t)x_1 + tx_2] &= A(1-t)x_1 + A(tx_2) \\ &= (1-t) \underbrace{Ax_1}_{\geq b} + t \underbrace{Ax_2}_{\leq b} \\ &\leq (1-t)b + tb = b \\ &\Leftrightarrow (1-t)x_1 + tx_2 \in P(A, b) \end{aligned}$$

□

*Bemerkung 2.2.* Ein typischer Fall einer zulässigen Menge beschrieben durch Gleichungen und Ungleichungen, ist gegeben durch

$$\bar{P}(A, b, G, r) = \{x \in \mathbb{R}^n \mid Ax \leq b, \quad Gx = r\}$$

Wie kann man zeigen, dass diese Menge konvex ist? Es gilt:

$$Gx = r \Leftrightarrow (Gx \leq r) \wedge \underbrace{(Gx \geq r)}_{-Gx \leq -r}$$

Damit ist

$$\Rightarrow \begin{bmatrix} A \\ G \\ -G \end{bmatrix} x \leq \begin{bmatrix} b \\ r \\ r \end{bmatrix}$$

ein Spezialfall von oben.

◇

### 2.1.2. Schnitt, Skalierung und Verschiebung

**Lemma 2.3.** Ist  $(C_j)_{j \in J}$  eine Familie konvexer Mengen mit einer beliebigen Indexmenge  $J$ , dann ist auch  $C = \bigcap_{j \in J} C_j$  konvex.

◇

*Beweis.* Folgt unmittelbar aus der Definition.

□

**Lemma 2.4.** Ist  $C \subseteq \mathbb{R}^n$  konvex, dann ist auch

$$aC + b = \{ax + b \mid x \in C\}$$

konvex für alle  $a \in \mathbb{R}$  und  $b \in \mathbb{R}^n$ .

◇

**Definition 2.5.** (Konvexkombination)

Sind  $x^{(1)}, \dots, x^{(k)} \in \mathbb{R}^n$  und  $\alpha_1, \dots, \alpha_k \in \mathbb{R}$ , dann heißt ein Vektor

$$\sum_{i=1}^k \alpha_i x^{(i)} \text{ mit } \sum_{i=1}^k \alpha_i = 1 \text{ und } \alpha_i \geq 0, i = 1, \dots, k,$$

Konvexkombination der Vektoren  $x^{(1)}, \dots, x^{(k)}$ .

◇

## 2. Konvexe Optimierungsprobleme

**Satz 2.6.** Eine Menge  $C \subset \mathbb{R}^n$  ist genau dann konvex, wenn sie alle Konvexkombinationen von Punkten in  $C$  enthält.  $\diamond$

*Beweis.* siehe Übungsblatt 1  $\square$

**Definition 2.7.** (Konvexe Hülle)

Für  $A \subset \mathbb{R}^n$  ist die konvexe Hülle von  $A$ , bezeichnet mit  $\text{co } A$ , die kleinste konvexe Menge, die  $A$  umfasst, d.h.

$$\text{co } A = \bigcap \{C \subseteq \mathbb{R}^n \mid C \text{ konvex}, C \supseteq A\}$$

$\diamond$

**Lemma 2.8.** Für  $A \subset \mathbb{R}^n$  ist

$$\text{co } A = \{x \in \mathbb{R}^n \mid x \text{ ist Konvexkombination von Punkten in } A\}.$$

$\diamond$

*Beweis.*

Sei  $B = \{x \in \mathbb{R}^n \mid x \text{ ist Konvexkombination von Punkten in } A\} \xRightarrow[\text{z.z.}]{} \text{co } A = B$

$B$  konvex und  $A \subseteq B \Rightarrow \text{co } A \subseteq \text{co } B = B$ .

Umgekehrt gilt  $\forall C$  konvex mit  $C \supseteq A \Rightarrow C \supseteq B \xRightarrow[\text{C=co } A]{} \text{co } A \supseteq B$   $\square$

**Definition 2.9.** (Kegel)

Eine nichtleere Menge  $K \subseteq \mathbb{R}^n$  heißt **Kegel**, wenn mit  $x \in K$  auch  $tx \in K$  für alle  $t > 0$  gilt, d.h., wenn mit  $x \in K$  auch der offene Halbstrahl  $\{tx \mid t > 0\} \subseteq K$  ist.  $\diamond$

**Lemma 2.10.** Ein Kegel  $K \subseteq \mathbb{R}^n$  ist genau dann konvex, wenn  $K + K \subseteq K$  ist.  $\diamond$

*Beweis.* s. Übungsblatt 1  $\square$

### Beispiele für Kegel

a) Der Kegel  $\{x \in \mathbb{R}^n \mid x \geq 0_n\}$  ist konvex. Es gilt  $K + K = K$ .

b) Die Menge

$$\{x \in \mathbb{R}^n \mid x \geq 0_n\} \cup \{x \in \mathbb{R}^n \mid x \leq 0_n\}$$

ist ein Kegel, aber nicht konvex, denn es gilt  $K + K = \mathbb{R}^n \not\subseteq K$ .

c) Der Kegel der positiv semidefiniten Matrizen

$$\mathcal{S}_+^n = \{X \in \mathcal{S} \mid X \succcurlyeq 0\}$$

ist konvex, wobei  $\mathcal{S}^n$  die Menge der symmetrischen  $n \times n$ -Matrizen ist.

**Wichtige Kegel**

**Definition 2.11.** Ist  $S \subseteq \mathbb{R}^n$  und  $x \in S$ , dann heißt die Menge

$$K(S, x) = \{t(s - x) \mid s \in S, t > 0\}$$

der von  $S - x$  **erzeugte Kegel** oder **konische Hülle** von  $S - x$ .  $\diamond$

Die Menge  $K(S, x)$  besteht aus Halbstrahlen, die durch die Vektoren  $S - x$  erzeugt werden, s.d. die Menge nach Definition ein Kegel ist. Wegen  $x \in S$  ist immer auch  $0_n \in K(S, x)$  (für  $s = x$ ) und es gilt  $K(S, x) = K(s - x, 0_n)$ .

**Lemma 2.12.** Sei  $C \subseteq \mathbb{R}^n$  konvex und  $x \in C$ . Dann ist  $K(C, x)$  konvex.  $\diamond$

*Beweis.* cf. undergraduate convexity  $\square$

**Definition 2.13.** Ist  $C \subseteq \mathbb{R}^n$  konvex und  $x \in C$ . Dann heißt  $s \in \mathbb{R}^n$  **Normalenrichtung** von  $C$  in  $x$ , wenn

$$\langle s, y - x \rangle \leq 0 \quad \forall y \in C$$

gilt. Die Menge

$$N(C, x) = \{s \in \mathbb{R}^n \mid s \text{ ist Normalenrichtung von } C \text{ in } x\}$$

heißt **Normalenkegel** von  $C$  in  $x$ .  $\diamond$

*Bemerkung 2.14.* Der Normalenkegel ist konvex und abgeschlossen.  $\diamond$

Ein Beispiel für einen Normalenkegel lässt sich wie folgt konstruieren. Seien  $C$  ein Unterraum und  $x \in C$  beliebig. Dann ist die konische Hülle  $K(C, x) = C$  und der Normalenkegel  $N(C, x) = C^\perp$ , also das orthogonale Komplement von  $C$ . Der Beweis der Aussage ist eine gute Übung.

**2.2. Konvexe Funktionen**

**Definition 2.15.** (konvexe Funktion)

Ist  $D \subseteq \mathbb{R}^n$  und ist  $\emptyset \neq C \subseteq D$  konvex, dann heißt die Funktion  $f: D \rightarrow \mathbb{R}$  konvex auf  $C$ , wenn

$$f((1 - t)x + ty) \leq (1 - t)f(x) + tf(y)$$

für alle  $x, y \in C$  und alle  $t \in [0, 1]$  gilt.  $\diamond$

**Definition 2.16** (Epigraph). Der *Epigraph* einer Funktion  $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  ist definiert als

$$\{(x, r)^T \mid x \in D, r \geq f(x)\} \subseteq \mathbb{R}^{n+1} =: \text{epi } f$$

*Bemerkung 2.17* (Epigraphcharakterisierung von Funktionen). Die obige Definition erlaubt uns nun eine konvexe Funktion als eine Funktion aufzufassen, deren Epigraph eine konvexe Menge ist. In der Tat lassen sich die meisten Klassen von Funktionen, die in der Optimierung eine Rolle spielen, durch äquivalente Charakterisierungen des Epigraphen in Mengensprache fassen.  $\diamond$

## 2. Konvexe Optimierungsprobleme

**Definition 2.18** (strikte und gleichmäßige Konvexität). Gilt für eine Funktion  $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$

$$\forall t \in (0, 1) \forall x, y \in D : f((1-t)x + ty) < (1-t)f(x) + tf(y)$$

so sprechen wir von einer *stikt*, *streng* oder *stark* konvexen Funktion. Gilt außerdem auch

$$\forall t \in (0, 1) \forall x, y \in D : f((1-t)x + ty) + \frac{\lambda}{2} \|x\|_2^2 \leq (1-t)f(x) + tf(y)$$

so sprechen wir auch von einer *gleichmäßig* konvexen Funktion zum Parameter  $\lambda$ .  $\diamond$

*Bemerkung 2.19.* Wenn die beiden Konzepte verbal formulieren wollen, so bedeutet *strikt* konvex, dass eine Funktion superlinear gekrümmt ist. *Gleichmäßige* Konvexität bedeutet dann, dass die Krümmung von  $f$  mindestens quadratisch ist. In der Tat gilt

$$\text{glm. Konvexität} \Rightarrow \text{strikte Konvexität} \Rightarrow \text{Konvexität}$$

während keine der Umkehrungen gilt.  $\diamond$

### Beispiele konvexer Funktionen

- a)  $f(x) = x$  ist konvex auf  $\mathbb{R}$ , ebenso auch  $-f(x)$  und  $f$  damit ebenfalls konkav.
- b)  $f(x) = x^2$  ist sogar strikt konvex auf  $\mathbb{R}$
- c)  $f(x) = x^3$  ist nicht konvex auf  $\mathbb{R}$  aber gleichmäßig konvex auf  $C = [0, \infty)$
- d)  $f(x) = \exp(\alpha x)$  ist für alle  $\alpha$  konvex auf  $\mathbb{R}$
- e)  $f(x) = -\log(x)$  ist strikt konvex auf  $(0, \infty)$
- f) Eine beliebige Norm  $\|\cdot\|$  auf  $\mathbb{R}^n$  ist konvex, aber nicht strikt konvex (Übungsblatt 1)
- g) Die max-Funktion  $f(x) = \max\{x_1, \dots, x_n\}$  ist konvex auf  $\mathbb{R}^n$

### 2.2.1. Charakterisierungen konvexer Funktionen

Wir betrachten nun ausreichend schöne Funktionen, d. h., Funktionen für die die Voraussetzungen der folgenden Theoreme gegeben sind. Dazu zählen insbesondere die differenzierbaren und die stetig differenzierbaren Funktionen.

**Satz 2.20** (Charakterisierung erster Ordnung). Seien  $D \subseteq \mathbb{R}^n$  offen,  $\emptyset \neq \mathcal{F} \subseteq D$  konvex und  $f: D \rightarrow \mathbb{R}$  differenzierbar auf  $D$ . Dann ist  $f$  auf  $\mathcal{F}$  konvex genau dann, wenn  $\forall x, y \in \mathcal{F}$  gilt:

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

$\diamond$



**Satz 2.21** (Charakterisierung erster Ordnung). Seien  $D \subseteq \mathbb{R}^n$  offen,  $\emptyset \neq \mathcal{F} \subseteq D$  konvex und  $f : D \rightarrow \mathbb{R}$  differenzierbar auf  $D$ . Dann ist  $f$  auf  $\mathcal{F}$  strikt konvex genau dann, wenn  $\forall x, y \in \mathcal{F}$  gilt:

$$f(y) > f(x) + \nabla f(x)^\top (y - x) \quad (2.2)$$

Gilt außerdem für  $\mu \in (0, \infty)$

$$f(y) - f(x) > \nabla f(x)^\top (y - x) + \mu \|y - x\|^2 \quad (2.3)$$

so heißt  $f$  gleichmäßig konvex.  $\diamond$

**Satz 2.22** (Charakterisierung zweiter Ordnung). Seien  $D \subseteq \mathbb{R}^n$  offen,  $\emptyset \neq \mathcal{F} \subseteq D$  konvex und  $f : D \rightarrow \mathbb{R}$  zweimal stetig differenzierbar auf  $D$ . Wenn  $\forall x, y \in \mathcal{F}$  gilt:

$$\nabla^2 f(x) \succcurlyeq 0 \quad (2.4)$$

so ist  $f$  konvex auf  $\mathcal{F}$  und falls  $\mathcal{F}$  offen ist, so gilt auch die Umkehrung.  $\diamond$

**Satz 2.23** (Charakterisierung zweiter Ordnung). Seien  $D \subseteq \mathbb{R}^n$  offen,  $\emptyset \neq \mathcal{F} \subseteq D$  konvex und  $f : D \rightarrow \mathbb{R}$  zweimal stetig differenzierbar auf  $D$ . Wenn  $\forall x \in \mathcal{F}$  gilt:

$$\nabla^2 f(x) \succ 0 \quad (2.5)$$

also  $\forall x \in \mathcal{F}$  und  $0 \neq d \in \mathbb{R}^n$

$$d^\top \nabla^2 f(x) d > 0 \quad (2.6)$$

so ist  $f$  strikt konvex auf  $\mathcal{F}$ .  $\diamond$

**Bemerkung 2.24.** Die Umkehrung von 2.23 gilt im Allgemeinen nicht.  $\diamond$

**Satz 2.25** (Charakterisierung zweiter Ordnung). Seien  $D \subseteq \mathbb{R}^n$  offen,  $\emptyset \neq \mathcal{F} \subseteq D$  konvex und  $f : D \rightarrow \mathbb{R}$  zweimal stetig differenzierbar auf  $D$ . Ist  $\nabla^2 f(x)$  gleichmäßig positiv definit, also wenn  $\forall x \in \mathcal{F}$ ,  $d \in \mathbb{R}^n$  und  $\beta \in (0, \infty)$

$$d^\top \nabla^2 f(x) d > \beta \|d\|^2 \quad (2.7)$$

gilt, so ist  $f$  gleichmäßig konvex auf  $\mathcal{F}$ . Ist  $\mathcal{F}$  offen, so gilt auch die Umkehrung.  $\diamond$

### Rechenregeln für konvexer Funktionen

- a) Seien  $f_i, i \in [n]$  konvex und  $\alpha_i \in \mathbb{R}$ . Dann ist auch  $\sum_{i=1}^n \alpha_i f_i$  konvex.
- b) Seien  $f$  konvex,  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$  und  $b \in \mathbb{R}^m$ . Dann ist auch  $g(x) := f(Ax + b)$  konvex.
- c) Seien  $J$  eine beliebige auch unendliche Indexmenge und  $f_j$  konvex für alle  $j \in J$ . Dann ist auch  $\max_{j \in J} f_j(x)$  konvex.
- d) Seien  $g(x, y)$  konvex in  $x$  und  $y$  und die Menge  $C$  konvex. Dann ist auch  $f(x) := \min_{y \in C} g(x, y)$  konvex.

## 2. Konvexe Optimierungsprobleme

### 2.3. Globale Lösungen und Eindeutigkeit

**Satz 2.26** (Lokale Lösungen sind global). *Für eine konvexe Optimierungsaufgabe ist jede lokale Lösung eine globale Lösung, und die Lösungsmenge von (QU)*

$$\mathcal{S} = \{x \in \mathcal{F} \mid f(x) \leq f(y) \forall y \in \mathcal{F}\}$$

ist konvex. ◇

*Beweis.* Sei  $x^*$  eine lokale Lösung von (QU), d. h.  $\exists r > 0$ :

$$f(x) > f(x^*) \text{ für alle } x \in B(x^*, r) \cap \mathcal{F}. \quad (*)$$

Sei  $y \in \mathcal{F}$  beliebig,  $y \neq x^*$ . Wir müssen zeigen, dass  $f(y) \geq f(x^*)$  ist.

Da  $\mathcal{F}$  konvex ist, gilt

$$x^* + t(y - x^*) = (1 - t)x^* + ty \in \mathcal{F} \text{ für alle } t \in [0, 1]. \quad (2.8)$$

Nach der Definition von  $B(x^*, r)$  ist

$$x^* + t(y - x^*) = (1 - t)x^* + ty \in B(x^*, r) \text{ für alle } t \in \left[0, \frac{r}{\|y - x^*\|}\right].$$

Wegen (\*) gilt

$$f(x^*) \leq f(x^* + t(y - x^*)) = f((1 - t)x^* + ty) \stackrel{f \text{ konvex}}{\leq} (1 - t)f(x^*) + tf(y) \Rightarrow f(x^*) \leq f(y).$$

Da  $y \in \mathcal{F}$ ,  $y \neq x^*$ , beliebig war, ist  $x^*$  globale Lösung von (QU).

Seien  $x, z \in \mathcal{S}$ ,  $t \in [0, 1]$  beliebig. Es gilt  $f(x) = f(z)$ .

$$f((1 - t)x + tz) \stackrel{f \text{ konvex}}{\leq} (1 - t)f(x) + tf(z) \stackrel{f(x)=f(z)}{=} f(x)$$

Also ist auch  $(1 - t)x + tz \in \mathcal{S}$ , d. h.  $\mathcal{S}$  ist konvex. □

**Satz 2.27** (Eindeutigkeit von Lösungen). *Die zulässige Menge  $\mathcal{F}$  des Problems (QU) sei nichtleer und konvex, und die Zielfunktion  $f$  sei strikt konvex auf  $\mathcal{F}$ . Hat (QU) eine Lösung  $x^*$ , dann ist  $x^*$  eindeutig bestimmt und strikte globale Lösung von (QU).* ◇

*Beweis.* Ist  $y \in \mathcal{F}$  ebenfalls Lösung von (QU), dann sind  $x^*$  und  $y$  globale Lösungen, also  $f(x^*) = f(y)$ . Aus  $\mathcal{F}$  konvex folgt  $z := \frac{1}{2}(x^* + y) \in \mathcal{F}$ .

Wäre  $y \neq x^*$ :

$$f(z) = f\left(\frac{1}{2}(x^* + y)\right) \stackrel{f \text{ strikt konvex}}{<} \frac{1}{2}f(x^*) + \frac{1}{2}f(y) \stackrel{f(x^*)=f(y)}{=} f(x^*)$$

Das steht aber im Widerspruch zur Optimalität von  $x^*$  dar. Also ist  $y = x^*$ , und für alle  $y \neq x^*$  gilt  $f(y) < f(x^*)$ . □

**Bemerkung 2.28.** Über die **Existenz einer Lösung** haben wir hier noch keine Aussage getroffen! Es kann also sein, dass es keine Lösung gibt. ◇

## 2.4. Existenz von Lösungen

Nach dem **Satz von Weierstraß** nimmt eine stetige Funktion  $f : D \rightarrow \mathbb{R}, D \subseteq \mathbb{R}^n$  auf einer kompakten Menge  $K \subseteq D$  ihr Supremum und ihr Infimum an. Beim Problem

$$\begin{array}{ll} \min_x & f(x) \\ \text{s.t.} & x \in \mathcal{F} \end{array} \quad (\text{P})$$

ist die zulässige Menge  $\mathcal{F}$  im Allgemeinen aber nicht kompakt.

Betrachtet man Niveaumengen, erhält man aus dem Satz von Weierstraß jedoch sofort ein Existenzkriterium für eine Lösung von (QU).

**Definition 2.29.** (Niveaumenge) Ist  $f : D \rightarrow \mathbb{R}, D \subseteq \mathbb{R}^n$ , eine Funktion und  $\alpha \in \mathbb{R}$ , dann heißen die Mengen

$$N(f, \alpha) = \{x \in D \mid f(x) \leq \alpha\}$$

**Niveaumengen** zum Niveau  $\alpha$  der Funktion  $f$ .  $\diamond$

**Satz 2.30.** Ist beim Problem (QU) die Zielfunktion  $f$  stetig auf  $\mathcal{F}$ , und ist für ein  $w \in \mathcal{F}$  die Menge

$$N(f, f(w)) \cap \mathcal{F} = \{x \in \mathcal{F} \mid f(x) \leq f(w)\}$$

kompakt, dann gibt es (mindestens) eine globale Lösung von (QU).  $\diamond$

*Beweis.* Sei  $N := N(f, f(w)) \cap \mathcal{F}$ . Nach dem Satz von Weierstraß gibt es ein  $x^* \in N$  mit  $f(x^*) \leq f(x)$  für alle  $x \in N$ . Für  $x \in \mathcal{F} \setminus N$  ist  $f(x) > f(w) \geq f(x^*)$ . Damit gilt

$$f(x^*) \leq f(x) \forall x \in \mathcal{F},$$

d. h.,  $x^*$  ist globale Lösung von (QU).  $\square$

**Lemma 2.31.** Die zulässige Menge des Problems (QU) sei nichtleer und abgeschlossen, die Zielfunktion  $f$  sei stetig auf  $\mathcal{F}$ , und es gelte

$$\lim_{\|x\| \rightarrow \infty, x \in \mathcal{F}} f(x) = +\infty.$$

Dann ist für beliebiges  $w \in \mathcal{F}$  die Menge  $N(f, f(w)) \cap \mathcal{F}$  kompakt, d. h., es gibt (mindestens) einen globalen Minimalpunkt von  $f$  auf  $\mathcal{F}$ .  $\diamond$

**Beispiel 2.32.**

$$\begin{array}{ll} \min_{x \in \mathbb{R}^n} & f(x) = \frac{1}{2}x^t Q x + q^t x + c \\ & \mathcal{F} = \mathbb{R}^n \text{ konvex} \end{array}$$

$Q$  positiv semidefinit  $\xrightarrow{\text{Nr. 8}} f$  konvex  $\Rightarrow$  Konvexes Optimierungsproblem, jede Lösung ist global und die Lösungsmenge konvex

## 2. Konvexe Optimierungsprobleme

$Q$  positiv definit  $\stackrel{\text{Nr. 8}}{\Rightarrow} f$  strikt konvex  $\Rightarrow$  Konvexes Optimierungsproblem  
Lösung ist strikt global und eindeutig bestimmt, wenn sie existiert

Existenz einer Lösung:  $\frac{1}{2} \underbrace{x^t Q x}_{\geq \alpha \|x\|^2} + \underbrace{q^t x}_{\geq -\|q\| \|x\|} + c \geq \alpha \|x\|^2 - \|q\| \|x\| - |c| \xrightarrow{\|x\| \rightarrow \infty} +\infty$

$\Rightarrow$  für beliebige  $w \in \mathbb{R}^n$  ist  $\mathcal{N}(f, f(w))$  kompakt

$\Rightarrow$  es existiert mindestens eine globale Lösung

$\Rightarrow$  Das Problem hat eine eindeutig bestimmte globale Lösung

◇

## Optimalitätskriterien

- notwendig: Wenn  $x^*$  Lösung ist, dann muss das Kriterium erfüllt sein.
- hinreichend: Ist das Kriterium erfüllt, so muss  $x^*$  Lösung sein.

In der konvexen Optimierung sind notwendige Bedingungen auch hinreichend.

**Satz 2.33** (Optimalitätsbedingung erster Ordnung). *Ist  $f$  differenzierbar auf  $D$ , dann ist  $x^* \in \mathcal{F}$  globale Lösung der konvexen Optimierungsaufgabe (QU) genau dann, wenn*

$$\nabla f(x^*)^T (x - x^*) \geq 0 \forall x \in \mathcal{F}$$

oder äquivalent

$$-\nabla f(x^*) \in N(\mathcal{F}, x^*)$$

gilt.

◇

*Beweis.*  $\Rightarrow$  Sei  $x^*$  globales Minimum von  $f$  auf  $\mathcal{F}$ . Sei  $x \in \mathcal{F}$  beliebig.

$$\mathcal{F} \text{ konvex} \Rightarrow x^* + t(x - x^*) \in \mathcal{F} \forall t \in [0, 1]$$

$$\Rightarrow f(x^* + t(x - x^*)) \geq f(x^*) \forall t \in [0, 1]$$

$$f \text{ ist diff'bar} \Rightarrow \nabla f(x^*)^T (x - x^*) = \lim_{t \searrow 0} \frac{f(x^* + t(x - x^*)) - f(x^*)}{t} \geq 0.$$

$$\Leftarrow \text{Es gelte } \nabla f(x^*)^T (x - x^*) \geq 0.$$

$$\text{Es ist } f(x) \geq f(x^*) + \underbrace{\nabla f(x^*)^T (x - x^*)}_{\geq 0} \forall x \in \mathcal{F}$$

$$\Rightarrow f(x) \geq f(x^*) \forall x \in \mathcal{F}$$

$$\mathcal{N}(\mathcal{F}, x^*) = \{s \in \mathbb{R}^n \mid s^T (y - x^*) \leq 0 \forall y \in \mathcal{F}\}$$

$$-\nabla f(x^*) \in \mathcal{N}(\mathcal{F}, x^*) \Leftrightarrow -\nabla f(x^*)^T (y - x^*) \leq 0 \forall y \in \mathcal{F}$$

Der negative Gradient ist im Minimum  $x^*$  eine Normalenrichtung von  $\mathcal{F}$  in  $x^*$ .

□

Zur Erinnerung:  $D \in \mathbb{R}^n$  sei eine offene Menge, und die Funktion  $f : D \rightarrow \mathbb{R}$  sei konvex. Für das unrestringierte Problem

$$\min_x f(x) \quad (\text{PU})$$

ist  $x^* \in D$  genau dann globale Lösung von (PU), wenn die Bedingung

$$\nabla f(x^*) = 0_n$$

erfüllt ist.

**Beispiel 2.34.**

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) = \frac{1}{2} x^t Q x + q^t x + c, Q \text{ symmetrisch, positiv semidefinit} \quad (2.9)$$

$$\nabla f(x) = Qx + q \quad (2.10)$$

$$x^* \text{ ist Lösung} \Leftrightarrow \nabla f(x^*) = Qx^* + q \Leftrightarrow Qx^* = -q$$

Annahme  $Q$  positiv definit  $\Rightarrow Q$  ist invertierbar  $\Rightarrow x^* = -Q^{-1}q$  ist Lösung des Problems  $\diamond$

Mit einer Matrix  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$  und einem Vektor  $b \in \mathbb{R}^m$  betrachten wir das Problem

$$\begin{aligned} \min_x f(x) \\ \text{s.t. } Ax = b. \end{aligned} \quad (\text{PLG})$$

Dann ist  $x^* \in \mathcal{F} = \{x \mid Ax = b\}$  genau dann globale Lösung von (PLG), wenn mit einem **Lagrange-Multiplikator**  $\lambda^* \in \mathbb{R}^m$

$$\nabla f(x^*) + A^T \lambda^* = 0_n$$

erfüllt ist. Hat  $A$  vollen Rang, dann ist  $\lambda^*$  eindeutig bestimmt.

**Lemma 2.35.** Die Lagrange-Multiplikatoren kommen durch Satz 2.33 zustande. Dazu betrachten wir folgende Gleichung  $K(\mathcal{F}, x^*) = \text{kern}(A) = \{d \mid Ad = 0\}$ ,  $\mathcal{F} = \{x \mid Ax = b\}$ .  $\diamond$

*Beweis.*  $\subseteq$ : Sei  $z \in K(\mathcal{F}, x^*)$ , dann gilt  $z = \alpha(y - x^*)$ ,  $\alpha \geq 0$ ,  $y \in \mathcal{F} \Rightarrow Ay = A[\alpha(y - x^*)] = \alpha A(y - x^*) = \alpha[Ay - Ax^*] = \alpha[b - b] = 0$

$\supseteq$ : Sei  $Az = 0$ . Mit  $y := z + x^*$  gilt  $Ay = Az + Ax^* = b \Rightarrow y \in \mathcal{F}$ .  $z = y - x^* \in K(\mathcal{F}, x^*)$   $\square$

Der Kern ist Unterraum, dann gilt:  $N(\mathcal{F}, x^*) = (\text{kern } A)^\perp = \text{im } A^T = \{A^t \lambda \mid \lambda \in \mathbb{R}^m\}$ . Die Optimalitätsbedingung ist dann:

$$\begin{aligned} -\nabla f(x^*) \in N(\mathcal{F}, x^*) &= \text{im } A^T = \{A^t \lambda \mid \lambda \in \mathbb{R}^m\} \\ \Leftrightarrow 0 &= A^T \lambda^* + \nabla f(x^*) \text{ mit } \lambda^* \in \mathbb{R}^m \end{aligned}$$

## 2. Konvexe Optimierungsprobleme

### Beispiel 2.36.

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \quad f(x) = \frac{1}{2}x^T Qx + q^T x + c, \quad Q \text{ symmetrisch, positiv semidefinit} \quad (2.11)$$

$$\text{s.t.} \quad Ax = b, \quad A \in \mathbb{R}^{m \times n} \quad (2.12)$$

$x^*$  ist Lösung  $\Leftrightarrow \exists \lambda^* \in \mathbb{R}^m : \nabla f(x^* A^T \lambda^*) = 0, Qx^* + q + A^T \lambda^* = 0$ . Lösungssystem:

$$\begin{aligned} Qx^* + A^T \lambda^* &= -q \\ Ax^* &= b \end{aligned}$$

◇

Definieren wir die **Lagrange-Funktion**  $L : D \times \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}$  durch

$$L(x, \lambda) = f(x) + \lambda^T (Ax - b),$$

dann sind

$$\nabla_x L(x, \lambda) = \lambda^T A \quad \text{und} \quad \nabla_\lambda L(x, \lambda) = Ax - b.$$

Also ist  $x^* \in D$  genau dann Lösung des Problems (PLG), wenn ein  $\lambda^* \in \mathbb{R}^m$  existiert, sodass

$$\nabla L(x^*, \lambda^*) = \begin{pmatrix} \nabla_x L(x^*, \lambda^*) \\ \nabla_\lambda L(x^*, \lambda^*) \end{pmatrix} = 0_{n+m}$$

gilt.

Mit Matrizen  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ,  $G \in \mathbb{R}^{p \times n}$  und Vektoren  $b \in \mathbb{R}^m$ ,  $r \in \mathbb{R}^p$  betrachten wir das Problem

$$\begin{aligned} \min_x \quad & f(x) \\ \text{s.t.} \quad & Ax = b \\ & Gx \leq r. \end{aligned} \quad (\text{PL})$$

Eine Restriktion heißt in einem Punkt  $x^* \in \mathcal{F} = \{x \mid Ax = b, Gx \leq r\}$  **aktiv**, wenn sie mit Gleichheit erfüllt ist. Wir bezeichnen mit

$$J(x) = \{j \mid 1 \leq j \leq p, \langle g^j, x \rangle = r_j\}$$

die Indexmenge der in  $x$  aktiven **Ungleichungsrestriktionen**.

#### 2.4.1. Karush-Kuhn-Tucker-Bedingungen (KKT-Bed.)

Ein Punkt  $x^* \in \mathcal{F}$  ist genau dann Lösung des Problems (PL), wenn es **Lagrange-Multiplikatoren**  $\lambda^* \in \mathbb{R}^m$  und  $\mu^* \in \mathbb{R}^p$  gibt, für welche die **Multiplikatorenregel**

$$\nabla f(x^*) + A^T \lambda^* + G^T \mu^* = 0,$$

die **Vorzeichenbedingung**

$$\mu^* \geq 0_p$$

und die **Komplementaritätsbedingung**

$$(\mu^*)^T (Gx^* - r) = 0_p$$

erfüllt sind. Sind die Vektoren  $a^i, i = 1, \dots, m, g^j, j \in J(x^*)$ , linear unabhängig, dann sind die Multiplikatoren eindeutig bestimmt.

Wir definieren für das Problem (PL) die Lagrange-Funktion  $L : D \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^p \rightarrow \mathbb{R}$  durch

$$L(x, \lambda, \mu) = f(x) + \lambda^T (Ax - b) + \mu^T (Gx - r).$$

Das System bestehend aus den Optimalitätsbedingungen und den Nebenbedingungen heißt **Karush-Kuhn-Tucker-System**:

$$\nabla_x L(x^*, \lambda^*, \mu^*) = \nabla f(x^*) + A^T \lambda^* + G^T \mu^* = 0_n$$

$$\nabla_\lambda L(x^*, \lambda^*, \mu^*) = Ax^* - b = 0_m$$

$$\nabla_\mu L(x^*, \lambda^*, \mu^*) = Gx^* - r \leq 0_p$$

$$\mu^* \geq 0_p$$

$$(\mu^*)^T (Gx^* - r) = 0_p.$$





### 3. Optimierungsverfahren: Grundlagen

- Nichtlineare Optimierungsprobleme können i. d. R. nicht analytisch gelöst werden  $\Rightarrow$  **numerische Lösung**
- Berechne für das Problem (QU) ausgehend von einem Startpunkt  $x^{(0)}$  eine Folge  $x^{(k)}$ ,  $k = 1, 2, \dots$ , mit dem Ziel, dass die Folge gegen die Lösung  $x^*$  konvergiert
- Naheliegendes Ziel bei den Iterationen:

$$f(x^{(k+1)}) < f(x^{(k)}),$$

solche Verfahren nennt man **Abstiegsverfahren**, da die Folge der Funktionswerte  $\{f(x^{(k)})\}_{k \in N}$  eine absteigende Folge ist

- Wenn möglich startet man mit einem zulässigen Punkt  $x^{(0)} \in \mathcal{F}$  und versucht, dass  $x^{(k)} \in \mathcal{F}$  für alle  $k \in N$  gilt - **Verfahren zulässigen Punkte**
- Abstiegsverfahren benutzen zur Berechnung von  $x^{(k+1)}$  eine **Abstiegsrichtung**  $d^{(k)}$  mit der Eigenschaft

$$f(x^{(k)} + \sigma_k d^{(k)}) < f(x^{(k)})$$

für eine hinreichend kleine **Schrittweite**  $\sigma_k$

- Die Schrittweite  $\sigma_k$  ist so zu bestimmen, dass man eine möglichst große Abnahme des Zielfunktionswertes erhält
- Neuer Iterationspunkt:  $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \sigma_k d^{(k)}$

Mit einer **differenzierbaren Zielfunktion**  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  betrachten wir das unrestringierte Optimierungsproblem

$$\min_x f(x) \quad (\text{PU})$$

Zur Herleitung und Untersuchung numerischer Verfahren zur Lösung des Problems (PU) benötigen wir die folgende Standard-Voraussetzung: (V) Mit gegebenem  $x^{(0)} \in \mathbb{R}^n$  ist die Niveaumenge

$$N_0 = N(f, f(x^{(0)})) = \{x \in \mathbb{R}^n \mid f(x) \leq f(x^{(0)})\}$$

kompakt. Damit existiert eine globale Lösung  $x^*$  von (PU) und es gilt

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

### 3. Optimierungsverfahren: Grundlagen

**Lemma 3.1.** Die Funktion  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  sei differenzierbar in  $x$ . Weiter sei  $d \in \mathbb{R}^n$  mit

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

Dann gibt es ein  $\sigma > 0$  mit  $f(x + \sigma d) < f(x)$  für alle  $\sigma \in ]0, \sigma[$ . ◇

*Beweis.*  $f$  ist differenzierbar in  $x$ :

$$\nabla f(x)^T d = \lim_{\sigma \searrow 0} \frac{f(x + \sigma d) - f(x)}{\sigma}$$

Nach Voraussetzung ist  $\nabla f(x)^T d < 0$ .

$$\Rightarrow f(x + \sigma d) - f(x) < 0$$

$$\Leftrightarrow f(x + \sigma d) < f(x) \text{ für hinreichend kleines } \sigma.$$

□

Ein solcher Vektor  $d$  heißt **Abstiegsrichtung** von  $f$  im Punkt  $x$ .

#### Beispiele

a) Ist  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  differenzierbar in  $x$  und ist  $\nabla f(x) \neq 0_n$ , dann gilt

$$\nabla f(x)^T (-\nabla f(x)) = -\|\nabla f(x)\|^2 < 0,$$

d. h., der **negative Gradient** ist eine Abstiegsrichtung in  $x$ .

b) Ist  $A$  eine beliebige positiv definite  $n \times n$ -Matrix, dann ist die Richtung

$$d = -A^{-1} \nabla f(x)$$

eine Abstiegsrichtung in  $x$ .

### 3.1. Allgemeines Abstiegsverfahren mit Schrittweitensteuerung

1. Wähle einen Startpunkt  $x^{(0)} \in \mathbb{R}^n$  und setze  $k = 0$ .
2. Ist  $\nabla f(x^{(k)}) = 0_n$ , dann stoppe das Verfahren.
3. Berechne eine Abstiegsrichtung  $d^{(k)}$ , eine Schrittweite  $\sigma_k > 0$  mit

$$f(x^{(k)} + \sigma_k d^{(k)}) < f(x^{(k)})$$

und setze  $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \sigma_k d^{(k)}$ .

4. Setze  $k = k + 1$  und gehe zu 2.

Ist Voraussetzung (V) erfüllt, dann ist  $\mathcal{N}_0$  beschränkt, und  $f$  ist auf  $\mathcal{N}_0$  beschränkt. Da für das allgemeine Abstiegsverfahren

$$f(x^{(k+1)}) < f(x^{(k)})$$

ist, folgt  $x^{(k)} \in \mathcal{N}_0$  für alle  $k \in \mathbb{N}$ . Daher sind die Folgen  $x^{(k)}$  und  $f(x^{(k)})$  beschränkt.

## Abbruchkriterien

Das Abbruchkriterium  $\nabla f(x^{(k)}) = 0_n$  in Schritt 2 ist nur für theoretische Zwecke sinnvoll. Praktisch gibt man **Toleranzen**  $\varepsilon_i > 0$  vor, wobei man  $\varepsilon_i = 10^{-p}$  wählt, wenn das Ergebnis auf  $p$  Stellen genau sein soll. **Typische Abbruchkriterien** sind:

- $f(x^{(k)}) - f(x^{(k+1)}) \leq \varepsilon_1 \max\{1, |f(x^{(k)})|\}$
- $\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\| \leq \varepsilon_2 \max\{1, \|x^{(k)}\|\}$  mit  $\varepsilon_2 = \sqrt{\varepsilon_1}$
- $\|\nabla f(x^{(k)})\| \leq \varepsilon_3 \max\{1, |f(x^{(k)})|\}$  mit  $\varepsilon_3 = \sqrt{\varepsilon_1}$  Da die Abbruchkriterien nicht immer erfüllt werden können, sollte man zusätzlich eine **maximale Iterationszahl** vorgeben.

Wir betrachten zunächst das Lösen **unrestringierter, quadratischer Optimierungsprobleme** der Form

$$\min_x f(x) = \frac{1}{2}x^T Qx + q^T x. \quad (\text{QU})$$

Hierfür verwenden wir das **Gradientenverfahren**, welches auf eine Arbeit von **Louis Augustin Cauchy** aus dem Jahr **1847** zurückgeht. Für Probleme vom Typ (QU) geben wir eine Abstiegsrichtung  $d^{(k)}$  und eine **Schrittweitenstrategie**  $\sigma_k$  an, welche wir in das allgemeine Abstiegsverfahren von Folie 6-6 einsetzen. Wir beweisen anschließend die **Konvergenz** des resultierenden Verfahrens.

Der **negative Gradient**  $\nabla f(x)$  ist nicht nur eine Abstiegsrichtung der Zielfunktion im Punkt  $x$ , sondern definiert sogar die **Richtung des steilsten Abstiegs** wie folgendes Resultat zeigt.

**Lemma 3.2.** Sei  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  in  $x$  differenzierbar mit  $\nabla f(x) \neq 0_n$ . Dann ist

$$\bar{d} = -\frac{\nabla f(x)}{\|\nabla f(x)\|}$$

*Lösung des Optimierungsproblems*

$$\begin{aligned} \min_{d \in \mathbb{R}^n} \quad & \nabla f(x)^T d \\ \text{s.t.} \quad & \|d\| = 1 \end{aligned}$$

◇

*Beweis.* Für beliebiges  $d \in \mathbb{R}^n$  ist  $\nabla f(x)^T d \geq -\|\nabla f(x)\| \|d\|$  (Cauchy-Schwarz). Daher ist  $\nabla f(x)^T d \geq \underbrace{-\|\nabla f(x)\|}_{\text{Untere Schranke der ZF}} \quad \forall d \in \mathbb{R}^n, \|d\| = 1.$

Für  $\bar{d}$  gilt:

$$\nabla f(x)^T \bar{d} = -\frac{f(x)^T \nabla f(x)}{\|\nabla f(x)\|} = -\frac{\|\nabla f(x)\|^2}{\|\nabla f(x)\|} = -\|\nabla f(x)\|.$$

Damit ist die Behauptung bewiesen. □



## 4. Das Gradientenverfahren für quadratische Optimierungsprobleme

### 4.1. Problemstellung und Abstiegsrichtung

Mit einer **differenzierbaren Zielfunktion**  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  betrachten wir das **unrestringierte Optimierungsproblem**

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

**Lemma 4.1.** Die Funktion  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  sei differenzierbar in  $x$ . Weiter sei  $d \in \mathbb{R}^n$  mit  $\nabla f(x)^T d < 0$ . Dann gibt es ein  $\bar{\sigma} > 0$  mit  $f(x + \sigma d) < f(x)$  für alle  $\sigma \in ]0, \bar{\sigma}[$ . Ein solcher Vektor  $d$  heißt **Abstiegsrichtung** von  $f$  im Punkt  $x$ .  $\diamond$

### 4.2. Allgemeines Abstiegsverfahren mit Schrittweitensteuerung

1. Wähle einen Startpunkt  $x(0) \in \mathbb{R}^n$  und setze  $k = 0$ .
2. Ist  $\nabla f(x(k)) = 0_n$ , dann stoppe das Verfahren.
3. Berechne eine **Abstiegsrichtung**  $d(k)$ , eine **Schrittweite**  $\sigma k > 0$  mit  $f(x(k) + \sigma k d(k)) < f(x(k))$  und setze  $x(k+1) = x(k) + \sigma k d(k)$ .
4. Setze  $k = k + 1$  und gehe zu 2.

### 4.3. Das Gradientenverfahren

Suchrichtung:  $d^{(k)} = -\nabla f(x^{(k)})$

- Wähle einen Startpunkt  $x^{(0)} \in \mathbb{R}^n$  und setze  $k = 0$ .
- Ist  $\nabla f(x^{(k)}) = 0_n$ , dann stoppe das Verfahren.
- Berechne eine effiziente Schrittweite  $\sigma_k$  (bspw. Armijo) und setze  $x^{(k+1)} = x^{(k)} - \sigma_k \nabla f(x^{(k)})$ .
- Setze  $k = k + 1$  und gehe zu 2.

#### 4. Das Gradientenverfahren für quadratische Optimierungsprobleme

Der negative Gradient ist die eindeutig bestimmte Lösung des quadratischen Problems

$$\min_{d \in \mathbb{R}^n} \underbrace{f(x^{(k)}) + \nabla f(x^{(k)})^T d}_{\text{Taylor-Approximation 1. Ordnung}} + \underbrace{\frac{1}{2} d^T d}_{\frac{1}{2\sigma} \|x^{(k+1)} - x^{(k)}\|^2} \quad (4.1)$$

Abstand  $x^{(k+1)}$  zu  $x^{(k)}$

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \sigma d$$

$$d = (x^{(k+1)} - x^{(k)}) / \sigma$$

$$\begin{aligned} \text{für } Q &= I_n \\ q &= \nabla f(x^{(k)}) \\ Qd + q &= 0 \\ Id + \nabla f(x^{(k)}) &= 0 \Rightarrow d = -\nabla f(x^{(k)}) \end{aligned}$$

##### 4.3.1. Funktionenklassen

$\mathcal{F}_L^{k,l}(R^n) \Rightarrow$  Menge aller konvexen Funktionen  $\mathcal{F} : R^n \Rightarrow R$ , die  $k$  mal stetig differenzierbar sind und deren  $l$ -te Ableitung Lipschitz-stetig mit Konstante  $L$  ist, d.h.

$$\|f^{(l)}(x) - f^{(l)}(y)\| \leq L \|x - y\| \forall x, y \in R^n \quad (4.2)$$

- Offensichtlich ist  $k \geq l$
- $\mathcal{F}_L^{k_1,l} \leq \mathcal{F}_L^{k_2,l}, k_1 \geq k_2$
- $f_1 \in \mathcal{F}_{L_1}^{k,l}, f_2 \in \mathcal{F}_{L_2}^{k,l}, \alpha, \beta \geq 0$

$$\Rightarrow \alpha f_1 + \beta f_2 \in \mathcal{F}_{\alpha L_1 + \beta L_2}^{k,l}$$

$\mathcal{F}^k \Rightarrow$  Menge aller konvexen Funktionen, die  $k$  mal stetig differenzierbar sind.  
Eigenschaft von  $\mathcal{F}^1$ : Für  $f \in \mathcal{F}^1$  gilt:

$$f(y) \geq f(x) + \nabla f(x)^T (y - x) \quad (4.3)$$

Eigenschaften von  $\mathcal{F}_L^{1,1}$ : Für  $f \in \mathcal{F}_L^{1,1}$  gilt:

- $f(y) \leq f(x) + \nabla f(x)^T (y - x) + L/2 \|x - y\|^2$
- $f(x) + \nabla f(x)^T (y - x) + 1/(2L) \|\nabla f(x) - \nabla f(y)\|^2 \leq f(y)$
- $1/L \|\nabla f(x) - \nabla f(y)\|^2 \leq (\nabla f(x) - \nabla f(y))^T (x - y)$
- $(\nabla f(x) - \nabla f(y))^T (x - y) \leq L \|x - y\|^2$

- $\alpha f(x) + (1 - \alpha)f(y) \geq f(\alpha x + (1 - \alpha)y) + (\alpha(1 - \alpha))/(2L) \|\nabla f(x) - \nabla f(y)\|^2$
- $\alpha f(x) + (1 - \alpha)f(y) \geq f(\alpha x + (1 - \alpha)y) + \alpha(1 - \alpha)L/2 \|x - y\|^2$

**Definition 4.2.** Eine stetig differenzierbare Funktion  $f$  heißt gleichmäßig konvex mit Konvexitätsparameter  $\mu > 0$  ( $f \in S_\mu^1$ ), wenn  $f(y) \geq \nabla f(x)^T(y - x) + (1/2)\mu \|y - x\|^2$   $\diamond$

Wir definieren den Raum  $S_{\mu,L}^{k,l}$  analog zu  $\mathcal{F}_L^{k,l}$

Eigenschaften:  $f_1 \in S_{\mu_1}^1, f_2 \in S_{\mu_2}^1, \alpha, \beta \geq 0$   
 $\Rightarrow \alpha f_1 + \beta f_2 \in S_{\alpha\mu_1 + \beta\mu_2}^1$

**Lemma 4.3.** Eine zweimal stetig differenzierbare Funktion  $f$  gehört zu  $S_\mu^2$

$$\Leftrightarrow f''(x) \geq \mu * I_n \forall x \in \mathbb{R}^n$$

Für  $f \in S_{\mu,L}^{2,1}$  gilt:

$$\mu I_n \leq f''(x) \leq L I_n$$

$\diamond$

**Definition 4.4.**  $Q = L/\mu$  ist die Kondition der Funktion  $f$ .  $\diamond$

Bei kleinen  $Q$  führen kleine Änderungen im Problem zu kleinen Änderungen im Funktionswert.

### 4.3.2. Konvergenz des Gradientenverfahrens

Nachfolgend wird die Konvergenz des Gradientenverfahrens für (gleichmäßig) konvexe, stetig differenzierbare und in der Ableitung Lipschitz-stetige Funktionen gezeigt.

Die Lipschitz-Konstante  $L$  folgt der Ungleichung zwischen der Norm der Divergenz-Differenzen zweier Punkte und der Norm zwischen diesen zwei Punkten (Wiederholung):

$$\|\nabla f(x) - \nabla f(y)\| \leq L \|x - y\|, \quad \forall x, y \in \mathcal{N}_0$$

Sei die Schrittweitenstrategie in den folgenden Beweisen  $\sigma_k = \sigma$  konstant gewählt.

**Satz 4.5** (Konvergenz des Gradientenverfahrens für konvexe Funktionen). Sei  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  konvex und stetig differenzierbar und die Ableitung  $\nabla f$  Lipschitz-stetig mit Lipschitzkonstante  $L > 0$ . Dann gilt für das Gradientenverfahren mit konstanter Schrittweite  $0 < \sigma < \frac{1}{L}$

$$f(x^{(k)}) - f(x^*) \leq \frac{\|x^{(0)} - x^*\|^2}{2\sigma k}.$$

$\diamond$

*Beweis.* Aus der Lipschitz-Stetigkeit der Ableitung  $\nabla f$  folgt

$$f(y) \leq f(x) + \nabla f(x)^T(y - x) + \frac{L}{2} \|y - x\|_2^2, \quad \forall x, y.$$

#### 4. Das Gradientenverfahren für quadratische Optimierungsprobleme

Seien  $x$  und  $y$  die Punkte der  $k$ -ten bzw.  $(k - 1)$ -ten Iteration des Gradientenverfahrens, d.h.

$$\begin{aligned} x &= x^{(k)}, \\ \text{sowie} \quad y &= x^{(k+1)} = x^{(k)} - \sigma \nabla f(x^{(k)}). \end{aligned}$$

Aus der Ungleichung ergibt für diese zwei gewählten Punkte:

$$\begin{aligned} f(x^{(k+1)}) &\leq f(x^{(k)}) + \nabla f(x^{(k)})^\top (x^{(k+1)} - x^{(k)}) + \frac{L}{2} \|x^{(k+1)} - x^{(k)}\|_2^2 \\ &= f(x^{(k)}) + \nabla f(x^{(k)})^\top (-\sigma \nabla f(x^{(k)})) + \frac{L}{2} \|-\sigma \nabla f(x^{(k)})\|_2^2 \\ &= f(x^{(k)}) + -\sigma \|\nabla f(x^{(k)})\|_2^2 + \frac{\sigma^2 L}{2} \|\nabla f(x^{(k)})\|_2^2 \\ &= f(x^{(k)}) - \sigma \left(1 - \frac{\sigma L}{2}\right) \|\nabla f(x^{(k)})\|_2^2 \\ &\leq f(x^{(k)}) - \frac{\sigma}{2} \|\nabla f(x^{(k)})\|_2^2, \quad \text{da } 0 < \frac{\sigma L}{2} \leq \frac{1}{2} \end{aligned}$$

Es gilt demnach

$$f(x^{(k+1)}) < f(x^{(k)}), \quad \forall k \quad (\text{solange } \nabla f(x^{(k)}) \neq 0).$$

Aufgrund der Konvexität, sowie der stetigen Differenzierbarkeit von  $f$  gilt

$$f(y) \geq f(x) + \nabla f(x)^\top (y - x), \quad \forall x, y.$$

Sei nun  $x = x^{(k)}, y = x^*$ , so folgt

$$f(x^{(k)}) \leq f(x^*) - \nabla f(x^{(k)})^\top (x^* - x^{(k)}).$$



Eingesetzt in die Ungleichung aus der Lipschitz-Stetigkeit ergibt sich

$$\begin{aligned}
f(x^{(k+1)}) &\leq f(x^{(k)}) - \frac{\sigma}{2} \left\| \nabla f(x^{(k)}) \right\|_2^2 \\
&\leq f(x^*) + \nabla f(x^{(k)})^\top (x^{(k)} - x^*) - \frac{\sigma}{2} \left\| \nabla f(x^{(k)}) \right\|_2^2 \\
&= f(x^*) + \frac{1}{2\sigma} \left[ \underbrace{\left\| x^{(k)} - x^* \right\|_2^2 - \left\| x^{(k)} - x^* \right\|_2^2}_{=0} - \sigma^2 \left\| \nabla f(x^{(k)}) \right\|_2^2 \right. \\
&\quad \left. + 2\sigma \nabla f(x^{(k)})^\top (x^{(k)} - x^*) \right] \\
&= f(x^*) + \frac{1}{2\sigma} \left[ \left\| x^{(k)} - x^* \right\|_2^2 - \left\{ \left\| x^{(k)} - x^* \right\|_2^2 + \sigma^2 \left\| \nabla f(x^{(k)}) \right\|_2^2 \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - 2\sigma \nabla f(x^{(k)})^\top (x^{(k)} - x^*) \right\} \right] \\
&= f(x^*) + \frac{1}{2\sigma} \left[ \left\| x^{(k)} - x^* \right\|_2^2 - \left\| x^{(k)} - \sigma \nabla f(x^{(k)}) - x^* \right\|_2^2 \right] \\
&= f(x^*) + \frac{1}{2\sigma} \left[ \left\| x^{(k)} - x^* \right\|_2^2 - \left\| x^{(k+1)} - x^* \right\|_2^2 \right].
\end{aligned}$$

Diese Ungleichung lässt sich schreiben als

$$f(x^{(k+1)}) - f(x^*) \leq \frac{1}{2\sigma} \left[ \left\| x^{(k)} - x^* \right\|_2^2 - \left\| x^{(k+1)} - x^* \right\|_2^2 \right].$$

Die Summe dieses Ausdrucks über die Iterationsschritte 1 bis  $k$  ist eine Teleskopsumme

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^k f(x^{(i)}) - f(x^*) &\leq \sum_{i=1}^k \frac{1}{2\sigma} \left[ \left\| x^{(i-1)} - x^* \right\|_2^2 - \left\| x^{(i)} - x^* \right\|_2^2 \right] \\
&= \frac{1}{2\sigma} \left[ \left\| x^{(0)} - x^* \right\|_2^2 - \underbrace{\left\| x^{(k)} - x^* \right\|_2^2}_{\geq 0} \right] \\
&\leq \frac{1}{2\sigma} \left\| x^{(0)} - x^* \right\|_2^2.
\end{aligned}$$

Weiterhin gilt Aufgrund der Monotonie von  $f(x^{(i)})$

$$\sum_{i=1}^k f(x^{(i)}) - f(x^*) \geq \sum_{i=1}^k f(x^{(k)}) - f(x^*) = k \left[ f(x^{(k)}) - f(x^*) \right].$$

Demnach folgt aus der Ungleichung der Teleskopsumme die zu beweisende Ungleichung

$$f(x^{(k)}) - f(x^*) \leq \frac{1}{2\sigma k} \left\| x^{(0)} - x^* \right\|_2^2$$

□

#### 4. Das Gradientenverfahren für quadratische Optimierungsprobleme

Sofern eine Vorgabe vorliegt, wie groß die Differenz zwischen den beiden Funktionswerten des  $k$ -ten Iterationsschrittes und der Minimalstelle maximal sein darf, um das Verfahren abubrechen, kann eine Abschätzung der Anzahl an Iterationsschritten  $k$  durchgeführt werden.

Sei  $\epsilon > 0$ , so gilt

$$\begin{aligned} f(x^{(k)}) - f(x^*) &\leq \frac{1}{2\sigma k} \|x^{(0)} - x^*\|_2^2 = \epsilon \\ \Leftrightarrow k &= \frac{1}{2\sigma\epsilon} \|x^{(0)} - x^*\|_2^2 \\ \Rightarrow k &= \mathcal{O}\left(\frac{1}{\epsilon}\right) \end{aligned}$$

**Satz 4.6** (Konvergenz des Gradientenverfahrens für gleichmäßig konvexe Funktionen). *Sei  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  gleichmäßig konvex (mit Parameter  $\mu$ ), stetig differenzierbar und die Ableitung  $\nabla f$  Lipschitz-stetig mit Lipschitzkonstante  $L > 0$ . Dann gilt für das Gradientenverfahren mit konstanter Schrittweite  $0 < \sigma \leq \frac{2}{\mu+L}$*

$$\|x^{(k)} - x^*\|^2 \leq \left(1 - \frac{2\sigma\mu L}{\mu + L}\right)^k \|x^{(0)} - x^*\|^2,$$

sowie für  $\sigma = \frac{2}{\mu+L}$

$$\begin{aligned} \|x^{(k)} - x^*\| &\leq \left(\frac{Q_f - 1}{Q_f + 1}\right)^k \|x^{(0)} - x^*\| \\ f(x^{(k)}) - f(x^*) &\leq \frac{L}{2} \left(\frac{Q_f - 1}{Q_f + 1}\right)^{2k} \|x^{(0)} - x^*\|^2 \end{aligned}$$

wobei  $Q_f = \frac{L}{\mu}$  (Kondition). ◇

*Beweis.* Sei die Variable  $r^{(k)}$  als Norm zwischen dem Punkt des  $k$ -ten Iterationsschrittes und dem Minimalpunkt eingeführt

$$r^{(k)} = \|x^{(k)} - x^*\|.$$

So folgt für das Quadrat von  $r^{(k+1)}$

$$\begin{aligned} \left(r^{(k+1)}\right)^2 &= \|x^{(k+1)} - x^*\|_2^2 \\ &= \|x^{(k)} - \sigma \nabla f(x^{(k)}) - x^*\|_2^2 \\ &= \left(r^{(k)}\right)^2 - 2\sigma \underbrace{\nabla f(x^{(k)})^\top}_{=0} \left[x^{(k)} - x^*\right] + \sigma^2 \|\nabla f(x^{(k)})\|_2^2 \\ &= \left[ \nabla f(x^{(k)}) - \underbrace{\nabla f(x^*)}_{=0} \right]^\top \end{aligned}$$

### 4.3. Das Gradientenverfahren

Der Term  $[\nabla f(x^{(k)}) - \nabla f(x^*)]^\top [x^{(k)} - x^*]$  kann mithilfe der Ausdrücke  $(r^{(k)})^2$  und  $\|\nabla f(x^{(k)})\|_2^2$  nach unten abgeschätzt werden. Dazu werden folgende Relation benutzt:

$$\begin{aligned} [\nabla f(x^{(k)}) - \nabla f(x^*)]^\top &\geq \mu (r^{(k)})^2 \\ [\nabla f(x^{(k)}) - \nabla f(x^*)]^\top &\geq \frac{1}{L} \|\nabla f(x^{(k)}) - \nabla f(x^*)\|_2^2 \end{aligned}$$

Weiterhin gilt für die Konditionszahl der Funktion  $f$  die Relation  $Q_f = \frac{L}{\mu} \geq 1$ .  
Somit folgt

$$\begin{aligned} &[\nabla f(x^{(k)}) - \nabla f(x^*)]^\top \\ &= \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\right) [\nabla f(x^{(k)}) - \nabla f(x^*)]^\top \\ &\geq \frac{\mu}{2} (r^{(k)})^2 + \frac{1}{2L} \|\nabla f(x^{(k)}) - \nabla f(x^*)\|_2^2 \\ &= \frac{\mu L}{L+L} (r^{(k)})^2 + \frac{1}{L+L} \|\nabla f(x^{(k)}) - \nabla f(x^*)\|_2^2, \text{ nun gilt: } L \geq \mu \\ &\geq \frac{\mu L}{\mu+L} (r^{(k)})^2 + \frac{1}{\mu+L} \|\nabla f(x^{(k)}) - \nabla f(x^*)\|_2^2. \end{aligned}$$

Demnach folgt für die Abschätzung für  $(r^{(k+1)})^2$

$$\begin{aligned} (r^{(k+1)})^2 &\leq (r^{(k)})^2 - \frac{2\sigma\mu L}{\mu+L} (r^{(k)})^2 - \frac{2\sigma}{\mu+L} \|\nabla f(x^{(k)}) - \nabla f(x^*)\|_2^2 + \sigma^2 \|\nabla f(x^{(k)})\|_2^2 \\ &= \left(1 - \frac{2\sigma\mu L}{\mu+L}\right) (r^{(k)})^2 + \sigma \left(\sigma - \frac{2}{\mu+L}\right) \|\nabla f(x^{(k)})\|_2^2. \end{aligned}$$

Aus der Voraussetzung  $0 < \sigma \leq \frac{2}{\mu+L}$  lässt sich der zweite Term abschätzen. Setze  $k \rightarrow k-1$ , so folgt die zu beweisende Ungleichung

$$\begin{aligned} (r^{(k)})^2 &\leq \left(1 - \frac{2\sigma\mu L}{\mu+L}\right) (r^{(k-1)})^2 + \underbrace{\sigma \left(\sigma - \frac{2}{\mu+L}\right)}_{\leq 0} \|\nabla f(x^{(k-1)})\|_2^2 \\ &\leq \left(1 - \frac{2\sigma\mu L}{\mu+L}\right) (r^{(k-1)})^2 \\ &\leq \left(1 - \frac{2\sigma\mu L}{\mu+L}\right)^2 (r^{(k-2)})^2 \\ &\dots \\ &\leq \left(1 - \frac{2\sigma\mu L}{\mu+L}\right)^k (r^{(0)})^2 \end{aligned}$$

#### 4. Das Gradientenverfahren für quadratische Optimierungsprobleme

Wird nun  $\sigma = \frac{2}{\mu+L}$  festgelegt, ergibt sich

$$\begin{aligned} \left(r^{(k)}\right)^2 &\leq \left(1 - \frac{2\frac{2}{\mu+L}\mu L}{\mu+L}\right)^k \left(r^{(0)}\right)^2 \\ &= \left(\frac{(\mu+L)^2 - 4\mu L}{(\mu+L)^2}\right)^k \left(r^{(0)}\right)^2 \\ &= \left(\frac{(\mu-L)^2}{(\mu+L)^2}\right)^k \left(r^{(0)}\right)^2 \\ &= \left(\frac{Q_f - 1}{Q_f + 1}\right)^{2k} \left(r^{(0)}\right)^2 \end{aligned}$$

Daher gilt nach Wurzelziehen der Ungleichung

$$\|x^{(k)} - x^*\| \leq \left(\frac{Q_f - 1}{Q_f + 1}\right)^k \|x^{(0)} - x^*\|$$

Aus der Lipschitz-Bedingung  $f(x^{(k)}) - f(x^*) \leq \frac{L}{2} (r^{(k)})^2$  folgt die letzte zu zeigende Ungleichung

$$\begin{aligned} \frac{2}{L} [f(x^{(k)}) - f(x^*)] &\leq \left(r^{(k)}\right)^2 \\ \Leftrightarrow f(x^{(k)}) - f(x^*) &\leq \frac{L}{2} \left(\frac{Q_f - 1}{Q_f + 1}\right)^{2k} \|x^{(0)} - x^*\|^2 \end{aligned}$$

□

#### 4.4. Die Richtung des steilsten Abstiegs

Der **negative Gradient**  $-\nabla f(x)$  ist nicht nur eine Abstiegsrichtung der Zielfunktion im Punkt  $x$ , sondern definiert sogar die **Richtung des steilsten Abstiegs** wie folgendes Resultat zeigt.

**Lemma 4.7.** Sei  $f : \mathbb{R}^n \leftarrow \mathbb{R}$  in  $x$  differenzierbar mit  $\nabla f(x) \neq 0_n$ . Dann ist

$$\bar{d} = \frac{-\nabla f(x)}{\|\nabla f(x)\|} \quad (4.4)$$

*Lösung des Optimierungsproblems*

$$\begin{aligned} \min_{d \in \mathbb{R}^n} \quad & \nabla f(x)^T d \\ \text{s.t.} \quad & |d| = 1 \end{aligned} \quad (4.5)$$

◇

## 4.5. Das Schrittweitenverfahren von Armijo

Seien  $x$  und eine Abstiegsrichtung  $d$  von  $f$  in  $x$  gegeben. Weiter sei  $c_1 \in ]0, 1[$  eine von  $x$  und  $d$  unabhängige Konstante. Zur Berechnung einer effizienten Schrittweite  $\sigma$  soll die Abstiegsbedingung  $f(x + \sigma d) \leq f(x) + c_1 \sigma \nabla f(x)^T d$  erfüllt werden. Damit die Schrittweite nicht zu klein wird, fordert man zusätzlich mit einer von  $x$  und  $d$  unabhängigen Konstante  $c_2 > 0$ , dass

$$\sigma \geq -c_2 (\nabla f(x)^T d) / \|d\|^2 \quad (4.6)$$

Gegeben seien von  $x$  und  $d$  unabhängige Konstanten:  $\delta \in ]0, 1[$ ,  $\gamma > 0$  und  $0 < \beta_1 \leq \beta_2 < 1$

1. Wähle eine Startschrittweite  $\sigma_0$ , für die mit  $c_2 = \gamma$  gilt:

$$\sigma \geq -\gamma (\nabla f(x)^T d) / \|d\|^2 \quad (4.7)$$

Setze  $j = 0$ .

2. Ist die Abstiegsbedingung  $f(x + \sigma d) \leq f(x) + \delta \sigma_j \nabla f(x)^T d$  erfüllt, dann setze  $\sigma_A = \sigma_j$  und stoppe das Verfahren.
3. Wähle  $\sigma_j + 1 \in [\beta_1 \sigma_j, \beta_2 \sigma_j]$ .
4. Setze  $j = j + 1$  und gehe zu 2.

Praktisch haben sich folgende Werte bewährt:

- $\delta$  sollte klein sein; Größenordnung:  $\delta = 0.01$
- $\gamma$  sollte so gewählt werden, dass die Schrittweite 1 und die exakte Schrittweite nicht ausgeschlossen werden.  $\gamma = 10^{-4}$
- $\sigma_0 = 1$  oder als Approximation der exakten Schrittweite:

$$\sigma_0 = -(\nabla f(x)^T d) / (2(f(x + d) - f(x) - \nabla f(x)^T d)) \quad (4.8)$$

- Zur Berechnung von  $\sigma_j, j \geq 1$  kann man  $\beta_1 = \beta_2 = \beta$  wählen:

$$\sigma_j = \beta^j \sigma_0 \quad (4.9)$$

$j = 1, 2, \dots$

Oft wählt man  $\beta = 1/2$

#### 4. Das Gradientenverfahren für quadratische Optimierungsprobleme

##### 4.5.1. Konvergenz des Verfahrens

Die theoretische Version des Armijo-Verfahrens konvergiert nach endlich vielen Schritten, falls die Standard-Voraussetzung erfüllt ist und die Ableitung der Zielfunktion Lipschitz-stetig ist, d. h., es gibt ein  $L > 0$  mit

$$\|\nabla f(x) - \nabla f(y)\| \leq L\|x - y\| \forall x, y \in N_0 \quad (4.10)$$

Bei einer praktischen Implementierung mit der diskutierten Parameterwahl ist jedoch endliche Konvergenz nicht sichergestellt. Daher sollte eine maximale Iterationszahl vorgegeben werden. Sollte keine Konvergenz eintreten, kann das Verfahren mit anderen Parametern neugestartet werden.

##### Beispiel zur Lipschitz-Stetigkeit

$$\begin{aligned} f(x_1, x_2) &= (x_1)^2 + (x_2)^2 \\ \nabla f(x_1, x_2) &= \begin{bmatrix} 2x_1 \\ 2x_2 \end{bmatrix} \\ \nabla f(x_1, x_2) &\text{ ist } \infty \text{ mal stetig differenzierbar} \end{aligned}$$

$$\|\nabla f(x) - \nabla f(y)\| = \left\| 2 \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} - 2 \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix} \right\| = \left\| 2 \begin{bmatrix} x_1 - y_1 \\ x_2 - y_2 \end{bmatrix} \right\| \leq 2 \|x - y\| \quad (4.11)$$

$\nabla f$  ist lipschitz-stetig mit  $L=2$

Die Lipschitz-Stetigkeit kann als ein Verhältnis zwischen Funktionswerten und Argumenten interpretiert werden.

#### 4.6. Gradientenverfahren für quadratische Probleme

Wir betrachten zunächst das Lösen **unrestringierter, quadratischer Optimierungsprobleme** der Form

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) = \frac{1}{2} x^T Q x + q^T x \quad (\text{QU})$$

Hierfür verwenden wir das **Gradientenverfahren**, welches auf eine Arbeit von **Louis Augustin Cauchy** aus dem Jahr **1847** zurückgeht. Für Probleme vom Typ (QU) geben wir eine **Abstiegsrichtung**  $d(k)$  und eine **Schrittweitenstrategie**  $\sigma k$  an, welche wir in das allgemeine Abstiegsverfahren von ? einsetzen. Wir beweisen anschließend die **Konvergenz** des resultierenden Verfahrens.

#### 4.7. Die exakte Schrittweite

Für einen gegebenen Punkt  $x \in \mathbb{R}^n$  und die zugehörige Abstiegsrichtung  $d = -\nabla f(x) \neq 0_n$  soll nun eine geeignete **Schrittweite** berechnet werden.

#### 4.8. Gradientenverfahren für quadratische Probleme

Dazu betrachten wir die Funktion  $\psi : [0, \infty[ \leftarrow \mathbb{R}$  mit

$$\psi(s) = f(x + sd) = \frac{1}{2}s^2 d^T Q d + s(Qx + q)^T d + \frac{1}{2}x^T Q x + q^T x.$$

Diese Funktion ist in  $s$  quadratisch. Es gilt  $\psi(0) = f(x)$  und  $\psi'(0) = \nabla f(x)^T d < 0$ .

D. h., geht man von  $x$  aus in Richtung  $d$ , dann nehmen die Funktionswerte zunächst ab. Wir wollen die Schrittweite  $\sigma_E$  so bestimmen, dass der Zielfunktionswert maximal abnimmt. Dies ist offensichtlich der Fall, wenn  $\sigma_E$  der eindeutig bestimmte Minimalpunkt von  $\psi$  ist und damit die Optimalitätsbedingung  $\psi'(0) = (\sigma_E) = 0$  erfüllt. Dadurch erhalten wir

$$\sigma_E = \frac{d^T d}{d^T Q d}.$$

Man nennt  $\sigma_E$  die **exakte Schrittweite**.

$$\begin{aligned} \min_{s \in \mathbb{R}} \psi(s) &= f(x + sd) \\ f(x + sd) &= \frac{1}{2}(x + sd)^T Q (x + sd) + q^T (x + sd) \\ &= \frac{1}{2}x^T Q d + \frac{1}{2}s^2 d^T Q d + sx^T Q d + q^T x + sq^T d \\ \psi'(s) &= sd^T Q d + (Qx + q)^T d \\ \psi'(0) &= (Qx + q)^T d \\ &= \nabla f(x)^T d \\ \sigma_E \text{ ist Min von } \psi &\Leftrightarrow \psi'(\sigma_E) = 0 \\ \sigma_E d^T Q d &= (Qx + q)^T d = 0 \\ \Leftrightarrow \sigma_E &= -\frac{(Qx + q)^T d}{d^T Q d} = \frac{d^T d}{d^T Q d} \\ &\quad -\nabla f(x) = d \end{aligned} \tag{4.12}$$

#### 4.8. Gradientenverfahren für quadratische Probleme

1. Wähle einen Startpunkt  $x(0) \in \mathbb{R}^n$  und setze  $k = 0$ .
2. Ist  $\nabla f(x(k)) = Qx(k) + q = 0_n$ , dann stoppe das Verfahren.
3. Berechne zu  $d(k) = -\nabla f(x(k))$ , die exakte Schrittweite

$$\sigma_k = \frac{(d(k))^T d(k)}{(d(k))^T Q d(k)}$$

und setze  $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \sigma_k d(k)$ .

4. Setze  $k = k + 1$  und gehe zu 2.

#### 4. Das Gradientenverfahren für quadratische Optimierungsprobleme

##### 4.8.1. Konvergenz des Verfahrens

**Theorem 4.8.** Ist die Matrix  $Q$  positiv definit, dann konvergiert die mit dem Gradientenverfahren für quadratische Optimierungsprobleme berechnete Folge  $x^{(k)}$  für jeden Startpunkt  $x(0) \in \mathbb{R}^n$  gegen den eindeutig bestimmten Minimalpunkt  $x^*$  von  $f$ .  $\diamond$

*Beweis.*  $x^*$  sei globaler Minimalpunkt von  $f \Leftrightarrow \nabla f(x^*) = Qx + q = 0_n$

$$\begin{aligned} \Rightarrow (i) d^{(k)} &= -\nabla f(x^{(k)}) \\ &= -q - Qx^{(k)} = Q(x^* - x^{(k)}) \\ Qx^* &\leftrightarrow x^* - x^{(k)} = Q^{-1}d^{(k)} \end{aligned}$$

Wir definieren  $F(x) = (x - x^*)^T Q(x - x^*)$

$$F(x^{(k)}) - F(x^{(k+1)}) = 2[x^{(k)} - x^{(k+1)}]^T Q[x^{(k)} - x^{(k)}] - [x^{(k+1)} - x^{(k)}]^T [x^{(k+1)} - x^{(k)}]$$

Wegen  $x^{(k+1)} - x^{(k)} = \sigma_k d^{(k)}$  und (i):

$$\begin{aligned} F(x^{(k)}) - F(x^{(k+1)}) &= -2\sigma_k (d^{(k)})^T \underbrace{QQ^{-1}}_{=I_n} d^{(k)} - \sigma_k (d^{(k)})^T Q d^{(k)} \\ &= 2\sigma_k (d^{(k)})^T d^{(k)} - \sigma_k^2 (d^{(k)})^T Q d^{(k)} \end{aligned}$$

Mit  $\sigma_k = \frac{(d^{(k)})^T d^{(k)}}{(d^{(k)})^T Q d^{(k)}}$  folgt

$$\begin{aligned} F(x^{(k)}) - F(x^{(k+1)}) &= 2 \cdot \frac{[(d^{(k)})^T d^{(k)}]^2}{(d^{(k)})^T Q d^{(k)}} - \frac{[(d^{(k)})^T d^{(k)}]^2}{(d^{(k)})^T Q d^{(k)}} \\ &= \frac{[(d^{(k)})^T d^{(k)}]^2}{(d^{(k)})^T Q d^{(k)}} \\ (i) : F(x^{(k)}) &= (x^{(k)} - x^*)^T Q(x^{(k)} - x^*) \\ &= -Q^{-1}d^{(k)} = -Q^{-1}d^{(k)} \\ &= (d^{(k)})^T (Q^{-1})^T Q Q^{-1} d^{(k)} \\ &= (d^{(k)})^T Q^{-1} d^{(k)} \end{aligned}$$

Damit folgt:

$$\frac{F(x^{(k)}) - F(x^{(k+1)})}{F(x^{(k)})} = \frac{(d^{(k)})^T d^{(k)}}{(d^{(k)})^T Q d^{(k)}} - \frac{(d^{(k)})^T d^{(k)}}{(d^{(k)})^T Q^{-1} d^{(k)}}$$

Sei  $\lambda_1$  der kleinste und  $\lambda_n$  der grösste Ew von  $Q$ :

$$\lambda_1 \|d\|^2 \in d^T Q^{-1} d \geq \lambda_n \|d\|^2$$



#### 4.8. Gradientenverfahren für quadratische Probleme

Damit sind  $\lambda_n^{-1}$  der kleinste und  $\lambda_1^{-1}$  der grösste Ew von  $Q^{-1}$  und

$$\frac{1}{\lambda_n} \|d\|^2 \in d^T Q^{-1} d \geq \frac{1}{\lambda_1} \|d\|^2$$

Damit

$$\begin{aligned} \frac{F(x^{(k)}) - F(x^{(k+1)})}{F(x^{(k)})} &= 1 - \frac{F(x^{(k+1)})}{F(x^{(k)})} \leq \frac{\lambda_1}{\lambda_n} \\ \Rightarrow \frac{F(x^{(k+1)})}{F(x^{(k)})} &= 1 - \frac{\lambda_1}{\lambda_n} \end{aligned}$$

Mit  $L := 1 - \frac{\lambda_1}{\lambda_n}$  folgt  $0 \leq L \leq 1$  und

$$F(x^{(k+1)}) \leq L \cdot F(x^{(k)})$$

Wiederholte Anwendung der Formel ergibt:

$$\begin{aligned} F(x^{(k+1)}) \leq L^k \cdot F(x^{(k)}) &\Leftrightarrow \underbrace{(x^{(k)} - x^*)^T Q (x^{(k)} - x^*)}_{\geq \lambda_1 \cdot \|x^{(k)} - x^*\|^2} \leq L^k \cdot F(x^{(0)}) \\ \Rightarrow \|x^{(k)} - x^*\| &\leq \frac{1}{\lambda_1} L^k \cdot F(x^{(k)}) \end{aligned}$$

Sei  $\Gamma := \sqrt{L}$ , dann ist  $0 \leq \Gamma \leq 1$  und

$$\|x^{(k)} - x^*\| \leq \underbrace{(\lambda_1^{-1} F(x^{(0)}))^{\frac{1}{2}} \cdot \Gamma^k}_{\xrightarrow{k \rightarrow \infty} 0} \quad k = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Dies zeigt  $x^{(k)} \xrightarrow{k \rightarrow \infty} x^*$

□

Das Gradientenverfahren erzeugt **orthogonale Suchrichtungen**:

$$0 = \psi'(\sigma_k) = \nabla f(x(k) + \sigma_k d(k)) T d(k) = \nabla f(x^{(k+1)})^T d^{(k)} = -(d^{(k+1)})^T d^{(k)}$$

Das beeinträchtigt die Konvergenz des Verfahrens. Die Konvergenzgeschwindigkeit ist abhängig von der **Kondition** der Matrix  $Q$ ,  $k(Q) = \lambda_n / \lambda_1$ . Je kleiner die Kondition der Matrix  $Q$  ist, desto besser ist das Problem konditioniert, desto besser ist die Konvergenz.

**Beispiel 4.9.** Wenn  $Q = I_n$

→ Problem konvergiert in einem Schritt zur Loesung

◇

#### 4. Das Gradientenverfahren für quadratische Optimierungsprobleme

##### 4.8.2. Das Verfahren konjugierter Gradienten

Äquivalent zum Lösen des Problems (QU) mit positiv definiten Matrix  $Q$  ist das Lösen des linearen Gleichungssystems

$$Qx = -q$$

Das **Verfahren konjugierter Gradienten** (engl. conjugate gradient method, daher **CG-Verfahren**) wurde **1952** von **Hestenes und Stiefel** zum Lösen solcher Gleichungssysteme entwickelt.

- Schrittweiten: exakt (wie im Gradientenverfahren)
- Suchrichtungen: **Orthogonalisierung** der Richtungen  $\nabla f(x^{(k)})$  bzgl. der Matrix  $Q$

##### 4.8.3. Q-orthogonale Vektoren

**Definition 4.10.** Sei  $Q$  eine symmetrische, positiv definite  $n \times n$ -Matrix. Die Vektoren  $d^{(0)}, \dots, d^{(k)}$ ,  $k < n$ , heißen **zueinander konjugiert (orthogonal) bezüglich  $Q$  oder  $Q$ -konjugiert ( $Q$ -orthogonal)**, wenn sie vom Nullvektor verschieden sind und

$$(d^{(i)})^T Q d^{(j)} = \langle Q d^{(i)}, d^{(j)} \rangle = 0, 0 \leq i < j \leq k$$

gilt.

◇

##### 4.8.4. CG-Verfahren

1. Wähle einen Startpunkt  $x^{(0)} \in \mathbb{R}^n$ , berechne  $\nabla f(x^{(0)}) = Qx^{(0)} + q$ ,  $d^{(0)} = -\nabla f(x^{(0)})$ , und setze  $k = 0$ .
2. Ist  $\nabla f(x^{(k)}) = 0_n$ , dann stoppe das Verfahren.
3. Berechne zu  $d^{(k)}$  die exakte Schrittweite  $\sigma_k = -\frac{f(x^{(k)})^T d^{(k)}}{(d^{(k)})^T Q d^{(k)}}$  und setze  $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \sigma_k d^{(k)}$ .  
Berechne die neue Suchrichtung  $d^{(k+1)}$  durch

$$\nabla f(x^{(k+1)}) = Qx^{(k+1)} + q = \nabla f(x^{(k)}) + \sigma_k Q d^{(k)}$$

$$\beta_k = \frac{\|\nabla f(x^{(k+1)})\|^2}{\|\nabla f(x^{(k)})\|^2}, d^{(k+1)} = -\nabla f(x^{(k+1)}) + \beta_k d^{(k)}$$

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

##### 4.8.5. Konvergenz des CG-Verfahrens

**Theorem 4.11.** Ist die Matrix  $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$  positiv definit, dann berechnet das CG-Verfahren in  $m \leq n$  Iterationsschritten den eindeutig bestimmten Minimalpunkt  $x^*$  von  $f$ . Die berechneten Richtungen  $d^{(k)}$  sind  $Q$ -konjugierte Abstiegsrichtungen von  $f$  in  $x^*$ . ◇

*Beweis.* Satz 4.2.14, Nichtlineare Optimierung (Walter Alt).  $\square$

Wesentlich für die Konvergenz des Verfahrens ist, dass die Folge von Suchrichtungen orthogonal bzgl.  $Q$  und damit linear unabhängig ist. Im Vergleich zum Gradientenverfahren passt sich das CG-Verfahren durch die Orthogonalisierung besser an die Zielfunktion an.

## 4.9. Optimierungsverfahren für allgemeine Probleme

Allgemeine, unrestringierte Probleme mit nichtlinearer, differenzierbarer Zielfunktion vom Typ  $\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x)$  lassen sich mit den im vorigen Kapitel behandelten Verfahren nicht lösen. Der negative Gradient als Richtung des steilsten Abstiegs ist immer noch als Abstiegsrichtung geeignet, allerdings kann keine exakte Schrittweite mehr bestimmt werden.

Sei  $x^{(k)}$  ein Iterationspunkt mit einer Abstiegsrichtung  $d^{(k)}$ . Bei hinreichend kleiner Schrittweite  $\sigma_k$  gilt:

$$f(x^{(k+1)}) = f(x^{(k)} + \sigma_k d^{(k)}) < f(x^{(k)}) \quad (4.14)$$

Die Folge  $f(x^{(k)})$  ist streng monoton fallend. Das muss jedoch nicht bedeuten, dass das Problem konvergiert.

### Beispiel für nicht konvergierende Probleme

$$f(x) = x^2, x^{(0)} = 1, d^{(0)} = -1$$

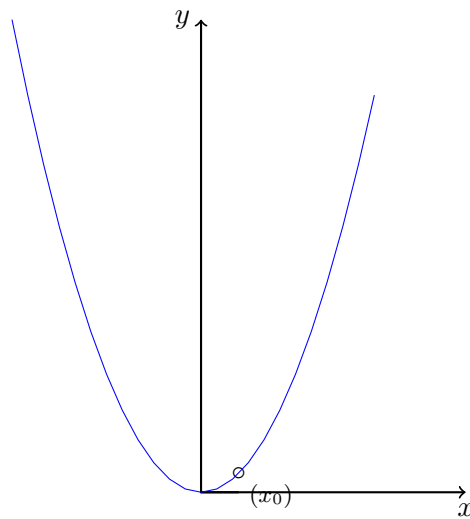


Abbildung 4.1.: Beispiel fuer nicht konvergierendes Problem bei unguenstig gewaehlter Schrittweite

#### 4. Das Gradientenverfahren für quadratische Optimierungsprobleme

Abstiegsrichtung:  $\nabla f(x^{(k)})^T d^{(k)} = -2x^{(k)} < 0 \quad \forall x^{(k)} > 0$

Betrachte Schrittweite  $\sigma_k = 1/2^{k+2} \quad \forall k \geq 0$

$$\begin{aligned} x^{(k+1)} &= x^{(k)} + \sigma_k d^{(k)} \\ &= x^{(k)} - \sigma_k \\ &= x^{(k)} - (1/2)^{(k+2)} \\ &= x^{(0)} - \sum_{i=1}^k (1/2)^{(i+2)} \\ &= 1 - \sum_{i=1}^k (1/2)^{(i+2)} \\ &= 1/2 + (1/2)^{(k+2)} \xrightarrow{k \rightarrow \infty} 1/2 \end{aligned}$$

Die Folge  $x^{(k)}$  konvergiert nicht gegen  $x^* = 0$ .

#### Mögliche Schrittweitenstrategien

- Konstante Schrittweite  $\sigma_k = \sigma > 0$
- Kleiner werdende Schrittweiten, z.B.  $\sigma_k = 1/k$
- Exakte Schrittweiten, z.B.  $\sigma_k = \arg \min_{\sigma \geq 0} f(x^{(k)} + \sigma d^{(k)})$
- Armijo-Verfahren

## 5. Untere Schranken für das Gradientenverfahren

### 5.1. Untere Schranken für $\mathcal{F}_L^{\infty,1}$

Im letzten Kapitel wurden obere Schranken für die Konvergenzgeschwindigkeiten betrachtet, jetzt soll es um untere Schranken gehen.

*Modell:*

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \quad , f \in \mathcal{F}_L^{\infty,1}$$

*Orakel:* Orakel 1. Ordnung, d.h. nur  $f(x)$  und  $f'(x)$  sind bekannt.

*approximative Lösung:*  $\bar{x} \in \mathbb{R}^n : f(\bar{x}) - f^* \leq \epsilon$

*Annahme:* eine iterative Methode generiert eine Folge von Testpunkten  $\{x^{(k)}\}_k$ , für die gilt:

$$x^{(k)} \in x^{(0)} + \text{span}\{f'(x^{(0)}), f'(x^{(1)}), \dots, f'(x^{(k-1)})\}, \quad k \geq 1.$$

*Bemerkung 5.1.* Diese Annahme ist nicht unbedingt notwendig, macht aber den Beweis einfacher.

◇

Sei  $L > 0$ . Dann betrachte folgende Familie von Funktionen (für  $x = (x_1, x_2, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$ ):

$$f_k(x) = \frac{L}{4} \left( \frac{1}{2} \left[ x_1^2 + \sum_{i=1}^{k-1} (x_i - x_{i+1})^2 + x_2^2 \right] - x_1 \right)$$

$$= \frac{L}{4} \left( \frac{1}{2} x^\top A_k x - e_1^\top x \right) \text{ mit } A_k \in \mathbb{R}^{n \times n}, A_k = \left( \begin{array}{cccc|c} 2 & -1 & & & 0 \\ -1 & \ddots & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & -1 & \\ & & -1 & 2 & \\ \hline 0 & & & & 0 \end{array} \right) \left. \vphantom{\begin{pmatrix} 2 & -1 & & & 0 \\ -1 & \ddots & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & -1 & \\ & & -1 & 2 & \\ \hline 0 & & & & 0 \end{pmatrix}} \right\} k \text{ Zeilen}$$

#### Eigenschaften dieser Funktion

- $f_k''(x) = \frac{L}{4} A_k$
- $s^\top f_k''(x) s \geq 0 \quad \forall s$ , denn  $f_k''(x)$  ist positiv semidefinit
- $s^\top f_k''(x) s \leq L \|s\|_2^2$

## 5. Untere Schranken für das Gradientenverfahren

Daraus folgt  $LI_n \geq f_k''(x)$  und somit ist  $f_k \in \mathcal{F}_L^{\infty,1}$ .

Für das Optimum von  $f_k$  muss gelten  $f_k'(x^*) = 0 = \frac{L}{4}(A_k x - e_1)$ .

Es gibt eine Lösung  $x^* \in \mathbb{R}^n$  mit

$$x_i^* = \begin{cases} 1 - \frac{i}{k+1} & \text{für } i = 1, \dots, k \\ 0 & \text{für } i = k+1, \dots, n \end{cases}$$

Damit ergibt sich der optimale Funktionswert zu

$$\begin{aligned} f^* = f_k(x^*) &= \frac{L}{4} \left( \frac{1}{2} (x^*)^\top A_k x^* - e_1^\top x^* \right) \\ &= \frac{L}{4} \left( \frac{1}{2} (x^*)^\top \underbrace{(A_k x^* - e_1)}_{=0} - \frac{1}{2} e_1^\top x^* \right) \\ &= \frac{L}{4} \left( -\frac{1}{2} e_1^\top x^* \right) \\ &= -\frac{L}{8} x_1^* \\ &= -\frac{L}{8} \left( 1 - \frac{1}{k+1} \right). \end{aligned}$$

Mit der Abschätzung  $\sum_{i=1}^k i^2 = \frac{k(k+1)(2k+1)}{6} \leq \frac{(k+1)^3}{3}$  folgt nun:

$$\begin{aligned} \|x\|^2 &= \sum_{i=1}^n (x_i^*)^2 \\ &\leq \sum_{i=1}^k (x_i^*)^2 \\ &= \sum_{i=1}^k \left( 1 - \frac{i}{k+1} \right)^2 \\ &= k - \frac{2}{k+1} \sum_{i=1}^k i + \frac{1}{(k+1)^2} \sum_{i=1}^k i^2 \\ &\leq k - \frac{2}{k+1} \cdot \frac{k(k+1)}{2} + \frac{1}{(k+1)^2} \cdot \frac{(k+1)^3}{3} \\ &= \frac{k+1}{3}. \end{aligned}$$

**Definition 5.2.** Sei  $\mathbb{R}^{k,n} = \{x \in \mathbb{R}^n \mid x_i = 0, k+1 \leq i \leq n\}$  der Teilraum des  $\mathbb{R}^n$ , bei dem die ersten  $k$  Komponenten  $\neq 0$  sein können.  $\diamond$

Es gilt für alle  $x \in \mathbb{R}^{k,n}$ , dass  $f_p(x) = f_k(x)$  für  $p = k, \dots, n$  (da  $x_p = 0$  für  $p < k$ ).

Sei nun  $p$  fest mit  $1 \leq p \leq n$ .

**Lemma 5.3.** Sei  $x^{(0)} = 0$ . Dann gilt für jede Folge  $\{x^{(k)}\}_{k=0}^p$  mit

$$x^{(k)} \in \mathbf{L}_k = x^{(0)} + \text{span}\{f'(x^{(0)}), f'(x^{(1)}), \dots, f'(x^{(k-1)})\}$$

dass  $\mathbf{L}_k \subseteq \mathbb{R}^{k,n}$ . ◇

*Beweis.* (per Induktion über k)

IA: Wegen  $x^{(0)} = 0$  gilt  $f'_p(x^{(0)}) = -\frac{L}{4}e_1 \in \mathbb{R}^{1,n}$ . Daraus folgt  $\mathbf{L}_1 \subseteq \mathbb{R}^{1,n}$ .

IV: Sei  $\mathbf{L}_k \subseteq \mathbb{R}^{k,n}$  für  $k \leq p$ .

IB: Es gelte  $\mathbf{L}_{k+1} \subseteq \mathbb{R}^{k+1,n}$  für  $k \leq p$ .

IS: Da  $A_k$  tridiagonal ist, gilt für jedes  $x \in \mathbb{R}^{k,n}$  dass  $f'_p(x) \in \mathbb{R}^{k+1,n}$ . Daraus folgt  $\mathbf{L}_{k+1} \subseteq \mathbb{R}^{k+1,n}$ . □

**Lemma 5.4.** Für jede Folge  $\{x^{(k)}\}_{k=0}^p$  mit  $x^{(0)} = 0$  und  $x^{(k)} \in \mathbf{L}_k$  gilt:

$$f_p(x^{(k)}) \geq f_k^*.$$

◇

*Beweis.* Aus  $x^{(k)} \in \mathbf{L}_k$  folgt  $f_p(x^{(k)}) = f_k(x^{(k)}) \geq f_k^*$ . □

**Theorem 5.5.** Für jedes  $k$  mit  $1 \leq k \leq \frac{1}{2}(n-1)$  und jedes  $x^{(0)} \in \mathbb{R}^n$  existiert eine Funktion  $f \in \mathcal{F}_L^{\infty,1}$ , so dass für jede iterative Methode 1. Ordnung gilt:

$$\begin{aligned} f(x^{(k)}) - f^* &\geq \frac{3L \|x^* - x^{(0)}\|^2}{32(k+1)^2} \\ \|x^{(k)} - x^*\|^2 &\geq \frac{1}{8} \|x^* - x^{(0)}\|^2, \end{aligned}$$

wobei  $x^*$  das Minimum von  $f(x)$  und  $f^* = f(x^*)$  ist. ◇

*Beweis.* Offensichtlich sind Methoden dieses Typs invariant unter Verschiebung.

Wähle o.B.d.A.  $x^{(0)} = 0 \in \mathbb{R}^n$ . Sei  $k$  fest gewählt. Es wird nun der Algorithmus angewandt auf:

$$\begin{aligned} f(x) &= f_{2k+1}(x) \\ x^* &= x_{2k+1}^* \\ f^* &= f_{2k+1}^* \end{aligned}$$

Aus vorherigem Lemma folgt:

$$f(x^{(k)}) = f_{2k+1}(x^{(k)}) = f_k(x^{(k)}) \geq f_k^*.$$

## 5. Untere Schranken für das Gradientenverfahren

Wegen  $x^{(0)} = 0$  folgt:

$$\frac{f(x^{(k)}) - f^*}{\|x^{(0)} - x^*\|^2} \geq \frac{\frac{L}{8}(-1 + \frac{1}{k+1} + 1 - \frac{1}{2k+2})}{\frac{1}{3}(2k+2)} = \frac{\frac{L}{8} \cdot \frac{1}{2}(\frac{1}{k+1})}{\frac{2}{3}(k+1)} = \frac{3L}{32(k+1)^2}$$

2. Ungleichung:

$$\begin{aligned} \|x^{(0)} - x^*\|^2 &\geq \sum_{i=k+1}^{2k+1} (x_i)^2 = \sum_{i=k+1}^{2k+1} \left(1 - \frac{i}{2k+2}\right)^2 \\ &= k+1 - \frac{1}{k+1} \cdot \sum_{i=k+1}^{2k+1} i + \frac{1}{4(k+1)^2} \sum_{i=k+1}^{2k+1} i^2. \end{aligned}$$

Es gilt:

$$\begin{aligned} \sum_{i=k+1}^{2k+1} i^2 &= \frac{1}{6}((2k+1)(2k+2)(4k+3) - k(k+1)(2k+1)) \\ &= \frac{1}{6}((2k+1)(k+1)(2(4k+3) - k)) \\ &= \frac{1}{6}(2k+1)(k+1)(7k+6). \end{aligned}$$

Damit ergibt sich

$$\begin{aligned} \|x^{(k)} - x^*\|^2 &\geq k+1 - \frac{1}{k+1} \frac{(3k+2)(k+1)}{2} + \frac{1}{24(k+1)^2} \cdot (2k+1)(k+1)(7k+6) \\ &= k+1 - \frac{3k+2}{2} + \frac{(2k+1)(7k+6)}{24(k+1)} \\ &= \frac{2k+1)(7k+6)}{24(k+1)} - \frac{k}{2} \\ &= \frac{(2k+1)(7k+6) - 12(k+1)k}{24(k+1)} \\ &= \frac{14k^2 + 12k + 7k + 6 - 12k^2 - 12k}{24(k+1)} \\ &= \frac{2k^2 + 7k + 6}{24(k+1)} \\ &\geq \frac{2k^2 + 7k + 6}{16(k+1)^2} \|x^{(k)} - x^*\|^2 \\ &\geq \frac{1}{8} \|x^{(0)} - x^*\|^2. \end{aligned}$$

□



*Bemerkung 5.6.* Die Schritte sind nur gültig, solange  $k \leq \frac{1}{2}(n-1)$  gilt (wobei  $n$  die Dimension ist). Komplexitätsschranken von diesem Typ heißen uniform in der Dimension der Variablen. Sie geben Informationen darüber, wie schnell ein Gradientenverfahren bei großen Problemen konvergiert. Aber: ohne endlichdimensionale Argumente gibt es keine Verbesserung.  $\diamond$

*Bemerkung 5.7.* Die Konvergenz zum optimalen Punkt kann beliebig langsam sein. Dies behebt man mit der Funktionsklasse  $\mathcal{S}$  der gleichmäßig konvexen Funktionen.  $\diamond$

## 5.2. Untere Schranken für $\mathcal{S}_{\mu,L}^{\infty,1}$

*Modell:*

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n}; f \in \mathcal{S}_{\mu,L}^{\infty,1}, \mu > 0$$

*Orakel:* Orakel 1. Ordnung ( $f(x)$  und  $f'(x)$  sind gegeben).  
*approximative Lösung  $\bar{x}$ :*

$$\begin{aligned} f(\bar{x}) - f^* &\leq \varepsilon \\ \|\bar{x} - x^*\|^2 &\leq \varepsilon \end{aligned}$$

Wir haben bisher keine Annahme über die Dimension  $n$  des Definitionsbereichs von  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  getroffen. Da das einfacher geht, betrachten wir jetzt den unendlich-dimensionalen Definitionsbereich  $\mathbb{R}^\infty$ .

Erinnerung:  $\mathbb{R}^\infty \equiv l_2$  ist der Raum aller Folgen  $\{x_i\}_{i=1}^\infty$  mit endlicher Norm, d.h.

$$\|x\|^2 = \sum_{i=1}^{\infty} x_i^2 < \infty.$$

Sei  $\mu > 0$  und  $L > \mu$  gegeben, d.h.  $Q_f = \frac{L}{\mu} > 1$ .

$$\begin{aligned} f_{\mu,Q_f} &= \frac{\mu(Q_f - 1)}{8} (x^\top A x - 2e_1^\top x) + \frac{\mu}{2} \|x\|^2 \quad \text{mit } A = \begin{pmatrix} 2 & -1 & \\ -1 & \ddots & \ddots \\ & \ddots & \ddots \end{pmatrix} \\ f''(x) &= \frac{\mu(Q_f - 1)}{4} \cdot A + \mu \cdot I, \end{aligned}$$

wobei  $I$  der 1-Operator im  $\mathbb{R}^\infty$  ist.

Es gilt

$$4I \succeq A \succeq 0$$

und damit folgt

$$\mu Q_f I = (\mu(Q_f - 1) + \mu) I \succeq f''(x) \succeq \mu I \implies f \in \mathcal{S}_{\mu,\mu Q_f}^{\infty,1}$$

## 5. Untere Schranken für das Gradientenverfahren

Die Kondition von  $f$  ist dann  $\frac{\mu \cdot Q_f}{\mu} = Q_f$ .

Wir wollen nun das Minimum  $x^*$  bestimmen, es muss also gelten:

$$\begin{aligned}\nabla f_{\mu, Q_f}(x) &= \left( \frac{\mu(Q_f - 1)}{4} A + \mu I \right) x - \frac{\mu(Q_f - 1)}{4} e_1 \stackrel{!}{=} 0 \\ &\Leftrightarrow \left( A + \frac{4}{Q_f - 1} \right) x \stackrel{!}{=} e_1.\end{aligned}$$

In Koordinatenschreibweise:

$$\begin{aligned}2 \frac{Q_f + 1}{Q_f - 1} x_1 - x_2 &= 1 \\ 2_{k+1} - 2 \frac{Q_f + 1}{Q_f - 1} x_k + x_{k-1} &= 0 \quad \text{für } k = 2, 3, \dots\end{aligned}$$

**Theorem 5.8.** Für jedes  $x^{(0)} \in \mathbb{R}^\infty$  und jede Konstante  $\mu > 0$  und  $Q_f > 1$  existiert eine Funktion  $f \in \mathcal{S}_{\mu, \mu Q_f}^{\infty, 1}$ , sodass für jedes iterative Optimierungsverfahren, welches die obige Annahme erfüllt, gilt:

$$\begin{aligned}\|x^{(k)} - x^*\|^2 &\geq \left( \frac{\sqrt{Q_f} - 1}{\sqrt{Q_f} + 1} \right)^{2k} \|x^{(0)} - x^*\|^2 \\ f(x^{(k)}) - f(x^*) &\geq \frac{\mu}{2} \left( \frac{\sqrt{Q_f} - 1}{\sqrt{Q_f} + 1} \right)^{2k} \|x^{(0)} - x^*\|^2,\end{aligned}$$

wobei  $x^*$  das Minimum von  $f$  ist. ◇

*Beweis.* (entfällt.) □

**Bemerkung 5.9.** Für gleichmäßig konvexe Funktionen stimmt diese untere Schranke mit dem Gradientenverfahren überein. ◇

## 5.3. Optimale Methoden für das Gradientenverfahren (Nesterov 1983)

- Das Standard-Gradientenverfahren ist nicht optimal.
- Das Standard-Gradientenverfahren will immer die größte Reduktion pro Iteration („greedy“), was häufig nicht die beste Methode ist.

### 5.3.1. Nesterov's Accelerated Gradient Method (NAGM)

1. Starte mit  $x^{(0)} \in \mathbb{R}^n$ ,  $\alpha_0 \in (0, 1)$ , sei  $y^{(0)} = x^{(0)}$ ,  $q = \frac{\mu}{L}$
2. In der  $k$ -ten Iteration:

### 5.3. Optimale Methoden für das Gradientenverfahren (Nesterov 1983)

- Berechne  $x^{(k+1)} = y^{(k)} - \frac{1}{L} \nabla f(y^{(k)})$
- Berechne  $\alpha_{k+1} \in (0, 1)$  als Lösung der Gleichung

$$\alpha_{(k+1)}^2 = (1 - \alpha_{k+1})\alpha_k^2 + q\alpha_{k+1}$$

- Setze  $\beta_k = \frac{\alpha_k(1-\alpha_k)}{\alpha_k^2 + \alpha_{k+1}}$
- $y^{(k+1)} = x^{(k+1)} + \beta_k(x^{(k+1)} - x^{(k)})$

**Theorem 5.10.** Für  $\alpha_0 \in (0, 1)$  und  $\alpha_0^2 L = (1 - \alpha_0)L + \alpha_0 \mu$  generiert NAGM eine Folge  $\{x^{(k)}\}$  mit

$$f(x^{(k)}) - f(x^*) \leq L \cdot \min \left\{ \underbrace{\left(1 - \sqrt{\frac{\mu}{L}}\right)^k}_{c^k \rightarrow \log(\frac{1}{\varepsilon})}, \underbrace{\frac{4}{(k+2)^2}}_{\frac{1}{k^2} \rightarrow \frac{1}{\varepsilon}} \right\} \|x^{(0)} - x^*\|^2.$$

◇

*Beweis.* (entfällt.)

□



## 6. NEWTON-Verfahren

### 6.1. Das NEWTON-Verfahren

NEWTON-Richtung  $d^{(k)} = -f''(x^{(k)})^{-1} \nabla f(x^{(k)})$  nicht so berechnen! Sondern über Gleichungssystem!

$$\begin{aligned} -A^{-1} \nabla f(x^{(k)}) \\ A = f''(x^{(k)}) \end{aligned}$$

→ Das zu lösende Gleichungssystem ist linear (im Gegensatz zu dem ursprünglichen nicht-linearen von dem NEWTON-Verfahren).

$$Ax = b \xrightarrow{\text{in Matlab}} x = A \backslash b \text{ (LU-Faktorisierung)}$$

$$d^{(k)} = -f''(x^{(k)})^{-1} \nabla f(x^{(k)})$$

$f''(x^{(k)})$  positiv definit  $\Rightarrow f''(x^{(k)})^{-1}$  positiv definit  $\Rightarrow d^T f''(x^{(k)})^{-1} d > 0 \quad \forall d \in \mathbb{R}^n$   
Eigenwerte  $\lambda_1, \dots, \lambda_n > 0$ , Eigenwerte  $\frac{1}{\lambda_1}, \dots, \frac{1}{\lambda_n} > 0$

**Beispiel 6.1.** Newtonschritt

$$\min f(x) = \frac{1}{2} x^T \begin{pmatrix} 4 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} x + \begin{pmatrix} -4 \\ -2 \end{pmatrix}^T x + 3, \quad \text{Startpunkt: } x^{(0)} = \begin{pmatrix} 4 \\ 4 \end{pmatrix}$$

$$\nabla f(x) = \begin{pmatrix} 4 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} x + \begin{pmatrix} -4 \\ -2 \end{pmatrix}$$

$$f''(x) = \begin{pmatrix} 4 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} \rightsquigarrow f''(x)^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

1. Ist der Gradient schon 0?

$$\nabla f(x^{(0)}) = \begin{pmatrix} 4 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 4 \\ 4 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -4 \\ -2 \end{pmatrix} = \frac{12}{6} + 0_2 \rightarrow \text{nein!}$$

2. Berechne  $d$  und  $x$

$$d^{(0)} = -f''(x^{(0)})^{-1} \nabla f(x^{(0)}) = -\begin{pmatrix} \frac{1}{4} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 12 \\ 6 \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} 3 \\ 3 \end{pmatrix}$$

$$x^{(1)} = x^{(0)} + d^{(0)} = \begin{pmatrix} 4 \\ 4 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 3 \\ 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

## 6. NEWTON-Verfahren

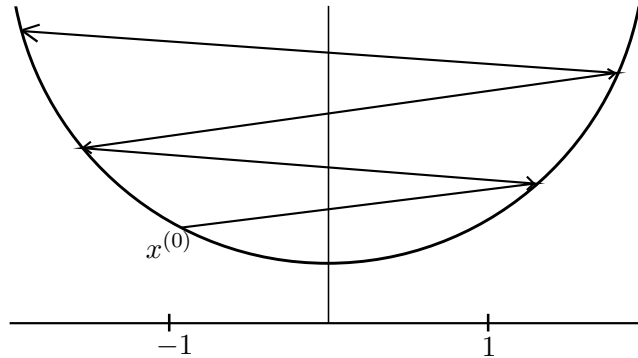
### 3. Gradient 0?

$$\nabla f(x^{(1)}) = \begin{pmatrix} 4 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -4 \\ -2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \checkmark$$

→ NEWTON-Verfahren konvergiert nach einem Schritt für quadratische Probleme.

◇

NEWTON-Verfahren muss gedämpft werden, weil volle Schritte teilweise in die falsche Richtung gehen könnten (z. B. bei  $f(x) = \sqrt{1+x}$ ):



## 6.2. Das gedämpfte NEWTON-Verfahren

1. Wähle Startpunkt  $x^{(0)} \in \mathbb{R}^n, k := 0$
2. Ist  $\nabla f(x^{(k)}) = 0_n \rightarrow \text{Stop}$
3. Berechne die NEWTON-Richtung  $d^{(k)} = -f''(x^{(k)})^{-1} \nabla f(x^{(k)})$ , eine effiziente Schrittweite  $\sigma_k$  (z. B. ARMIJO) und setze  $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \sigma_k d^{(k)}$
4. Setze  $k := 1$  und gehe zu 2.

*Bemerkung 6.2.*  $d^{(k)} = -A^{-1} \nabla f(x^{(k)})$

Gradientenverfahren:  $A = I_n$

NEWTON-Verfahren:  $A = f''(x^{(k)})$

◇

### 6.2.1. Konvergenz des gedämpften NEWTON-Verfahrens

- $f$  sei gleichmäßig konvex und zweimal stetig differenzierbar
- $\nabla f$  sei LIPSCHITZ-stetig mit Konstante  $L$
- Konvexitätsparameter  $\mu$
- $f''(x)$  sei LIPSCHITZ-stetig mit Konstante  $M$ , d. h.,

$$\|f''(x) - f''(y)\|_F \leq M \cdot \|x - y\|_2 \quad \forall x, y$$

$$\|A\|_F := \sum_{i,j} |A_{ij}|^2 \text{ (FROBENIUS-Norm)}$$

**Theorem 6.3.**

$$f(x^{(k)}) - f(x^*) \leq \begin{cases} f(x^{(0)}) - f(x^*) - \gamma \cdot k & \text{für } k \leq k_0 \\ \frac{2\mu^3}{M^2} \left(\frac{1}{2}\right)^{2^{k-k_0+1}} & \text{für } k > k_0 \end{cases}$$

Seien  $\delta, \beta$  die ARMIJO-Parameter, dann  $\gamma = \frac{\delta \cdot \beta^2 \cdot \eta^2 \cdot \mu}{L^2}$ ,  $\eta = \min\{1, 3 \cdot (1 - 2 \cdot \delta)\} \cdot \frac{\mu^2}{M}$  und  $k_0$  ist die Anzahl der Iterationen bis  $\|\nabla f(x^{(k_0+1)})\| < \eta$ .  $\diamond$

Gegeben sind  $\gamma > 0$ ,  $0 < \eta \leq \frac{\mu}{M^2}$ . Das gedämpfte NEWTON-Verfahren konvergiert in zwei Phasen:

1. Gedämpfte Phase:  $\|\nabla f(x^{(k)})\| \geq \eta$  und  $f(x^{(k+1)}) - f(x^{(k)}) \leq -\gamma$

ARMIJO-Verfahren wählt hier typischerweise eine Schrittweite, die kleiner als 1 ist („gedämpft“).

2. Reine NEWTON-Phase:  $\|\nabla f(x^{(k)})\| < \eta$  und  $\frac{M}{2\mu^2} \|\nabla f(x^{(k+1)})\| \leq \left(\frac{M}{2\mu^2} \|\nabla f(x^{(k)})\|\right)^2$

ARMIJO-Verfahren wird sofort mit Schrittweite 1 stoppen („reine“ NEWTON-Phase). Sobald diese Phase erreicht ist, wird sie nicht mehr verlassen.

Mit  $\eta \leq \frac{\mu}{M^2}$  gilt  $\frac{2\mu^2}{M} \cdot \left(\frac{M}{2\mu^2} \cdot \eta\right)^2 < \eta \Rightarrow \|\nabla f(x^{(k+1)})\| < \eta$ .

Wir wollen  $f(x^{(k)}) - f(x^*) \leq \epsilon$  erreichen. Dazu benötigt man

$$\frac{f(x^{(0)}) - f(x^*)}{\gamma} + \log \left( \log \left( \frac{\epsilon_0}{\epsilon} \right) \right) \text{ Iterationen.}$$

Um in die reine NEWTON-Phase zu kommen, werden höchstens  $\frac{f(x^{(0)}) - f(x^*)}{\gamma}$  Iterationen benötigt.

In der reinen NEWTON-Phase ist die Konvergenzrate  $\log(\log(\frac{\epsilon_0}{\epsilon}))$ , mit  $\epsilon_0 = \frac{2\mu^3}{M^2} \cdot \mathcal{O}(\log(\log(\frac{1}{\epsilon})))$  heißt quadratische Konvergenz (nur lokal). Zur Erinnerung: Das Gradientenverfahren hat eine lineare Konvergenz mit  $\mathcal{O}(\log(\frac{1}{\epsilon}))$ .

Implementierungshinweise:

- Gleichungssystem lösen (in GNU Octave und Matlab löst  $A \backslash b$  die Gleichung  $Ax = b$ ) anstatt die Matrix zu invertieren.
- Startschrittweite  $\sigma_0 = 1$  wählen.
- $d^{(k)} = -f''(x^{(k)})^{-1} \nabla f(x^{(k)})$  ist eine Abstiegsrichtung, wenn  $H := f''(x^{(k)})$  positiv definit ist. In der Implementierung sollte daher  $H + \gamma \cdot I_n$  mit z. B.  $\gamma = 10^{-5}$  verwendet werden, was numerisch stabiler ist, da negative Eigenwerte in der HESSE-Matrix verhindert werden. Gggf. kann das Verfahren dadurch eine (oder mehr) Iterationen länger brauchen, da es nicht mehr genau das NEWTON-Verfahren ist.

## 6. NEWTON-Verfahren

	NEWTON-Verfahren	Gradientenverfahren
Speicher	$\mathcal{O}(n^2)$ ( $n \times n$ HESSE-Matrix)	$\mathcal{O}(n)$ ( $n$ -dimensionaler Gradient)
Berechnungen	$\mathcal{O}(n^3)$ (lineares Gleichungssystem lösen, dicht besetzt)	$\mathcal{O}(n)$ (skalieren & addieren von $n$ -dimensionalen Vektoren)
ARMJO-Verfahren	$\mathcal{O}(n)$	$\mathcal{O}(n)$
Konditionierung	unabhängig von Kondition (zumindest Lokal)	kann stark beeinträchtigen
Stabilität	„etwas anfälliger“	robust

Tabelle 6.1.: Vergleich zwischen NEWTON-Verfahren & Gradientenverfahren

### 6.2.2. Vergleich des gedämpften NEWTON-Verfahrens mit dem Gradientenverfahren

Ziel ist es, den Aufwand aus den Berechnungen der HESSE-Matrizen zu reduzieren.

**Satz 6.4.** Sei  $A$  eine reelle  $n \times n$  Matrix, symmetrisch und positiv definit. Dann wird durch

$$\langle x, y \rangle_A = x^T A y \quad \forall x, y \in \mathbb{R}^n$$

ein Skalarprodukt definiert, und durch

$$\|x\|_A = \sqrt{\langle x, x \rangle_A} = \sqrt{x^T A x} \quad \forall x \in \mathbb{R}^n$$

eine Norm auf  $\mathbb{R}^n$  definiert. Ungleichung von CAUCHY-SCHWARZ:  $\langle x, y \rangle_A \leq \|x\|_A \cdot \|y\|_A$ .  $\diamond$

Wir betrachten folgendes Problem:

$$\begin{aligned} \min_{d \in \mathbb{R}^n} \quad & \nabla f(x)^T d \\ \text{s. t.} \quad & \|d\|_A = 1 \end{aligned} \quad (6.1)$$

**Lemma 6.5.** Sei  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  differenzierbar in  $x$  mit  $\nabla f(x) \neq 0_n$ , und  $A$  eine symmetrische, positiv definite  $n \times n$ -Matrix. Dann ist

$$\bar{d} = - \frac{A^{-1} \nabla f(x)}{\|A^{-1} \nabla f(x)\|_A}$$

Lösung von Gleichung 6.1.  $\diamond$

*Beweis.* Für  $d \in \mathbb{R}^n$  gilt

$$\begin{aligned} \nabla f(x)^T d &= \nabla f(x)^T \underbrace{A^{-1} A}_{=I} d = \langle A^{-1} \nabla f(x), A d \rangle \\ &= \langle A^{-1} \nabla f(x), d \rangle_A \\ &\stackrel{\text{CAUCHY-SCHWARZ}}{\geq} - \|A^{-1} \nabla f(x)\|_A \cdot \|d\|_A \end{aligned} \quad (6.2)$$

Daher gilt für  $\|d\|_A = 1$ :  $\nabla f(x)^T d \geq - \|A^{-1} \nabla f(x)\|_A$ .

Speziell für  $\bar{d}$  gilt:  $\nabla f(x)^T \bar{d} = \dots = - \|A^{-1} \nabla f(x)\|_A$ .  $\square$



NEWTON-Verfahren: Setze  $A = f''(x)$ . Im Gegensatz zum Gradientenverfahren wird in jeder Iteration eine andere Norm (Metrik) zur Bestimmung des steilsten Abstiegs verwendet. Das gedämpfte NEWTON-Verfahren zählt daher zur Klasse der *Variable-Metrik-Verfahren*

### 6.3. Das Quasi-Newton-Verfahren

Quasi-Newton-Verfahren nutzen Suchrichtungen vom Typ

$$d^{(k)} = -(A^{(k)})^{-1} \nabla f(x^{(k)})$$

Diese Richtungen sind Abstiegsrichtungen wenn  $A^{(k)}$  positiv definit ist. Laut Lemma 6.5 sind dies die Richtungen des steilsten Abstiegs bezüglich der durch  $A^{(k)}$  definierten Norm. Verfahren, die eine solche Suchrichtung verwenden heißen Variable-Metrik-Verfahren. Wir wollen die Schwierigkeit umgehen,  $f''(x)$  zu berechnen und trotzdem noch „schnell“ konvergieren. Dazu konstruieren wir ausgehend von einer beliebigen symmetrischen, positiv definiten Matrix  $A^{(0)}$  eine Folge  $\{A^{(k)}\}$  symmetrischer, positiver definiter Matrizen mit den folgenden Eigenschaften:

1.  $A^{(k)}$  soll eine Approximation von  $f''(x)$  sein.
2. Der Übergang  $A^{(k)} \rightarrow A^{(k+1)}$  soll möglichst einfach sein.

Als Ausgangspunkt dient das Newton-Verfahren hier gilt:

$$A^{(k)} = f''(x^{(k)})$$

$$\Rightarrow \nabla f_{k+1}(x^{(k)}) = \nabla f(x^{(k+1)}) + A^{(k+1)} \cdot (x^{(k)} - x^{(k+1)}) \stackrel{Taylor}{\approx} \nabla f(x^{(k)}) \quad (*)$$

Also wählen wir  $A^{(k+1)}$  so, dass:

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

$$\stackrel{*}{\Rightarrow} A^{(k+1)} \cdot (x^{(k+1)} - x^{(k)}) = \nabla f(x^{(k+1)}) - \nabla f(x^{(k)}) \quad (6.3)$$

die sogenannte **Quasi-Newton-Gleichung**.

### 6.4. Das BFGS-Verfahren

In der Praxis hat sich die BFGS-Updateformel für  $A^{(k)}$  am besten bewährt, welche unabhängig von Broyden, Fletcher, Goldfarb und Shanno entwickelt wurde.

**Herleitung der BFGS-Updateformel:** Sei

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

## 6. NEWTON-Verfahren

Start mit  $A^{(0)}$  symmetrisch, positiv definit (bspw.  $A^{(0)} = I_n$ ).

Zuerst berechnet man:

$$\tilde{A}^{(k)} = A^{(k)} - \frac{\overbrace{A^{(k)} s^{(k)} \cdot (A^{(k)} s^{(k)})^T}^{\text{dyadisches Produkt}}}{(s^{(k)})^T A^{(k)} s^{(k)}}$$

Dann gilt:

$$\tilde{A}^{(k)} s^{(k)} = A^{(k)} s^{(k)} - \frac{A^{(k)} s^{(k)} \cdot \cancel{s^{(k)}} (\cancel{A^{(k)}} \cancel{s^{(k)}})^T}{(\cancel{s^{(k)}})^T \cancel{A^{(k)}} \cancel{s^{(k)}}} = A^{(k)} s^{(k)} - A^{(k)} s^{(k)} = 0$$

Falls  $A^{(k)}$  symmetrisch und positiv definit ist, ist  $\tilde{A}^{(k)}$  symmetrisch und positiv semidefinit. Die Matrix  $\tilde{A}^{(k)} - A^{(k)}$  ist symmetrisch und

$$\text{Rang}(A^{(k)} s^{(k)} \cdot (A^{(k)} s^{(k)})^T) = 1$$

da der Rang des dyadischen Produktes stets 1 ist. Daher der Name *symmetrische Rang-1-Modifikation*. Danach erfolgt eine zweite symmetrische Rang-1-Modifikation mit:

$$A^{(k+1)} = \tilde{A}^{(k)} + \gamma_k \cdot w^{(k)} \cdot (w^{(k)})^T \text{ mit } \gamma_k \in \mathbb{R}, w^{(k)} \in \mathbb{R}^n$$

Ziel:  $A^{(k+1)}$  soll positiv definit sein und die Quasi-Newton-Gleichung erfüllen:

$$A^{(k+1)} s^{(k)} = y^{(k)}$$

Es muss wegen  $\tilde{A}^{(k)} s^{(k)} = 0$  gelten:

$$A^{(k+1)} s^{(k)} = \gamma_k \cdot w^{(k)} \cdot (w^{(k)})^T \cdot s^{(k)} = y^{(k)}$$

Wir wählen dazu:

$$w^{(k)} = y^{(k)}, \gamma_k = \frac{1}{(y^{(k)})^T s^{(k)}}$$

Damit  $A^{(k+1)}$  positiv definit ist, muss für die Richtung  $s^{(k)}$  gelten: ( $\leadsto$  bleibt als Voraussetzung)

$$(s^{(k)})^T A^{(k+1)} s^{(k)} = (y^{(k)})^T s^{(k)} > 0 \quad (6.4)$$

### Beispiel 6.6. Voraussetzung bei quadratischen Problemen

Sei  $f$  eine quadratische Funktion,  $Q$  positiv definit, also  $f(x) = \frac{1}{2} x^T Q x + q^T x + c$

$$\begin{aligned} (y^{(k)})^T s^{(k)} &= (\nabla f(x^{(k+1)}) - \nabla f(x^{(k)}))^T (x^{(k+1)} - x^{(k)}) \\ &= (Q x^{(k+1)} + q - Q x^{(k)} - q)^T (x^{(k+1)} - x^{(k)}) \\ &= (x^{(k+1)} - x^{(k)})^T Q (x^{(k+1)} - x^{(k)}) \stackrel{Q \text{ pos. def.}}{>} 0 \end{aligned}$$

◇

Das heißt obige Bedingung ist bei allen quadratischen Funktion erfüllt. Allgemeiner gilt dies auch für jede gleichmäßig konvex Funktion. (ohne Beweis)

Variable-Metrik-Verfahren, bei denen in jedem Iterationsschritt die Quasi-Newton-Gleichung erfüllt ist, heißen *Quasi-Newton-Verfahren*.

Ist  $f$  zweimal stetig differenzierbar, so folgt:

$$A^{(k+1)} \cdot (x^{(k)} - x^{(k+1)}) = f''(x^{(k)} + \theta(x^{(k+1)} - x^{(k)})) \cdot (x^{(k+1)} - x^{(k)})$$

mit  $0 < \theta < 1$ , d. h., in Richtung  $x^{(k+1)} - x^{(k)}$  verhält sich  $A^{(k+1)}$  ungefähr wie  $f''(x^{(k+1)})$ . Daher enthält  $A^{(k+1)}$  Informationen über die Krümmung von  $f$  in  $x^{(k+1)}$ , die in die Berechnung der folgenden Suchrichtung einfließen.

### Zusammenfassung:

- Durch die Quasi-Newton-Gleichung ist  $A^{(k+1)}$  nicht eindeutig bestimmt
- In der Praxis hat sich die BFGS-Updateformel am besten bewährt
- Beim BFGS-Verfahren berechnet man  $A^{(k+1)}$  durch zwei symmetrische Rang-1-Modifikationen von  $A^{(k)}$

### BFGS-Update-Formel: (Rang-2-Modifikation)

$$A^{(k+1)} = A^{(k)} - \underbrace{\frac{A^{(k)} s^{(k)} \cdot (A^{(k)} s^{(k)})^T}{(s^{(k)})^T A^{(k)} s^{(k)}}}_{\text{Rang-1-Modifikation}} + \underbrace{\frac{y^{(k)} (y^{(k)})^T}{(y^{(k)})^T s^{(k)}}}_{\text{Rang-1-Modifikation}} \quad (6.5)$$

### Das BFGS-Verfahren:

- Wähle Startpunkt  $x^{(0)} \in \mathbb{R}^n$ ,  $A^{(0)}$  symmetrisch, positiv definit,  $k := 0$
- Ist  $\nabla f(x^{(k)}) = 0_n \rightarrow \text{Stop}$
- Berechne die Matrix  $A^{(k)}$  nach dem BFGS-Update (für  $k \geq 1$ ), die Suchrichtung  $d^{(k)}$  durch lösen des linearen Gleichungssystems  $A^{(k)} = -\nabla f(x^{(k)})$ , die exakte Schrittweite (bei quadratischen Problemen):

$$\sigma_k = -\frac{(\nabla f(x^{(k)}))^T d^{(k)}}{(d^{(k)})^T Q d^{(k)}}$$

oder bspw. die Armijo-Schrittweite sonst und setze  $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \sigma_k d^{(k)}$

- Setze  $k = k + 1$ .



## 7. Nichtglatte Optimierung

### 7.1. Einleitung

Wir betrachten weiter Probleme der Form

$$\min_{f \in \mathbb{R}^n} f(x) \quad (7.1)$$

wobei  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  konvex ist, aber nicht zwingend differenzierbar.

**Beispiel 7.1** (Lineare Regression). Bisher haben wir uns die quadrierte L2-Norm betrachtet:

$$\min_{x_1, x_2} \sum_{i=1}^m (x_1 \xi_i + x_2 + \eta_i)^2. \quad (7.2)$$

Diese wird nun durch die Summe der Fehlerbeträge (L1-Norm) ersetzt:

$$\min_{x_1, x_2} \sum_{i=1}^m \underbrace{|x_1 \xi_i + x_2 + \eta_i|}_{=: f_1(x_1, x_2)}. \quad (7.3)$$

Ein weiteres Beispiel ist es die maximale Abweichung zu minimieren ( $L^\infty$ -Norm):

$$\min_{x_1, x_2} \max_{i=1, \dots, m} \underbrace{|x_1 \xi_i + x_2 + \eta_i|}_{=: f_\infty(x_1, x_2)}. \quad (7.4)$$

Sowohl  $f_1$  als auch  $f_\infty$  sind konvexe Funktionen, die jedoch nicht überall differenzierbar sind.  $\diamond$

**Satz 7.2.** Sei  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  eine konvexe Funktionen. Dann ist  $f$  fast überall (bis auf Lebesgue-Nullmengen) differenzierbar. In der konvexen Optimierung nennt man fast überall differenzierbare Funktionen **nicht glatt**.  $\diamond$

Aufgrund dieses Satzes könnte man vermuten, dass Verfahren für differenzierbare Zielfunktionen im allgemeinen konvexen Fall funktionieren. Dies ist jedoch in der Regel nicht richtig.

### 7.2. Probleme

Die theoretischen Voraussetzungen für die Konvergenz sind nicht erfüllt. Weiter ist das Abbruchkriterium  $\nabla f(x) = 0_n$  nicht anwendbar.

## 7. Nichtglatte Optimierung

**Beispiel 7.3** (Wolfe-Funktion).

$$f(x_1, x_2) = \begin{cases} 5 \cdot \sqrt{9x_1^2 + 16x_2^2} & , x_1 \geq |x_2| \\ 9x_1 + 16|x_2| & , 0 < x_1 < |x_2| \\ 9x_1 + 16|x_2| - x_1^9 & , x_1 \leq 0 \end{cases} \quad (7.5)$$

Die Funktion ist konvex und stetig, aber auf der Lebesgue-Nullmenge  $M = \{(x_1, x_2) | x_1 \leq 0, x_2 = 0\}$  nicht differenzierbar. Das eindeutig bestimmte Minimum ist  $x^* = (-1, 0) \in M$ .

Verwendet man das Gradientenverfahren mit exakter Schrittweite, dann konvergiert dieses für jeden Startpunkt  $x^{(0)} \in S$ , wobei  $S = \{(x_1, x_2) | x_1 > |x_2| > (\frac{9}{16})^2 |x_1|\}$ , gegen den nicht optimalen Punkt  $\bar{x} = (0, 0)$ .

Zur Konstruktion effizienter numerischer Verfahren für nicht glatte Probleme muss man möglichst viele Eigenschaften konvexer Funktionen ausnutzen.  $\diamond$

**Beispiel 7.4** (Transformation von Problemen).

$$\begin{aligned} \min f_\infty(x_1, x_2) &\Leftrightarrow \min z \\ \text{s.t.} \quad & -z - \xi_i x_1 - x_2 \leq -\eta_i \quad i = 1, \dots, m \\ & -z - \xi_i x_1 + x_2 \leq \eta_i \quad i = 1, \dots, m \end{aligned}$$

Diese Transformation erzeugt war ein glattes, lineares Problem, benötigt dafür aber zusätzliche Variablen und  $2 \cdot m$  Nebenbedingungen.  $\diamond$

### 7.3. Operationen mit konvexen Funktionen

**Lemma 7.5.** Sind  $f_1, \dots, f_n$  konvexe Funktionen und  $t_1, \dots, t_m$  positive reelle Zahlen und es gibt ein  $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$  mit  $f_j(\bar{x}) < +\infty, j = 1, \dots, m$ , dann ist auch

$$f := \sum_{j=1}^m t_j \cdot f_j \quad (7.6)$$

konvex.  $\diamond$

**Lemma 7.6.** Ist  $J$  eine beliebige Indexmenge,  $\{f_j\}_{j \in J}$  eine Familie konvexer Funktionen und es gibt ein  $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$  mit  $\sup_{j \in J} f_j(\bar{x}) < +\infty$  dann ist auch  $f := \sup_{j \in J} f_j$  konvex.  $\diamond$

**Beispiel 7.7.**  $a_1, \dots, a_m, t_1, \dots, t_m \in \mathbb{R}, t_i \geq 0, i = 1, \dots, m$ . Wir definieren:

$$f(x) := \sum_{i=1}^m t_i |x - a_i|. \quad (7.7)$$

Wir definieren weiter:

$$f_i(x) := |x - a_i| = \max\{x - a_i, -x + a_i\}. \quad (7.8)$$

Dann folgt, dass alle  $f_i$  konvexe Funktionen sind und somit auch  $f$ .  $\diamond$

**Bemerkung 7.8.** Offensichtlich ist das Minimum zweier konvexer Funktionen im Allgemeinen nicht konvex.  $\diamond$

## 7.4. Das Subdifferential

**Definition 7.9** (Subdifferential). Sei  $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  konvex. Dann heißt  $s \in \mathbb{R}^n$  **Subgradient** von  $f$  in  $x$ , wenn

$$f(y) \geq f(x) + \langle s, y - x \rangle, \forall y \in \mathbb{R}^n \quad (7.9)$$

gilt. Das **Subdifferential** von  $f$  in  $x$  bezeichnet mit  $\partial f(x)$ , ist die Menge aller Subgradienten von  $f$  in  $x$ .  $\diamond$

**Beispiel 7.10** ( $f(x) = |x|$ ). Für  $x = 0$  und  $s \in [-1, +1]$  und  $y \in \mathbb{R}$  gilt

$$f(y) = |y| \geq sy = f(x) + \langle s, y - x \rangle \Rightarrow [-1, +1] \in \partial f(0). \quad (7.10)$$

Das Subdifferential von  $f$  ist hierbei:

$$\partial f(x) = \begin{cases} +1 & , x > 0 \\ [-1, +1] & , x = 0 \\ -1 & , x < 0 \end{cases} \quad (7.11)$$

$\diamond$

**Satz 7.11.** Für eine konvexe Funktion  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  ist das Subdifferential  $\partial f(x)$  nichtleer, konvex und kompakt.  $\diamond$

**Satz 7.12.** Ist  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  konvex und differenzierbar, dann ist  $\partial f(x) = \{\nabla f(x)\}$  einelementig.  $\diamond$

**Satz 7.13.** Seien  $f_1, f_2 : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  konvex und überall endlich, und  $t_1, t_2 \in \mathbb{R}; t_1, t_2 \geq 0$ . Dann:

$$\partial(t_1 f_1 + t_2 f_2)(x) = t_1 \partial f_1(x) + t_2 \partial f_2(x), \forall x \in \mathbb{R}^n. \quad (7.12)$$

$\diamond$

*Bemerkung 7.14.* Dies ist erweiterbar auf

$$\partial\left(\sum_{i=1}^m t_i f_i\right) = \sum_{i=1}^m t_i \partial f_i(x) \quad (7.13)$$

Um also einen Subgradienten  $s \in \partial f(x)$  zu erhalten, kann man beliebige Subgradienten  $s^i \in \partial f_i(x)$  wählen und dann  $s = \sum_{i=1}^m t_i s^i$  setzen.  $\diamond$

In vielen Anwendungen spielen Maximumfunktionen eine wichtige Rolle.

**Satz 7.15.** Mit konvexen Funktionen  $f_i : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}, i = 1, \dots, m$ , sei die Funktion

$$f(x) = \max_{i=1, \dots, m} f_i(x), \forall x \in \mathbb{R}^n \quad (7.14)$$

definiert.

## 7. Nichtglatte Optimierung

Für  $x \in \mathbb{R}^n$  sei  $I(x) := \{1 \leq i \leq m \mid f(x) = f_i(x)\}$  die Menge der aktiven Indizes. Dann gilt für alle  $x \in \mathbb{R}^n$ :

$$\begin{aligned} \partial f(x) &= \text{co} \bigcup_{i \in I(x)} \partial f_i(x) \\ &= \left\{ \sum_{i \in I(x)} \alpha_i s^i \mid \alpha_i \geq 0, s^i \in \partial f_i(x), i \in I(x), \sum_{i \in I(x)} \alpha_i = 1 \right\} \end{aligned} \quad (7.15)$$

◇

Um einen speziellen Subgradienten  $s \in \partial f(x)$  zu berechnen, kann man also zunächst beliebige Subgradienten  $s^i \in \partial f_i(x), i \in I(x)$ , berechnen und dann eine Konvexkombination

$$s = \sum_{i \in I(x)} \alpha_i s^i, \quad \alpha_i \geq 0, \sum_{i \in I(x)} \alpha_i = 1 \quad (7.16)$$

bilden. Insbesondere gilt:  $s^i \in \partial f(x), \forall i \in I(x)$ .

**Korollar 7.16.** Sind zusätzlich die Funktionen  $f_i, i = 1, \dots, m$  differenzierbar, dann gilt für alle  $x \in \mathbb{R}^n$ :

$$\partial f(x) = \text{co}\{\nabla f_i(x) \mid i \in I(x)\}. \quad (7.17)$$

◇

**Beispiel 7.17** (Maxq-Funktion). Sei  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}, f(x) = \max_{1 \leq i \leq n} x_i^2$  und  $x = (x_1, \dots, x_n)^\top$ . Hier ist  $f_i(x) = x_i^2, i = 1, \dots, n$  und der Subgradient

$$\partial f(x) = \text{co}\{\nabla f_i(x) \mid i \in I(x)\} \quad I(x) = \{1 \leq i \leq n \mid f(x) = x_i^2\} \quad (7.18)$$

Speziell gilt  $\nabla f_i(x) \in \partial f(x), \forall i \in I(x)$ .

◇

**Korollar 7.18.** Zusätzlich seien die  $f_i$  affine Funktionen, d.h.  $f_i(x) = \langle s^i, x \rangle + r_i$  mit  $s^i \in \mathbb{R}^n, r_i \in \mathbb{R}, i \in \{1, \dots, m\} \Rightarrow \partial f(x) = \text{co}\{s^i \mid i \in I(x)\}$ .

◇

**Beispiel 7.19** ( $L^\infty$ -Norm). Sei  $f_\infty(x_1, x_2) = \max_{i=1, \dots, m} |\xi_i x_1 + x_2 - \eta_i|$ .

Mit  $g_i(x) = \xi_i x_1 + x_2 - \eta_i, i \in \{1, \dots, m\}$ .  $g_i$  kann dann auch geschrieben werden als  $g_i(x) = \langle s, x \rangle - \eta_i, s_i = (\xi_i, 1)^\top$ . Weiter sei  $h_i(x) = |g_i(x)| = \max\{g_i(x), -g_i(x)\}$ .  $f_\infty$  kann nun geschrieben werden als:

$$f_\infty(x) = \max_{i=1, \dots, m} h_i(x) \quad (7.19)$$

Laut Korollar 7.18 gilt:

$$\partial h_i(x) = \begin{cases} \{s^i\} & , g_i(x) > 0 \\ \{-s^i\} & , g_i(x) < 0 \\ [-s^i, s^i] & , g_i(x) = 0 \end{cases} \quad (7.20)$$



Wir definieren nun  $\epsilon_i(x) \in \{1, -1\}$ , genauer:

$$\epsilon_i(x) = \begin{cases} +1 & , g_i(x) \geq 0 \\ -1 & , g_i(x) < 0 \end{cases} \quad (7.21)$$

Daraus folgt  $\epsilon_i(x) \cdot s^i \in \partial h_i(x)$ . Mit  $I(x) = \{1 \leq i \leq m \mid f_\infty(x) = h_i(x)\}$  folgt  $\text{co}\{\epsilon_i(x) \cdot s^i \mid i \in I(x)\} \subseteq \partial f_\infty(x)$ . Speziell gilt  $\epsilon_i(x) \cdot s^i \in \partial f_\infty(x)$  für alle  $i \in I(x)$ .  $\diamond$

**Satz 7.20.** Für eine konvexe Funktion  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  sind folgende Aussagen äquivalent:

(1)  $x^*$  ist Lösung von  $\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x)$

(2)  $0_n \in \partial f(x^*)$ .

$\diamond$

*Beweis.* Es gilt  $f(x) \geq f(x^*)$ ,  $\forall x \in \mathbb{R}^n$  genau dann, wenn (Definition Subgradient)

$$f(x) \geq f(x^*) + \langle 0_n, x - x^* \rangle, \forall x \in \mathbb{R}^n, \quad (7.22)$$

was äquivalent zu  $0_n \in \partial f(x^*)$  ist.  $\square$

**Beispiel 7.21** ( $f(x) = \|x\|$ ). Es gilt  $f(x) = 0 = f(0) + \langle 0_n, x - 0 \rangle \Rightarrow 0_n \in \partial f(0_n)$ . Daraus folgt  $0_n$  ist ein Minimum von  $f$ .  $\diamond$

## 7.5. Das Subgradientenverfahren

**Annahme:** Zu jedem Vektor  $x \in \mathbb{R}^n$  kann man (mindestens) einen Subgradienten  $s(x) \in \partial f(x)$  berechnen.

**Verfahren:** Wähle einen Startpunkt  $x^{(0)} \in \mathbb{R}^n$ ,  $k = 0$

1. Berechnen einen Subgradienten  $s^{(k)} \in \partial f(x^{(k)})$
2. Abbruchkriterium: Ist  $s^{(k)} = 0_n$  (d.h.  $0_n \in \partial f(x^{(k)})$ ), dann stoppe das Verfahren
3. Setze

$$d^{(k)} = -\frac{s^{(k)}}{\|s^{(k)}\|}. \quad (7.23)$$

Wähle eine Schrittweite  $\sigma_k > 0$  und setze

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \sigma_k \cdot d^{(k)}. \quad (7.24)$$

4. Setze  $k = k + 1$  und gehe zu 1.

## 7. Nichtglatte Optimierung

*Bemerkung 7.22.* Anstatt des Abbruchkriteriums  $s^{(k)} = 0_n$  sollte in der Praxis

$$\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\| \leq \epsilon \quad (7.25)$$

und eine maximale Iterationszahl genutzt werden. Weiter sollte die Abbruchbedingung

$$\|f(x^{(k+1)}) - f(x^{(k)})\| \leq \epsilon \quad (7.26)$$

nicht genutzt werden. Die Schrittweite sollte nicht mit dem Armijo-Verfahren berechnet werden sondern mit

$$\sigma_k = \frac{\sigma}{k+h} \quad (7.27)$$

oder

$$\sigma_k = \frac{\sigma}{\sqrt{k}} \quad (7.28)$$

berechnet werden.  $\diamond$

*Bemerkung 7.23* (Nachteile des Subgradientenverfahren).

- Die Suchrichtung  $-s^{(k)}$  muss keine Abstiegsrichtung sein.
  - Die Schrittweite  $\sigma_k$  kann nicht durch das Armijo-Verfahren bestimmt werden
  - $\{f(x^{(k)})\}$  muss nicht monoton fallend sein
- $\Rightarrow$  kein Abstiegsverfahren
- Abbruchkriterium ist unrealistisch und praktisch nie erfüllt  $\diamond$

**Beispiel 7.24** ( $f(x) = \|x\|$ ). Das eindeutig bestimmte Minimum:  $x^* = 0$ . Starte das Verfahren in  $x^{(0)} = x^* = 0$  und wähle  $s^{(0)} \neq 0 \Rightarrow$  Abbruchkriterium nicht erfüllt. D.h. im nächsten Schritt würde man sich sogar von der Lösung entfernen.  $\diamond$

**Lemma 7.25.** Ist  $f_{\mathbb{R}}^n \rightarrow \mathbb{R}$  konvex,  $x^*$  ein beliebiges Minimum von  $f$  und  $x^{(k)}$  kein Minimum von  $f$ . Dann gibt es ein  $T_k > 0$ , so dass für das Subgradientenverfahren gilt:

$$\|x^{(k+1)} - x^*\| < \|x^{(k)} - x^*\|, \forall \sigma_k \in (0, T_k). \quad (7.29)$$

$\diamond$

*Bemerkung 7.26* (Geometrische Interpretation). Der Winkel zwischen der Richtung  $-s^{(k)}$ , in der wir uns ausgehend von  $x^{(k)}$  bewegen und der Idealrichtung  $x^* - x^{(k)}$  ist kleiner als  $90^\circ$ . D.h., bewegt man sich von  $x^{(k)}$  aus Richtung  $-s^{(k)}$  nicht zu weit, so ist  $x^{(k+1)}$  näher an  $x^*$  als  $x^{(k)}$ . Da man dieses  $T_k$  praktisch nicht kennt, weiß man nur, dass die Schrittweite  $\sigma_k$  hinreichend klein sind muss. Man verlangt daher

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \sigma_k = 0. \quad (7.30)$$

Das allein reicht jedoch noch nicht aus. Ist nämlich  $r := \sum_{k=0}^{\infty} \sigma_k < \infty$ , dann gilt für alle  $k$

$$\|x^{(0)} - x^{(k)}\| \leq \sum_{i=0}^{k-1} \|x^{(i)} - x^{(i+1)}\| = \sum_{i=0}^{k-1} \sigma_i \leq r. \quad (7.31)$$

D.h. alle  $x^{(k)}$  liegen in der Kugel  $\bar{B}(x^{(0)}, r)$ . Um  $x^*$  erreichen zu können muss  $r$  hinreichend groß sein. Dies ist sichergestellt, wenn man

$$\sum_{k=0}^{\infty} \sigma_k = \infty \quad (7.32)$$

verlangt. Damit wird (aber nur) die Konvergenz der besten Funktionswerte garantiert.  $\diamond$

*Bemerkung 7.27.* Statt  $\sum \sigma_k = \infty$  zu fordern kann man auch  $\sum \sigma_k^2 < \infty$  fordern.  $\diamond$

**Beispiel 7.28.** •  $\sigma_k = \frac{\sigma}{k+b}$  für festes  $\sigma, b > 0$   
(Spezialfall:  $\sigma_k = \frac{1}{k}$ )

- $\sigma_k = \frac{\sigma}{\sqrt{k}}$  für festes  $\sigma > 0$   
(Spezialfall:  $\sigma_k = \frac{1}{\sqrt{k}}$ )

$\diamond$

*Bemerkung 7.29.* Im Gegensatz zum Gradientenverfahren, werden hier die Schrittweiten offline gesteuert. Ein Sinnvolles Abbruchkriterium ist demnach  $\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\| \leq \epsilon_1$  ( $\|s^{(k)}\| \leq \epsilon_2$ ) oder die maximale Iterationszahl.  $\diamond$

## 7.6. Laufzeitanalyse

Sei  $f \in \mathcal{F}_L^{0,0}$ , d.h.  $|f(x) - f(y)| \leq L \cdot \|x - y\|$ , konvex und Lipschitz stetig genau dann wenn  $\|s\| \leq L$  für alle  $s \in \partial f(x), \forall x$ .

$$\begin{aligned} \|x^{(k+1)} - x^*\|^2 &= \left\| x^{(k)} - \sigma_k \frac{s^{(k)}}{\|s^{(k)}\|} - x^* \right\|^2 \\ &= \left\| x^{(k)} - x^* \right\|^2 - 2\sigma_k \frac{s^{(k)}}{\|s^{(k)}\|}^\top (x^{(k)} - x^*) + \sigma_k^2 \frac{s^{(k)2}}{\|s^{(k)}\|^2} \\ &\leq \left\| x^{(k)} - x^* \right\|^2 - 2 \frac{\sigma_k}{\|s^{(k)}\|} (f(x^{(k)}) - f(x^*)) + \sigma_k^2 \text{ (da Subgradient)} \\ &\stackrel{\|s^{(k)}\| \leq L}{\leq} \left\| x^{(k)} - x^* \right\|^2 - 2 \frac{\sigma_k}{L} (f(x^{(k)}) - f(x^*)) + \sigma_k^2 \end{aligned}$$

## 7. Nichtglatte Optimierung

Das Aufsummieren von  $i = 0, \dots, k$  ergibt:

$$\begin{aligned} 0 &\leq \underbrace{\|x^{(k+1)} - x^*\|^2}_{\geq 0} \\ &\leq \|x^{(0)} - x^*\|^2 - \frac{2}{L} \sum_{i=0}^k \sigma_i (f(x^{(i)}) - f(x^*)) + \sum_{i=0}^k \sigma_i^2 \end{aligned}$$

Daraus folgt:

$$\frac{2}{L} \sum_{i=0}^k \sigma_i (f(x^{(i)}) - f(x^*)) \leq \|x^{(0)} - x^*\|^2 + \sum_{i=0}^k \sigma_i^2 \quad (7.33)$$

Es gilt:

$$\begin{aligned} &\left( \sum_{i=0}^k \sigma_i \right) \min_i \{f(x^{(i)}) - f(x^*)\} \leq \sum_{i=0}^k \sigma_i (f(x^{(i)}) - f(x^*)) \\ \Rightarrow \quad &\frac{2}{L} \left( \sum_{i=0}^k \sigma_i \right) \min_i \{f(x^{(i)}) - f(x^*)\} \leq \|x^{(0)} - x^*\|^2 + \sum_{i=0}^k \sigma_i^2 \end{aligned}$$

Dies wird nun umgeschrieben als:

$$f_{best}^{(k)} - f(x^*) := \min_i f(x^{(i)}) - f(x^*) \leq \frac{L}{2} \frac{\|x^{(0)} - x^*\|^2 \sum_{i=0}^k \sigma_i^2}{\sum_{i=0}^k \sigma_i} \quad (7.34)$$

Die beste Strategie bei genau  $k$  Iterationen ist:

$$\sigma_i = \frac{\|x^{(0)} - x^*\|}{\sqrt{k+1}} \quad (7.35)$$

Woraus folgt:

$$f_{best}^{(k)} - f(x^*) \leq \frac{L}{2} \frac{\|x^{(0)} - x^*\|}{\sqrt{k+1}} \quad (7.36)$$

Falls die Anzahl der Iterationen unbekannt ist wird  $\sigma_i$  berechnet als:

$$\sigma_i = \frac{h}{\sqrt{i+1}} \quad (7.37)$$

Woraus folgt:

$$f_{best}^{(k)} - f(x^*) \leq \frac{L}{2} \frac{\|x^{(0)} - x^*\|^2 \cdot h \cdot \log(k+1)}{h \cdot \sqrt{k+1}} \quad (7.38)$$

Insgesamt kann nach  $k$  Iterationen höchstens ein Fehler  $\mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{k}}\right)$  erhalten werden. Soll stattdessen

$$f_{best}^{(k)} - f(x^*) \leq \epsilon \quad (7.39)$$

gelten, werden mindestens  $\mathcal{O}\left(\frac{1}{\epsilon^2}\right)$  Iterationen benötigt ( $\epsilon = \frac{1}{\sqrt{k}} \Leftrightarrow k = \frac{1}{\epsilon^2}$ ).

# A. Mathematische Grundlagen

**Definition A.1.** Eine symmetrische Matrix  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  heißt *positiv definit*, wenn

$$x^T A x > 0 \quad \forall x \in \mathbb{R}^n, x \neq 0_n$$

gilt. Die Matrix  $A$  heißt *positiv semidefinit*, wenn

$$x^T A x \geq 0 \quad \forall x \in \mathbb{R}^n$$

gilt. ◇

**Beispiel A.2.**  $A = I_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$

$$\begin{aligned} x^T A x &= \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \\ &= x_1^2 + x_2^2 > 0, \end{aligned}$$

wobei  $\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \neq \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ . ◇

**Definition A.3** (Differenzierbarkeit). Seien  $f: D \rightarrow \mathbb{R}$  und  $D \subseteq \mathbb{R}^n$  offen und existiere der Gradient

$$\nabla f(x) = \left( \frac{\partial f}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n} \right)^T$$

für alle  $x \in D$ . Dann heißt  $f$  *differenzierbar* auf  $D$ . ◇

**Definition A.4** (zweimalige Differenzierbarkeit). Seien  $f: D \rightarrow \mathbb{R}$  und  $D \subseteq \mathbb{R}^n$  offen und existiere die Hessematrix  $\nabla^2 f(x) \subseteq \mathcal{S}^n$  mit

$$\nabla^2 f(x) = \left( \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} \right)_{i,j \in [n]}$$

für alle  $x \in D$ . Dann heißt  $f$  *zweimal differenzierbar* auf  $D$ . ◇